

TC
Niğde Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Ana Bilim Dalı

KRİSTAL ALAN VARLIĞINDA NANOPARÇACIĞIN MANYETİK
ÖZELLİKLERİNİN BÜYÜKLÜĞE BAĞLI OLARAK İNCELENMESİ

ZAFER DEMİR

Mayıs 2013

TC
NİĞDE ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANA BİLİM DALI

KRİSTAL ALAN VARLIĞINDA NANOPARÇACIĞIN MANYETİK
ÖZELLİKLERİNİN BÜYÜKLÜĞE BAĞLI OLARAK İNCELENMESİ

ZAFER DEMİR

Yüksek Lisans Tezi

Danışmanlar

Doç. Dr. Orhan YALÇIN

Prof. Dr. Rıza ERDEM

Mayıs 2013

Zafer DEMİR tarafından Doç. Dr. Orhan YALÇIN ve Prof. Dr. Rıza ERDEM danışmanlığında hazırlanan “Kristal Alan Varlığında Nanoparçacığın Manyetik Özelliklerinin Büyüklüğe Bağlı Olarak İncelenmesi” adlı bu çalışma jürimiz tarafından Niğde Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında Yüksek Lisans tezi olarak kabul edilmiştir.

Başkan : Prof. Dr. Nusret GÜÇLÜ Necmettin Erbakan Üniversitesi

g. Nusret

Üye : Prof. Dr. Hasan Şevki MERT Selçuk Üniversitesi

Hasan Mert

Üye : Prof. Dr. Refik KAYALI Niğde Üniversitesi

R. Kayali

Üye : Doç. Dr. Orhan DÖNMEZ Niğde Üniversitesi

Orhan Dönmez

Üye : Doç. Dr. Orhan YALÇIN Niğde Üniversitesi

O. Yalçın

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. Osman SIVRİKAYA
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.

Zafer DEMİR

ÖZET

KRİSTAL ALAN VARLIĞINDA NANOPARÇACIĞIN MANYETİK ÖZELLİKLERİNİN BÜYÜKLÜĞE BAĞLI OLARAK İNCELENMESİ

DEMİR, Zafer

Niğde Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Ana Bilim Dalı

Danışman : Doç. Dr. Orhan YALÇIN
İkinci Danışman : Prof. Dr. Rıza ERDEM

Mayıs 2013, 46 sayfa

Bu tezde, kare ve altıgen örgüler üzerinde tanımlanan bilineer (J) ve kristal alan (Δ) etkileşmeli spin-1 Ising modeli çekirdek-yüzey nanoparçacıkların manyetik özelliklerini incelemek amacıyla kullanıldı. Nanoparçacığın çekirdek (C), arayüzey (CS) ve yüzey (S) kesimlerindeki Ising spinleri çift yaklaşım yöntemiyle dahil edildi. Model Hamiltonyen ifadesi kullanılarak C , CS ve S kesimleri için bağ enerji parametreleri (ε_{ij}) tespit edildi ve bağ değişkenleri (P_{ij}) için özuyumlu denklemler türetildi. P_{ij} 'nin ve hal denkleminin (mıknatıslanma eşitliğinin) sayısal çözümünden nanoparçacığın sıcaklık ve yarıçap gelişimi farklı manyetik alan ve kristal alan değerleri için çalışıldı. Kare ve altıgen örgülü homojen ve kompozit nanoparçacık için spin valf davranışının kaynağı farklı sıcaklık ve manyetik alanda gözlemlendi.

Anahtar Sözcükler: Manyetik Nanoparçacıklar, Ising Modeli, Çift Yaklaşım Yöntemi, Kristal Alan Etkileşmesi

SUMMARY

INVESTIGATION OF SIZE DEPENDENCE OF MAGNETIC PROPERTIES FOR NANOPARTICLES WITH CRYSTAL FIELDS EFFECTS

DEMİR, Zafer

Niğde University

Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Physics

Supervisor : Assoc. Prof. Dr. Orhan YALÇIN

Co-Advisor : Prof. Dr. Rıza ERDEM

May 2013, 46 pages

In this thesis, spin-1 Ising model with bilinear (J) and crystal field (Δ) interactions on square and hexagonal lattices is used to investigate the magnetic properties of core-surface 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 (ε_{ij}) for C , CS and S parts were determined and a set of self-consistent equations for the bond variables (P_{ij}) were derived. From the numerical solutions of P_{ij} and the equation of state (or magnetization equation), the temperature and diameter evolutions of nanoparticles were studied for different values of magnetic and crystal field. The origin of the spin valve behavior for homogeneous and composite nanoparticles with square and hexagonal lattice structures has been observed at various temperatures and magnetic fields.

Keywords: Magnetic Nanoparticle, Ising Models, Pair Approximation Methods, Crystal Field Effects

ÖNSÖZ

Bu yüksek lisans çalışmasında, kristal alan varlığında nanoparçacığın manyetik özelliklerinin büyüklüğe bağılılığı incelenmiştir. Kristal alan etkisiyle nanoparçacıkların ikinci derece faz geçişinin yanında birinci derece faz geçişi de yapıp yapmadığı incelenmiştir. Altıgen ve kare örgülü homojen ve kompozit nanoparçacık için spin valf davranışının kaynağı farklı sıcaklık ve manyetik alanda gözlenmiştir.

Tez çalışmam boyunca yardım ve desteğini esirgemeyen tez danışmanlarım Sayın Doç. Dr. Orhan YALÇIN ve Sayın Prof. Dr. Rıza ERDEM'e sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

Çalışmam sırasında vaktini ayırıp ilgi ve desteğini esirgemeyen oda arkadaşlarım Şahin ÜNLÜER ve Songül ÖZÜM'e sonsuz teşekkür ederim.

Yaşamım boyunca maddi ve manevi desteğini esirgemeyen annem Gönül DEMİR, babam Muzaffer DEMİR ve kardeşlerime sonsuz şükranlarımı sunarak hayatta bütün güzelliklerin onlarla olmasını dilerim.

İÇİNDEKİLER DİZİNİ

ÖZET	iv
SUMMARY	v
ÖNSÖZ.....	vi
İÇİNDEKİLER DİZİNİ.....	vii
ÇİZELGELER DİZİNİ	ix
ŞEKİLLER DİZİNİ	x
SİMGE VE KISALTMALAR	xiii
BÖLÜM I GİRİŞ	1
BÖLÜM II KURUMSAL BİLGİ	4
2.1 Manyetizma	4
2.1.1 Diyamanyetik sistem.....	4
2.1.2 Paramanyetik sistem	6
2.1.3 Ferromanyetik sistem.....	7
2.1.4 Antiferromanyetik sistem	9
2.1.5 Ferrimanyetik sistem.....	10
2.2 Nanoparçacıklar	11
2.3 Tek Dömen Nanoparçacıklar ve Nano Sistemlerdeki Yeri	12
BÖLÜM III MATERYAL VE YÖNTEM	13
3.1 Ising Modeli	13
3.2 Çift Yaklaşım Yöntemi	14
3.3 Dipol-Dipol Etkileşmeli Nanoparçacık Modellerinin Kısaca İncelenmesi	15
3.4 Kristal Alan Etkisindeki Nanoparçacığın $S = 1$ Modeli ile İncelenmesi	26
BÖLÜM IV BULGULAR VE TARTIŞMA	28

4.1 Mıknatıslanma Eğrileri ve Faz Diyagramları	28
4.2 Histerezis Eğrileri	33
BÖLÜM V SONUÇ.....	37
KAYNAKLAR	39
ÖZ GEÇMİŞ	45
Tez Çalışmasından Üretilen Eserler	46

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 3.1. Çift yaklaşım altında $S = 1/2$ ve $S = 1$ Ising modellerinin karşılaştırılması.....	16
Çizelge 3.2. Nanoparçacığın yarıçapına göre çekirdek, yüzey ve ara yüzeydeki toplam spin sayıları ve spin çifti sayıları	19
Çizelge 3.3. $S = 1/2$ ve $S = 1$ için bağ enerjileri	20
Çizelge 3.4. Kristal alan etkileşmeli nanoparçacığın $S = 1$ bağ enerjileri	27

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1. Diyamanyetik bir malzemede manyetik momentlerin temsili dizilimleri	5
Şekil 2.2. Diyamanyetik bir malzemenin $m-h$ grafiği	5
Şekil 2.3. Paramanyetik bir malzemede manyetik momentlerin (a) dış manyetik alan yokken (b) dış manyetik alan varken temsili dizilimi.....	6
Şekil 2.4. Paramanyetik bir malzemenin temsili $m-h$ grafiği	6
Şekil 2.5. (a) İkinci derece faz dönüşümü (b) birinci derece faz dönüşümü $m-T$ grafiği	7
Şekil 2.6. Ferromanyetik bir malzemede manyetik momentlerin (a) dış manyetik alan yokken (b) dış manyetik alan varken temsili dizilimi.....	8
Şekil 2.7. Ferromanyetik bir malzemenin temsili $m-h$ grafiği	8
Şekil 2.8. Ferromanyetik bir malzemenin histerezis eğrisi	9
Şekil 2.9. Antiferromanyetik bir malzemede manyetik dipol momentlerin (a) dış manyetik alan yokken (b) dış manyetik alan varken temsili dizilimi	10
Şekil 2.10. Antiferromanyetik bir malzemenin temsili $m-h$ grafiği	10
Şekil 2.11. Ferrimanyetik bir malzemede manyetik momentlerin (a) dış manyetik alan yokken (b) dış manyetik alan varken temsili dizilimi.....	11
Şekil 2.12. Ferrimanyetik bir malzemenin temsili $m-h$ grafiği	11
Şekil 2.13. Nanoyapılı malzemelerin manyetik özelliklerinin parçacık büyüklüğüne bağlı değişimi ve bu değişime karşılık gelen histerezis eğrisi	12
Şekil 3.1. Üç boyutta hegzagonal örgü üzerine dizilmiş spinlerden oluşan küresel tek domenli bir manyetik nanoparçacığın kesiti. Noktalı çizgiler iki boyutta sonlu spin dizilerinden kabukları göstermektedir. Nanoparçacığın yarıçapı (R) kabuk sayısına bağlı olarak artar	17

- Şekil 3.2. İki boyutta dokuz kabuktan oluşan altıgen örgünün şematik gösterim 18
- Şekil 3.3. İki boyutta dokuz kabuktan oluşan kare örgünün şematik gösterimi 18
- Şekil 3.4. (a) $S = 1/2$ Ising nanoparçacığı için normalize mıknatıslanmanın (m) indirgenmiş sıcaklığa göre gelişimi $h = 0.0 - 0.1$ (b) şekil 3.4(a) ile aynı ancak $S = 1$ Ising nanoparçacığı için elde edildi (c) mıknatıslanma eğrilerinin parçacık yarıçapına bağlılığı $h = 0.0$ (d) şekil 3.4 (c) ile aynı ancak T_C sıcaklığının parçacık yarıçapına bağlılığı gösterildi
- $J_0 = J_C = J_{CS} = J_S = 1$ 22
- Şekil 3.5. Şekil 3.4 ile aynı ancak $J_0 = J_C = J_S = 1, J_{CS} = -J_0 = -1$ 23
- Şekil 3.6. (a) Altıgen örgü yapısında ve farklı büyüklüklerdeki $S = 1/2$ Ising nanoparçacığı için histerezis eğrileri (b) şekil 3.6 (a) ile aynı fakat kare örgü için elde edilmiştir (c) şekil 3.6 (a) ile aynı fakat $S = 1$ için elde edilmiştir (d) şekil 3.6 (b) ile aynı fakat $S = 1$ için elde edilmiştir
- $J_0 = J_C = J_{CS} = J_S = 1$ ve $T = 300J_0/k$ 24
- Şekil 3.7. Koersif alanın (h_C) $1/R^2$ ye göre değişimi..... 25
- Şekil 3.8. Şekil 3.6 ile aynı fakat $J_0 = J_C = J_S = 1, J_{CS} = -J_0$ 25
- Şekil 3.9. (a) Altıgen örgü yapısında beş kabuktan ($R = 5$) oluşan $S = 1/2$ Ising nanoparçacığı için histerezis eğrilerinin sıcaklıkla değişimi (b) koersif alanın $(k_B T)^{1/2}$ ile lineer değişimi $J_0 = J_C = J_S = 1, J_{CS} = -J_0$ 26
- Şekil 4.1. (a) Farklı D değerleri için altıgen örgüye ait mıknatıslanma eğrileri (b) Şekil 4.1 (a) ile aynı ancak kare örgü için elde edilmiştir (c) farklı R değerleri için altıgen örgüye ait mıknatıslanma eğrilerinin üçlü kritik nokta davranışları (d) şekil 4.1 (c) ile aynı ancak kare örgü için elde edilmiştir.

- (e) altıgen örgü için $T - D$ düzleminde faz diyagramı (f) şekil 4.1 (e) ile aynı ancak kare örgü için elde edilmiştir $J_0 = J_C = J_{CS} = J_S = 1$ 29
- Şekil 4.2. Şekil 4.1 ile aynı ancak $J_0 = J_C = J_S = 1, J_{CS} = -J_0$ 30
- Şekil 4.3. (a) Altıgen yapıda, D değerlerinin homojen nanoparçacığın büyüklüğüne göre farklı manyetik alan altındaki ($h=0.0$ ve $h=0.9$) gelişimi (b) altıgen yapıda, farklı büyüklükteki homojen nanoparçacıkların kritik sıcaklık değerleri. Şekil 4.2.e deki $R=6, 8,$ ve 10 büyüklüğündeki nanoparçacıkların üçlü kritik noktalarıyla uyumlu (c) kare örgüde, D değerlerinin homojen nanoparçacığın büyüklüğüne göre farklı manyetik alan altındaki ($h=0.0$ ve $h=0.9$) gelişimi (d) kare örgüde, farklı büyüklükteki homojen nanoparçacıkların kritik sıcaklık değerleri şekil 4.2.(f) deki $R=6, 8,$ ve 10 büyüklüğündeki nanoparçacıkların üçlü kritik noktalarıyla uyumlu 32
- Şekil 4.4. Şekil 4.3 ile aynı ancak $J_0 = J_C = J_S = 1, J_{CS} = -J_0$ 32
- Şekil 4.5. Altıgen yapılı nanoparçacığın birinci ve ikinci bölgeleri için (a), üçüncü bölge için (b), dördüncü bölge için (c), histerezis eğrileri. Kare örgülü nanoparçacığın birinci ve ikinci bölgeleri için (d), üçüncü bölge için (e), dördüncü bölge için (f), histerezis eğrileri $J_0 = J_C = J_{CS} = J_S = 1$ 34
- Şekil 4.6. Şekil 4.5 ile aynı ancak $J_0 = J_C = J_S = 1, J_{CS} = -J_0$ 35
- Şekil 4.7. (a) $R=6$ kabuklu homojen bir nanoparçacığın histerezis eğrilerinin sıcaklıkla gelişimi (b) $R=6$ kabuktan oluşan nanoparçacığın kare ve altıgen örgü için koersif alanların $(k_B T)^{1/2}$ 'ye göre değişimi. Burada $J_0 = J_C = J_{CS} = J_S = 1$ 36

SİMGE VE KISALTMALAR

Simgeler	Açıklama
D	Kristal Alan
J	Değiş Tokuş Etkileşme Sabiti
K	Kuadrupol-Kuadrupol Etkileşme Sabiti
L	Dipol-Kuadrupol Etkileşme Sabiti
p_i	Spin Durum Değişkeni
γ	Koordinasyon Sayısı
h	Dış Manyetik Alan
m	Mıknatıslanma Değeri
P_{ij}	Bağ Değişkeni
S	Spin
E	Etkileşme Enerjisi
S_E	Entropi
ε_{ij}	Bağ Enerjisi
Φ	Serbest Enerji
Z	Bölüşüm Fonksiyonu
Q	Kuadrupol Moment
H	Hamiltoniyen
H_C	Çekirdek Hamiltoniyeni
H_{CS}	Ara Yüzey Hamiltoniyeni
H_S	Yüzey Hamiltoniyeni
S_i	Çekirdek Spin Değeri
σ_i	Yüzey Spin Değeri
T_C	Kritik Sıcaklık
h_C	Koersif Alan
R	Yarıçap

k_B	Boltzman Sabiti
β	Beta Fonksiyonu
m_s	Doyum Miknatislanması
m_r	Kalıcı Miknatislanma

Kısaltmalar

Açıklama

NP	Nanoparçacık
FM	Ferromanyetik
AFM	Antiferromanyetik
BEG	Blume-Emery-Griffiths
PM	Paramanyetik
SP	Süperparamanyetik
TCP	Three Critical Point (Üçlü Kritik Nokta)

BÖLÜM I

GİRİŞ

1–100 nm arasındaki boyutlar nano bölge olarak tanımlanır. Son yıllarda, nanoparçacıklar ve kuantum noktaları manyetik nano yapıların önemli bir sınıfını oluşturmaktadır (Aktaş vd., 2003; Aktaş vd., 2006; Kartopu ve Yalçın, 2010). Nanoparçacıklar (NP) Fizik, Kimya, Biyoloji, Biyotıp ve Spintronik gibi bilim dallarında ilgi çekici araştırma konusudur. NP'nin büyüklüğü nanometre ölçeği ile kıyaslanacak kadar azaldığında NP 'ler yeni ve ilginç özellikler sergilemeye başlar. Bu özelliklerin başında kuantum boyut etkisi gelir. Hatta makroskopik parçacıklarla kıyaslandığında nanoparçacıkların kendine özgü fiziksel karakteristiklerin büyük ölçüde değiştiği gözlenir. Manyetosensör, biyosensör, manyetoelektronik, veri depolama ortamları, bilgisayar hard diskleri, mikrodalga elektronik aletler ve nanotransistörler nanoparçacıkların potansiyel teknolojik uygulama alanlarından bazılarıdır. Özellikle çekirdek-yüzey tipi nanoparçacıkların yüksek yoğunluklu verinin optik bilgisayarlara nakli, nanorobot montajı ve sert disk oluşturmak gibi teknolojilerdeki kullanımı son derece önemlidir. Nanoparçacıklar yeni nesil manyeto-elektronikteki ince film cihazları, spin vanaları, spin-transistörü, spin bağımlı tünelleme cihazları ile yakından ilgilidir (Babin vd., 2003).

Genel olarak nanoparçacıklar çekirdek (C) ve yüzey (S) olarak iki bölgeden oluşur. Bu tip parçacıklara “çekirdek-yüzey (CS) nanoparçacıkları” denir. Her iki bölge spinleri kendi aralarında ferromanyetik (FM) veya antiferromanyetik (AFM) olarak etkileşebilirler. Bir de CS ara yüzeyinde FM ya da AFM spin-spin etkileşmesi söz konusudur. Tek domenli nanoparçacıkların ilk teorik açıklaması 1948 yılında Stoner-Wohlfarth tarafından yapıldı (Stoner ve Wohlfarth, 1948). Günümüzde ise parçacıkların manyetik yapısı ve histerezis özellikleri incelenirken klasik ve kuantum spin modelleri kullanılmaktadır. Bu modellerin başında 1920 yılında Lenz'in öğrencisi Ising tarafından ferromanyetizma problemi için önerilen ve kuvvetli etkileşen parçacıkların istatistiksel olarak incelemesini sağlayan Ising modeli gelmektedir (Ising, 1925). Düzen parametresi ve spin durum sayısına göre model değişik isimler alır. Örneğin iki spin durumu (yukarı-aşağı) ve tek düzen parametresi (mıknatıslanma) ile karakterize edilen fiziksel bir sistem $S = 1/2$ Ising sistemi (Ising,1925), üç spin durumu (yukarı-boşluk-aşağı) ve

iki düzen parametresi (dipol ve kuadrupol-dört kutup) ile incelenebilen sistemler $S = 1$ Ising sistemi ya da $S = 1$ Blume-Emery-Griffiths (BEG) (Blume vd., 1971) modeli adıyla bilinir. Tarihsel gelişim içerisinde $S = 1/2$ Ising modelinin sıfır manyetik alanda iki boyutta dikdörtgen örgü üzerinde yapılan analitik çözümü neticesinde faz geçişi yaptığı bulundu (Onsager, 1944). $S = 1$ Blume-Emery-Griffiths (BEG) modelinin birçok farklı teknikten yararlanılarak yapılan çalışmalarda ise zengin bir denge faz özelliklerine sahip olduğu gözlemlendi (Takahashi ve Tanaka, 1980; Benyoussef vd., 1987; Tucker, 1989; Koza vd., 1990; Hoston ve Berker, 1991; Netz ve Berker, 1993; Keskin ve Arslan, 1995; Goveas ve Mukhopadhyay, 1997). Bu yönüyle model birçok araştırmacının ilgisini çekmesiyle birlikte modelin uygulama alanı da genişlemiştir (Lee ve Landau, 1979; Gu vd., 1992; Bolle, 2004; Burns vd., 2004; Zahraouy vd., 2006; Gauvin vd., 2010; Yang, 2010).

Nano boyutlu parçacıkların klasik spin modeli ilk olarak Rego ve Figueiredo (2001) tarafından geliştirildi. Bu incelemede, önce tek domenli bir nanoparçacık iki boyutlu altıgen örgü yapısında tasarlandı ve örgü noktalarına yerleşmiş en yakın komşu etkileşmeli Ising spinlerinden ($S = 1/2$) oluştuğu düşünüldü. Daha sonra Bethe-Peierls yaklaşımı kullanılarak boyuna dış manyetik alan varlığında klasik mıknatıslanma denklemleri türetildi ve CS tipi kompozit nanoparçacığın manyetik özellikleri ana hatlarıyla açıklandı. Bir başka çalışmada da enine dış manyetik alan altındaki inceleme için ortalama alan ve etkin alan teorileri kullanıldı (Kaneyoshi, 2005). Bu teorik yöntemlerden başka Monte Carlo simülasyonu ile CS tipi küresel ve kübik parçacıkların sonlu ölçekleme çalışmaları yapılarak parçacıklarda yüzey etkileri araştırıldı (Iglesias ve Labarta, 2001; Iglesias vd., 2001; Leite ve Figueiredo, 2004; Zaim vd., 2009).

Yakın zamanda spini $S = 1$ olan atomlardan oluşmuş nanoparçacığın manyetik özellikleri üzerine ilk teorik çalışma Kokorina ve Medvedev (2007) tarafından yapıldı. Bu çalışmada parçacık içi izotropik değiş-tokuş etkileşmeli (J) bir süperparamanyetik nanoparçacığın tek iyon anizotropi sabiti veya kristal alan sabiti (D) varlığındaki manyetik özellikleri ortalama alan yaklaşımına dayalı bölüşüm fonksiyonu kullanılarak incelendi. Özüm (2010) kuadrupol-kuadrupol (K) etkileşmeli $S = 1$ nanoparçacık modeli üzerinde çalıştı. Çift (bağ) yaklaşımı altında yapılan incelemede ise, dipol-dipol

(J) etkileşmeli homojen ve kompozit nanoparçacığın mıknatıslanma eğrileri ile histerezis eğrileri elde edilerek boyut etkisi araştırıldı (Yalçın vd., 2008; Yalçın vd., 2012). Bu sonuçlar $S = 1/2$ sonuçları ile karşılaştırıldı (Yalçın vd., 2012). Çiftçi; (2011) kuadropol-kuadropol (K) ile dipol-kuadropol (L) etkileşmelerini dâhil ederek nanoparçacığın $S = 1$ modelini daha da geliştirdi ve L sabitinin dâhil edilmesi ile kapalı histerezis eğrilerinin negatif manyetik alan eğrilerine doğru kaydığını buldu. Bu çalışmalardan da anlaşıldığı gibi nanoparçacığın veya nanoparçacık sistemlerinin içerisinde dipol-dipol, kuadropol-kuadropol ve dipol-kuadropol etkileşmeleri dikkate alındığı halde kristal alan sabiti ve bu sabitin nanoparçacığın manyetik özelliklerine etkisi üzerinde fazla durulmamıştır. D sabiti manyetik nano-yapılardan sadece ferrimanyetik nanoparçacık Ising modelinin Monte Carlo benzetim çalışmasında ve iki boyutta Ising nano-adacıkları ile $S = 1$ Ising nanotellerinin etkin alan teorisinde dahil edilmiştir (Zaim ve Karouad, 2010; Yüksel vd., 2011; Ghantous ve Khater, 2011; Şarlı ve Keskin, 2012).

Bu yüksek lisans tezinde ise, dipol-dipol etkileşmeli (J) bir nanoparçacığın kristal alan (D) varlığında ve dış manyetik alan (h) altında $S = 1$ modeli Kikuchi (1951) tipi çift yaklaşım yöntemiyle incelenecek mıknatıslanma ve histerezis eğrileri çıkarılarak kristal alan sabitinin ve parçacık boyutunun bu eğriler üzerindeki etkisi sunulacaktır. Ayrıca mıknatıslanma eğrilerinden yararlanılarak faz diyagramları oluşturulacak ve parçacığın geçirdiği faz dönüşüm türleri tespit edilecektir.

Bu giriş bilgilerinden sonra, ikinci bölümde manyetizma hakkında kısa bir giriş yapılarak manyetik nanoparçacıklar ve bu parçacıkların nano sistemdeki yeri konusunda bilgi verildi. Üçüncü bölümde, tezde kullanılan teorik model ve yöntem iki örnek spin sistemine uygulanmak suretiyle açıklanarak kristal alan varlığındaki nanoparçacığın $S = 1$ modeline ait mıknatıslanma denklemi türetildi. Yapılan hesaplamalar sonucu elde edilen grafiksel bulgular fiziksel yorumları ile birlikte dördüncü bölümde tartışıldı. Son olarak beşinci bölümde ise konu ile ilgili elde edilen sonuçlar özetlendi ve yorumlandı.

BÖLÜM II

KURAMSAL BİLGİ

2.1 Manyetizma

Manyetizma, yüklü bir parçacıktaki elektronun yörüngesel ve spin hareketinden kaynaklanan manyetik dipol momentlerin vektörel toplamından oluşmaktadır. Bu nedenle bütün parçacıkların atomik yapıları manyetik özellik gösterir. Elektronlar enerji düzeylerine; Pauli dışarlama ilkesine göre yerleşirler dolayısıyla bir enerji düzeyinde spinleri zıt yönlü, yalnız iki elektron bulunabilir. Aynı zamanda parçacıkların çekirdeğinden kaynaklanan manyetik dipol moment vardır fakat bu manyetik dipol moment elektronun yörüngesel ve spin hareketinden kaynaklanan manyetik dipol momentten çok küçük olduğu için hesaplamalarda dikkate alınmaz.

Bir atomda oluşan manyetik dipol momentin yönü, parçacığa uygulanan dış manyetik alana, sıcaklığa ve etkileşmelere bağlıdır. Bu etkileşmeler parçacığın manyetik özelliklerini görmemize yardımcı olur. Atomun dış manyetik alan altında manyetize olma özelliğinin ölçüsüne manyetik duygunluk denir. Bir sistemin hangi fazda olduğu manyetik duygunluk katsayısından χ faydalanılarak söylenebilir:

$\chi < 0$: Diyamanyetik

$\chi > 0$: Paramanyetik, Ferromanyetik, Antiferromanyetik, Ferrimanyetik

$\chi = 0$: Manyetik olmayan sistem

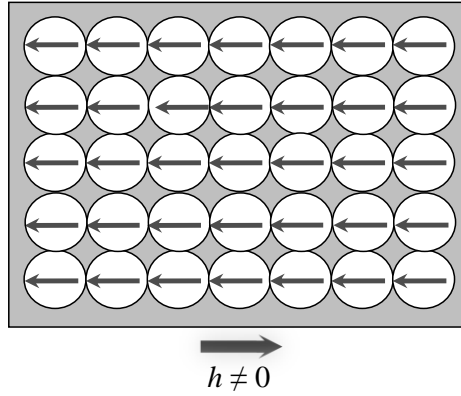
h uygulanan dış manyetik alan olmak üzere mıknatıslanma; $m = \chi h$ şeklinde tanımlanır.

Maddeler manyetik davranışlarına göre diyamanyetik, paramanyetik, ferromanyetik, anti-ferromanyetik ve ferrimanyetik olarak sınıflandırılırlar.

2.1.1 Diyamanyetik sistem

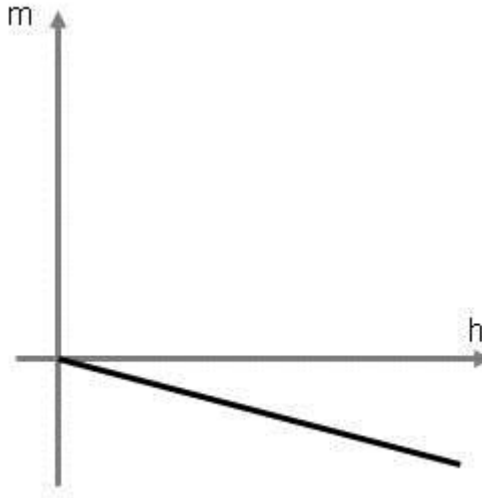
Diyamanyetik maddeler kalıcı ve net bir manyetik dipol momente sahip değildirler. Fakat bu maddelere bir dış manyetik alan uygulandığında atomun yörüngesindeki elektronlar daha hızlı dönmeye başlar ve dolayısıyla elektronun manyetik dipol momentleri artar. Bu değişim ise uygulanan dış manyetik alana zıt yönde manyetik alan

oluřturur. Bu uygulanan dıř manyetik alan maddeyi biraz iter. Bu tr manyetik malzemeye diamanyetik malzeme adı verilir. Diamanyetik malzemeler negatif alınganlıęa sahiptirler ($\chi < 0$). Diamanyetik malzemelere rnek olarak; bizmut, bakır, kursun, civa, gmř gibi maddeleri verebiliriz. Diamanyetik bir malzemenin dıř manyetik alan varlıęında ters yneliminin olduęunu Őekil 2.1’de grebiliriz.



Őekil 2.1. Diamanyetik bir malzemede manyetik momentlerin temsili dizilimleri

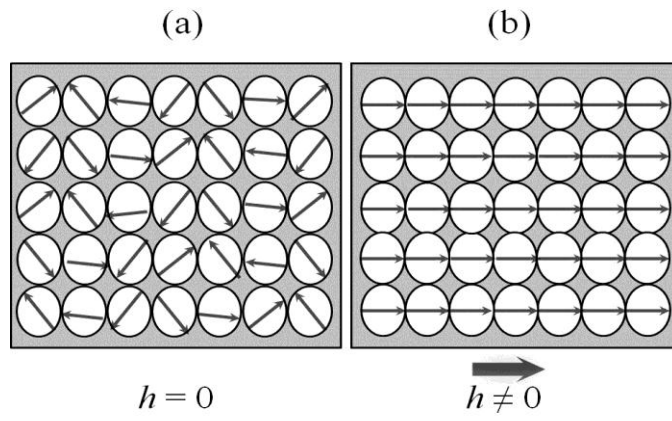
Diamanyetik malzemeler negatif alınganlıęa sahiptir ve temsili $m-h$ grafięi Őekil 2.2’deki gibidir.



Őekil 2.2. Diamanyetik bir malzemenin $m-h$ grafięi

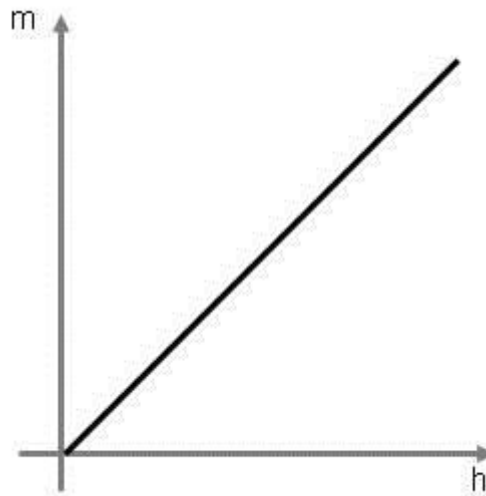
2.1.2 Paramanyetik sistem

Bazı atomlarda eşlenmemiş elektronlar vardır dolayısıyla bu tür atomlar sıfırdan farklı net bir manyetik dipol momente sahiptirler. Bu atomları bir dış manyetik alan içine koyduğumuzda atomun sahip olduğu manyetik dipol momentler 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 2.3'te verilmiştir.

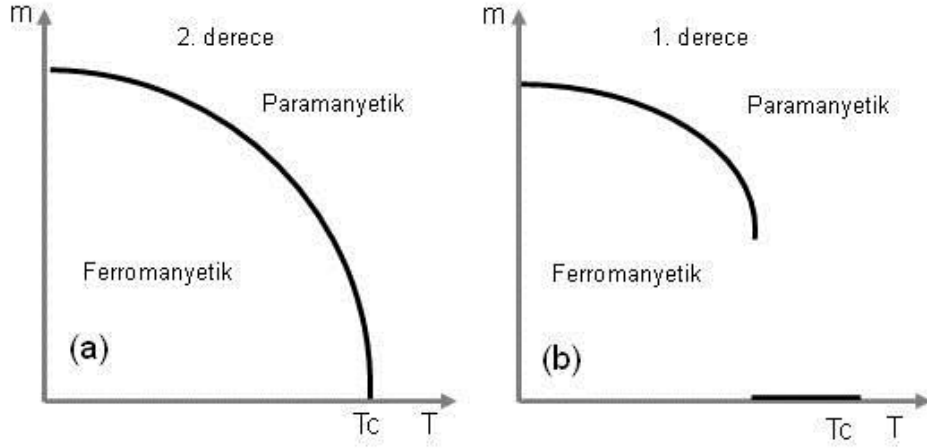


Şekil 2.3. Paramanyetik bir malzemede manyetik momentlerin (a) dış manyetik alan yokken (b) dış manyetik alan varken temsili dizilimi

Paramanyetik malzemeler pozitif duygunluğa ($\chi > 0$) sahiptir ve temsili $m-h$ grafiği şekil 2.4'te gösterilmiştir.



Şekil 2.4. Paramanyetik bir malzemenin temsili $m-h$ grafiği

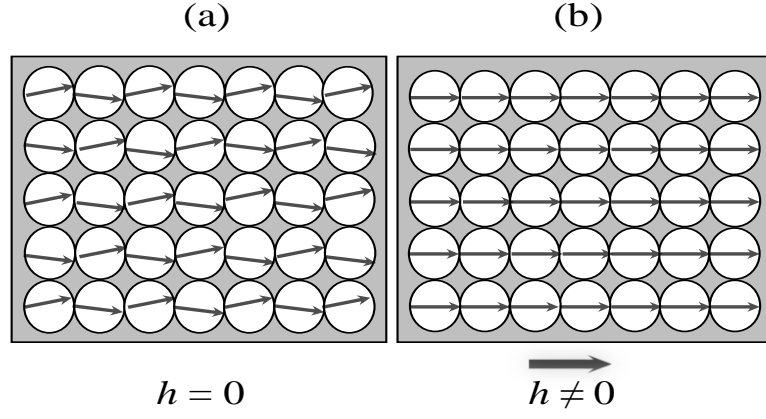


Şekil 2.5. (a) İkinci derece faz dönüşümü (b) birinci derece faz dönüşümü $m - T$ grafiği

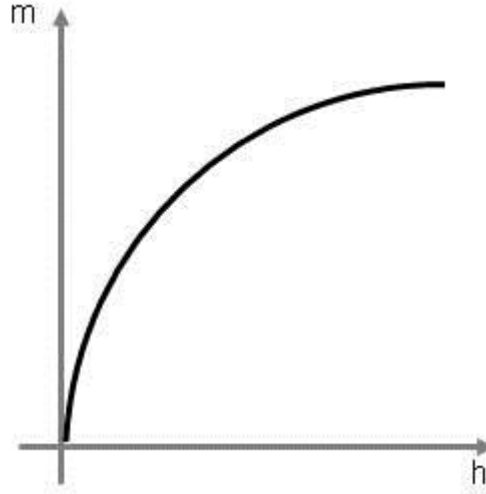
Pierre Curie; paramanyetik malzemelerin mıknatıslanmasının uygulanan dış manyetik alanla doğru, sıcaklıkla ters orantılı olduğunu $m = C \frac{h}{T}$ bağıntısıyla göstermiştir. Dış manyetik alan kaldırıldığında mıknatıslanma sıfırdır. Mıknatıslanmanın sıfır olması ise manyetik dipol momentlerin rastgele yönelmelerinden kaynaklanmaktadır. Şekilde görüldüğü gibi bir malzeme Curie sıcaklığı altında ferromanyetik üstünde ise paramanyetik davranış sergilemektedir. Sistemde her sıcaklık değerine karşılık bir mıknatıslanma oluyorsa (şekil 2.5 (a)) sistem ikinci derece faz dönüşümü, her sıcaklık değerine bir mıknatıslanma karşılık gelmiyorsa (şekil 2.5 (b)) sistem birinci derece faz dönüşümü gerçekleştirir.

2.1.3 Ferromanyetik sistem

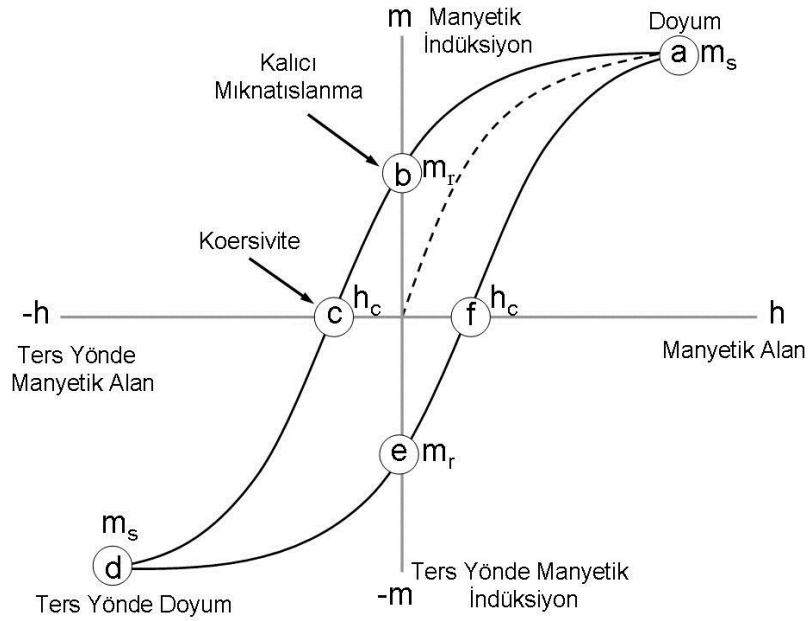
Bazı maddeler dış manyetik alan olmadan da mıknatıslanmaya sahiptirler bu maddeler ferromanyetik madde olarak adlandırılır. Ferromanyetik maddelerdeki kendiliğinden mıknatıslanma; iç manyetik alanlardan kaynaklanır. Heisenberg böyle bir iç alanın komşu atomların çiftlenmemiş elektronlarının spinleri arasındaki kuantum mekaniksel kökenli değiş-tokuş etkileşmelerinden kaynaklandığını göstermiştir. Değiş-tokuş etkileşimleri atomlar arası mesafeye bağlıdır. Ferromanyetik maddeler çok küçük dış manyetik alan altında bile dış manyetik alan doğrultusunda yönelirler ve dış manyetik alan kaldırıldığında mıknatıslanma yok olmaz yani kalıcı bir mıknatıslanma oluşur. Şekil 2.6'da ferromanyetik bir maddenin temsili spin yönelimi gösterilmiştir. Şekil 2.7'de ise ferromanyetik bir maddenin temsili $m - h$ grafiği verilmiştir.



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



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



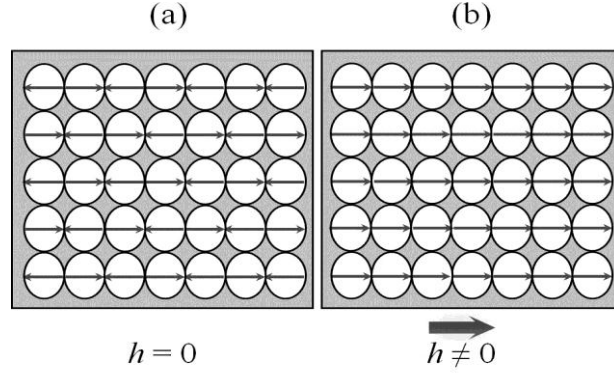
Şekil 2.8. Ferromanyetik bir malzemenin histerezis eğrisi

Histerezis eğrisi manyetik özellik gösteren bir malzemenin ferromanyetik veya paramanyetik davranış sergilediğini görmemizi sağlar. 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 azaltırsak 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 mıknatıslanmasıyla ilişkilidir. Daha sonra oluşan mıknatıslanmayı yok edebilmek için ters yönde dış manyetik alan uygulanır 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 2.8'deki eğri oluşur bu eğriye histerezis eğrisi denir.

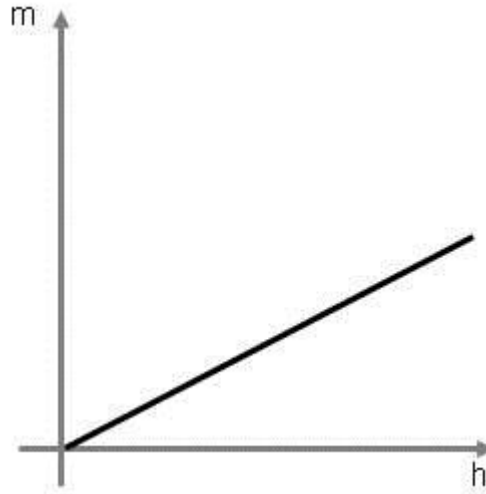
2.1.4 Antiferromanyetik sistem

Bazı durumlarda atomlar arası değiş-tokuş etkileşimi komşu atomların momentlerinin zıt yönlü yönelmesine neden olur. Bu davranış “antiferromanyetizma” olarak adlandırılır. Bu zıt yönelmiş momentler birbirlerinin etkisini neredeyse sıfırladığından

malzeme diyamanyetik malzemeye benzer bir davranış sergiler ve mıknatıslanması daha küçüktür. Böyle bir maddenin temsili spin dizilimleri şekil 2.9'da temsili $m-h$ grafiği şekil 2.10'da gösterilmiştir..



Şekil 2.9. Antiferromanyetik bir malzemedeki manyetik dipol momentlerinin (a) dış manyetik alan yokken (b) dış manyetik alan varken temsili dizilimi

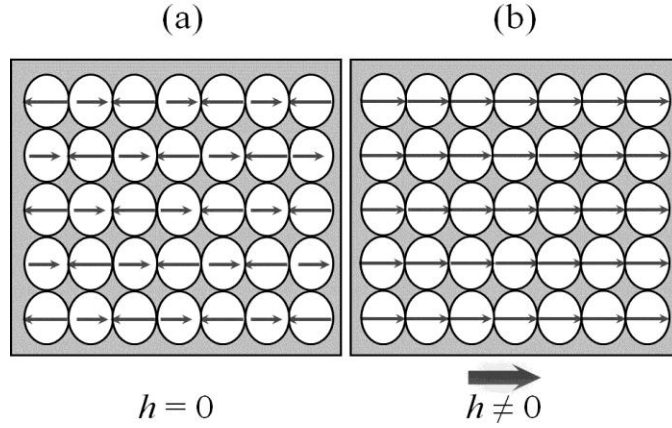


Şekil 2.10. Antiferromanyetik bir malzemenin temsili $m-h$ grafiği

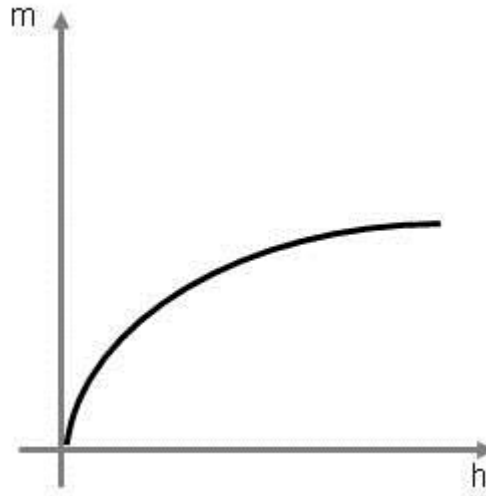
2.1.5 Ferrimanyetik sistem

Ferrimanyetik madde iki veya daha fazla farklı türden manyetik dipol momentlerinin zıt yönde oluşması sonucu meydana gelir. Bu manyetik momentlerin zıt yönlü olması sebebiyle toplam mıknatıslanmayı azaltıcı bir etkiye sahiptir. Ferrimanyetik malzemedeki ferromanyetik malzeme gibi kalıcı mıknatıslanma vardır. Fakat ferromanyetik maddeye

kıyaslandığında mıknatıslama daha küçüktür. Şekil 2.11’de ferrimanyetik bir maddenin temsili spin yönelimi şekil 2.12’de temsili $m-h$ grafiği gösterilmiştir.



Şekil 2.11. Ferrimanyetik bir malzemede manyetik momentlerin (a) dış manyetik alan yokken (b) dış manyetik alan varken temsili dizilimi



Şekil 2.12. Ferrimanyetik bir malzemenin temsili $m-h$ grafiği

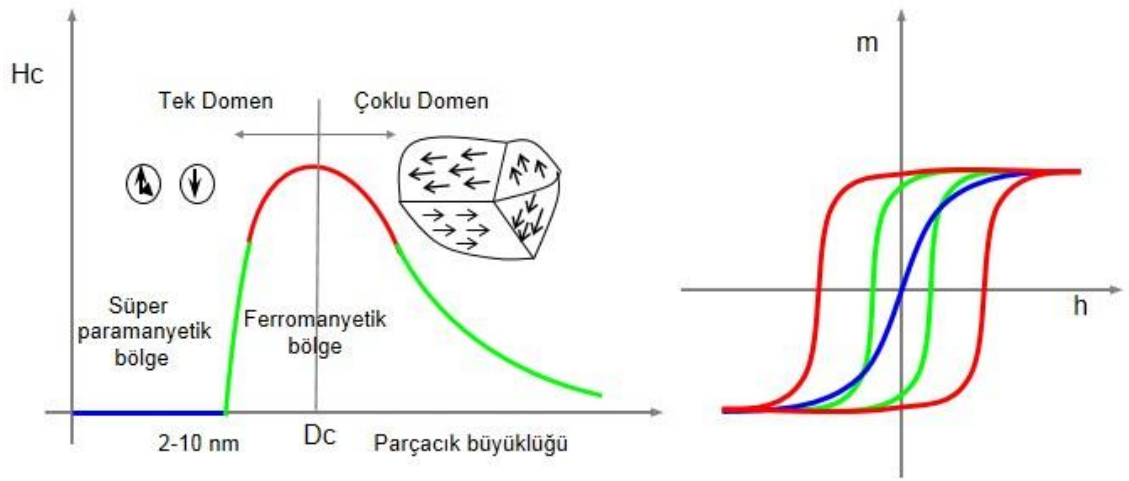
2.2 Nanoparçacıklar

Nano Yunancada 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 yüzeye sahiptir. Buda parçacığın etkileşme yüzeyi ve yüzey gerilimi 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.

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 alana daha fazla bilgi depolamak için kayıt etme tabakalarında kullanılmaktadır. Ayrıca savunma sanayisinde, biomedikal ürünlerde, tüketici eşyaları ve kişisel bakım ürünlerinde, mühendislik materyalleri, elektronik ve bilgisayar teknolojilerinde etkin olarak kullanılır.

BÖLÜM III

MATERYAL VE YÖNTEM

3.1 Ising Modeli

Manyetizma problemi için geliştirilen Ising modeli, modern istatistik fiziğin üzerinde en çok çalışılan modellerinden birisidir. Geçen yüzyılda faz geçişlerinin teorisinde gösterdiği büyük başarıya rağmen model günümüzde birçok farklı fiziksel olayı tanımlayabilen matematiksel yapı olarak görülmektedir. Bu bölümde, nanoparçacık manyetizmasına uygulamadan önce bu önemli ve güncel model hakkında kısa bilgi verilecektir.

Ising modeli, en yakın komşu sayısının aynı olduğu düzenli bir örgü üzerinde düşünülür. Herhangi bir örgüde bulunan örgü noktalarına en yakın komşuların sayısı, koordinasyon sayısı olarak da ifade edilir ve γ ile gösterilir. Üzerinde çalışılan sistem örgü noktalarına yerleştirilmiş manyetik atomlardan (veya spinlerden) oluşmaktadır. Sistemde N tane örgü noktası veya spin varsa, termodinamik limitte en yakın komşu atom sayısı $N\gamma/2$ olacaktır. En basit Ising modeli için standart Hamiltoniyen aşağıdaki gibi yazılır:

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

Burada $S_i = \pm 1$ değerlerini alır ve $\langle ij \rangle$ toplamı en yakın komşu çiftleri üzerinden yapılır. (3.1) 'de J komşu örgü noktaları arasındaki değiş-tokuş etkileşme sabitini ve h dış manyetik alanı temsil eder. J 'nin alacağı değer in işaretine göre sistem iki farklı manyetik özellik sergiler. Bunlar $J < 0$ (FM çiftlenim) ve $J > 0$ (AFM çiftlenim). $S_i = \pm 1$ spinlerinin kesirsel değerleri nokta (durum) değişkenleri olarak isimlendirilir ve p_i ile gösterilir. p_i 'ler $\sum_{i=+,-} p_i = 1$ normalizasyon şartına uyarlar. Modelimizdeki uzun-menzil düzen parametresi mıknatıslanma (m) olarak adlandırılır ve durum

değişkenleri cinsinden $m = p_+ - p_-$ ile tanımlanır. Bu tanım ve yukarıdaki normalizasyon şartından nokta değişkenleri miknatislanma cinsinden ifade edilebilir:

$$p_+ = \frac{1}{2}(1+m), \quad p_- = \frac{1}{2}(1-m) \quad (3.2)$$

Diğer taraftan, spin değişkenleri için $S_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm S$ değerleri seçildiğinde (3.1) numaralı denkleme $K \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 S_j^2$ gibi yüksek mertebeden yeni etkileşme terimleri ve $D \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^2 + S_j^2)$ kimyasal potansiyel terimi (veya kristal alan) ilave etmek mümkündür. Model, Hamiltonyen'e sadece kristal alan terimi ilave edilirse Blume Capel (BC) modeli (Capel, 1966; Yalçın, 1997; Ekiz vd., 2000), yine sadece $K \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 S_j^2$ eklenirse izotropik BEG modeli (Keskin ve Erdem, 1997; Erdem, 2001; Erdem, 2009) ve her iki terim kullanılırsa anizotropik BEG modeli olarak literatürde yer almıştır (Blume, 1971; Keskin vd., 1999).

3.2 Çift Yaklaşım Yöntemi

Bu kesimde, literatürde $S = 1/2$ ve $S = 1$ modellerine başarılı bir şekilde uygulanabilen ve istatistik mekaniğin en önemli yaklaşımlarından biri olan çift yaklaşım yöntemi kısaca anlatılacaktır. Bu yaklaşımda iç değişkenlere (p_i) ek olarak bağ değişkenleri (P_{ij}) tanımlanır. P_{ij} değişkenleri bir spin çiftindeki iki spinin (i, j) yöneliminin kesirsel değerini verir. Burada i ve j indisleri spin durumlarını gösterir. İç değişkenler bağ değişkenlerine $p_i = \sum_{j=1}^n P_{ij}$ ile bağlıdır. Burada n kullanılan spin modelindeki spin durumlarının sayısını temsil eder. Bağ değişkenleri arasında $P_{ij} = P_{ji}$ simetrisi vardır. $\beta = 1/kT$ (k Boltzmann sabiti, T mutlak sıcaklık) ve γ örgüye ait koordinasyon sayısı olmak üzere, sistemin iç enerjisi ve entropisi nokta değişkenler (p_i) ve bağ değişkenleri (P_{ij}) cinsinden sırasıyla

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

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

bağıntıları kullanılarak elde edilir. (3.3) denklemindeki ε_{ij} parametreleri bir (i, j) spin çiftine ait bağ enerjisi olarak adlandırılır ve kullanılan model, Hamiltoniyen kullanılarak detaylıca tespit edilir. Sistemin molekül başına serbest enerjisi

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

ifadesi kullanılarak hesaplanır ve P_{ij} değişkenlerine göre minimize edilir ($\partial\Phi/\partial P_{ij} = 0$).

Böylece, bağ değişkenleri için

$$P_{ij} = \frac{1}{Z} (p_i p_j)^{\bar{\gamma}} e^{-\beta \varepsilon_{ij}} \equiv \frac{e_{ij}}{Z} \quad (3.6)$$

şeklinde lineer olmayan bir cebirsel denklem sistemi türetilir. Burada $\bar{\gamma} = (\gamma - 1)/\gamma$ ve Z bölüşüm fonksiyonudur.

$$Z = \exp(2\beta\lambda/\gamma) = \sum_{i,j=1}^n e_{ij} \quad (3.7)$$

(3.7) numaralı denklemde λ , normalizasyon şartında kullanılan ek bir terimdir. Bu terime Lagrange çarpanı denir. Yukarıdaki formülasyonun $S=1/2$ ve $S=1$ Ising sistemine uygulanmasının yapıldığı çok sayıda araştırma bulunmaktadır (Keskin ve Arslan, 1995; Meijer vd., 1986; Keskin ve Meijer, 1986; Keskin ve Erdinç, 1995; Erdinç ve Keskin, 2002). Bu uygulamalar Çizelge 3.1 'de özetlenmiştir.

3.3 Dipol-Dipol Etkileşmeli Nanoparçacık Modellerinin Kısaca İncelenmesi

Manyetik nanoparçacıklarda kristal alan etkisinin (D) daha iyi araştırılabilmesi için dipol-dipol etkileşmeli (J) nanoparçacığın manyetik özelliklerinin iyi bilinmesi

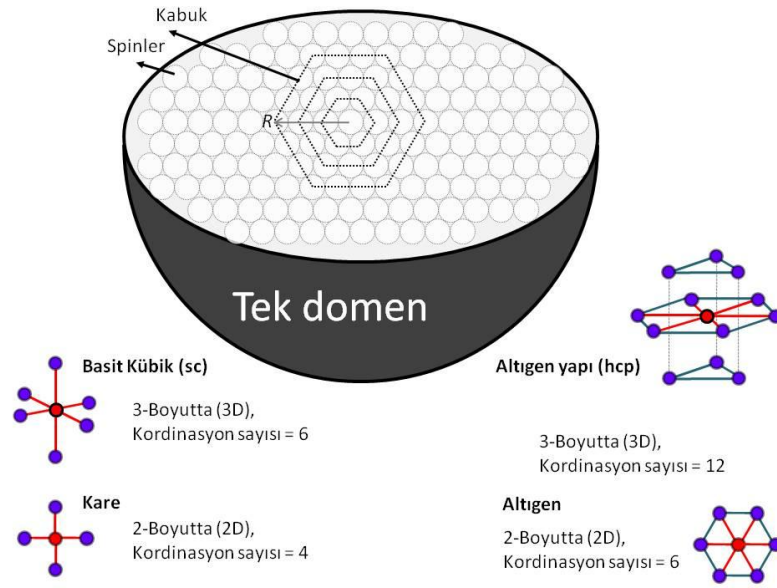
gerekir. Bunun için önce J etkileşme sabitli bir nanoparçacığın manyetik özellikleri bağ yaklaşım yöntemine dayalı $S = 1/2$ ve $S = 1$ model sonuçları kısaca özetlenecektir (Yalçın vd., 2008; Yalçın vd., 2012).

Manyetik nanoparçacıklar büyük malzemelerdeki çoklu domenlerle karşılaştırıldığında kritik bir büyüklüğün altında tek bir domen halindedirler. Tek bir nanoparçacığın atomları pratikte üç boyutta (3D) sıkı paketli altıgen (hcp) ve basit kübik (sc) kristal örgüler üzerinde yerleşmiş olduğu düşünülür. Bu atomlar, örgü yapısı gereği iç içe geçmiş eş merkezli kabukları oluşturur. Parçacık içindeki kabuk sayısı atom sayısı ile orantılı olup nanoparçacığın yarıçapını temsil eder. Böyle bir parçacığın kesiti Şekil 3.1’de detaylıca gösterilmiştir. Teoride ise bu örgülere karşılık gelen çalışmalar iki boyutta (2D) altıgen ve kare örgüler üzerinde yapılır ve sonuçlar üç boyutta yorumlanır (Rego ve Figueirido, 2001). Altıgen örgü yapısındaki bir nanoparçacık Şekil 3.2’de, kare örgü yapısındaki diğer bir NP ise Şekil 3.3’te şematik olarak gösterilmiştir. İki boyutta her iki şekilden de anlaşılacağı üzere kabuk sayısı arttıkça parçacığın büyüklüğü de artmaktadır.

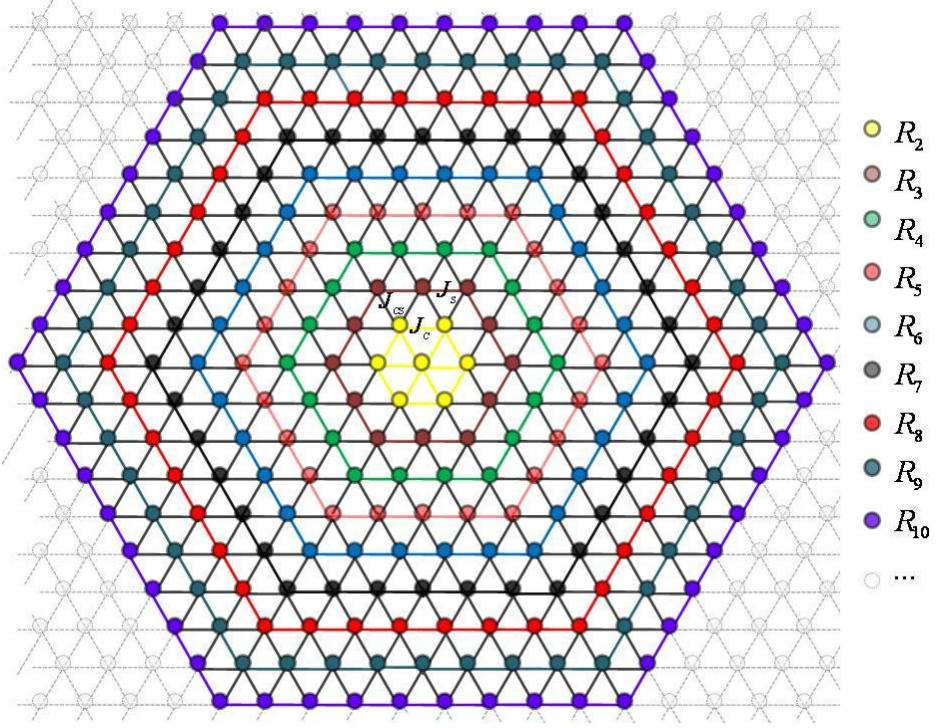
Çizelge 3.1. Çift yaklaşım altında $S = 1/2$ ve $S = 1$ Ising modellerinin karşılaştırılması

	$S = 1/2$	$S = 1$
Spin değerleri (S_i)	+1 -1	+1 0 -1
Spin durum değişkenleri (p_i)	p_+ p_-	p_+ p_0 p_-
Bağ değişkenleri (P_{ij})	P_{++} P_{+-} P_{-+} P_{--}	P_{++} P_{+0} P_{+-} P_{0+} P_{00} P_{0-} P_{-+} P_{-0} P_{--}
Normalizasyon	$\sum_{i=+,-} p_i = 1, \sum_{i,j=+,-} P_{ij} = 1$	$\sum_{i=+,0,-} p_i = 1, \sum_{i,j=+,0,-} P_{ij} = 1$
Durum ve bağ değişkenleri arasındaki ilişki	$p_+ = P_{++} + P_{+-}$ $p_- = P_{-+} + P_{--}$	$p_+ = P_{++} + P_{+0} + P_{+-}$ $p_0 = P_{0+} + P_{00} + P_{0-}$ $p_- = P_{-+} + P_{-0} + P_{--}$
Ortalama mıknatıslanma ($m \equiv \langle S_i \rangle$)	$m = p_+ - p_-$	$m = p_+ - p_-$
	$m = P_{++} + P_{+-}$ $-(P_{-+} + P_{--})$	$m = P_{++} + P_{+0} + P_{+-}$ $-(P_{-+} + P_{-0} + P_{--})$

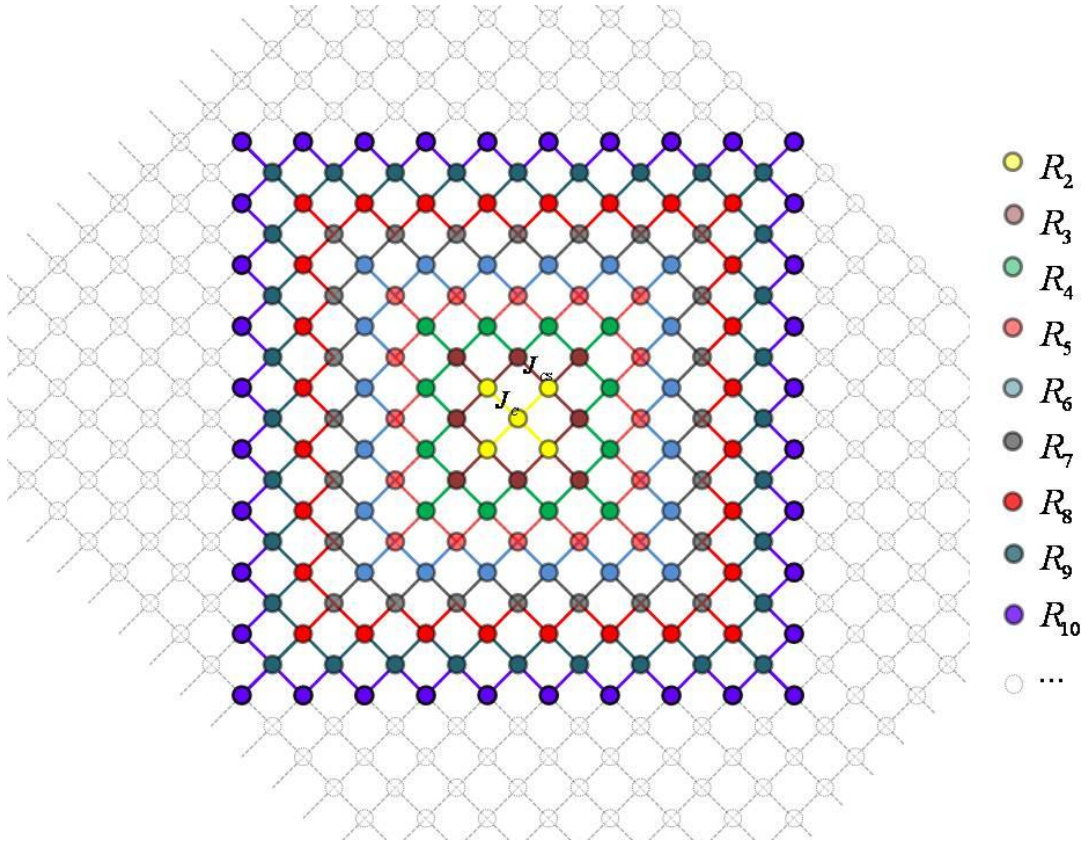
Bir nanoparçacığın çekirdek (C) ve yüzey (S) olmak üzere iki bölgeden ve bu ikisi arasındaki bir ara yüzeyden (CS) oluştuğu düşünülmektedir (Rego ve Figueirido, 2001). Bu tip nanoparçacıklara çekirdek-yüzey tipi nanoparçacıklar da denir. Spin sayıları çekirdek için N_C , yüzey için N_S ile temsil edilir. Böylece, nanoparçacığı oluşturan toplam spin sayısı $N = N_C + N_S$ olacaktır. Bir de ara yüzey için spin sayısı (N_{CS}) tanımlanır (Çizelge 3.2).



Şekil 3.1. Üç boyutta hegzagonal örgü üzerine dizilmiş spinlerden oluşan küresel tek domenli bir manyetik nanoparçacığın kesiti. Noktalı çizgiler iki boyutta sonlu spin dizilerinden kabukları göstermektedir. Nanoparçacığın yarıçapı (R) kabuk sayısına bağlı olarak artar



Şekil 3.2. İki boyutta dokuz kabuktan oluşan altıgen örgünün şematik gösterimi



Şekil 3.3. İki boyutta dokuz kabuktan oluşan kare örgünün şematik gösterimi

C ve S spinleri ferromanyetik olarak ($J < 0$) veya antiferromanyetik olarak ($J > 0$) etkileşebilirler. Bir nanoparçacık için dipol-dipol etkileşmeli (J) $S = 1/2$ ve $S = 1$ Ising model Hamiltonienleri

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

ile verilir. Burada

$$H_C = -J_C \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - h \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i + S_j),$$

$$H_{CS} = -J_{CS} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \sigma_j \quad (3.9)$$

$$H_S = -J_S \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i + \sigma_j)$$

Çizelge 3.2. Nanoparçacığın yarıçapına göre çekirdek, yüzey ve ara yüzeydeki toplam spin sayıları ve spin çifti sayıları (Yalçın vd., 2012)

Örgü Çeşidi	R	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Altıgen	N_C	7	19	37	61	91	127	169	217	271
	N_S	12	18	24	30	36	42	48	54	60
	N_{CS}	9	15	21	27	33	39	45	51	57
	N_P^C	12	42	90	156	240	342	462	600	756
	N_P^S	12	18	24	30	36	42	48	54	60
	N_P^{CS}	18	30	42	54	66	78	90	102	114
Kare	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

(3.9)'da J_C , J_S ve J_{CS} sabitleri sırasıyla çekirdek, yüzey ve ara yüzey için değiş-tokuş etkileşme sabitlerini gösterir. Şayet $J_C = J_{CS} = J_S$ ise parçacık homojen bir

nanoparçacık olarak bilinir. $J_C \neq J_{CS} \neq J_S$ ise parçacık kompozit bir nanoparçacık olarak adlandırılır. Denklem 3.9'da S_i çekirdek spin değerlerini, σ_i ise yüzey spin değerlerini temsil ederler. Bu değişkenler $S = 1/2$ için ± 1 , $S = 1$ için $0, \pm 1$ değerlerini alır. İki boyutta bir Ising nanoparçacığının $S = 1/2$ ve $S = 1$ modellerinin etkileşme enerjisi P_{ij} terimi de katılarak aşağıdaki gibi yazıldı.

$$\beta E = \sum_{\langle i,j \rangle} (N_P^C \varepsilon_{ij}^C + N_P^{CS} \varepsilon_{ij}^{CS} + N_P^S \varepsilon_{ij}^S) P_{ij} \quad (3.10)$$

Burada çekirdek, yüzey ve ara yüzeyde bulunan spin çiftlerinin sayısını, sırasıyla $N_P^C = (N_C \gamma_C / 2) - N_{CS}$, $N_P^S = N_S \gamma_S / 2$ ve $N_P^{CS} = 2N_{CS} \gamma_{CS} / 2$ ile tanımlamaktayız. Benzer şekilde γ_C , γ_S ve γ_{CS} ilgili bölgelerdeki koordinasyon sayısını temsil eder. İki boyutta altıgen örgü için $\gamma_C = 6$, $\gamma_S = 2$ ve $\gamma_{CS} = 2$, kare örgü için $\gamma_C = 4$, $\gamma_S = 0$ ve $\gamma_{CS} = 2$ olarak seçilir (Şekil 3.2 ve 3.3). ε_{ij}^C , ε_{ij}^S ve ε_{ij}^{CS} ile gösterilen çekirdek, yüzey ve ara bölge bağ enerjileri de (3.9) yardımıyla Çizelge 3.3'deki gibi tespit edilir.

Çizelge 3.3. $S = 1/2$ ve $S = 1$ için bağ enerjileri

Spin Modeli	Çiftler	ε_{ij}^C	ε_{ij}^{CS}	ε_{ij}^S
$S = 1/2$ ($n = 2$)	ε_{11}	$-J_C - 2h$	$-J_{CS}$	$-J_S - 2h$
	ε_{12}	$+J_C$	$+J_{CS}$	$+J_S$
	ε_{21}	$+J_C$	$+J_{CS}$	$+J_S$
	ε_{22}	$-J_C + 2h$	$-J_{CS}$	$-J_S + 2h$
$S = 1$ ($n = 3$)	ε_{11}	$-J_C - 2h$	$-J_{CS}$	$-J_S - 2h$
	ε_{12}	$-h$	0	$-h$
	ε_{13}	$+J_C$	$+J_{CS}$	$+J_S$
	ε_{21}	$-h$	0	$-h$
	ε_{22}	0	0	0
	ε_{23}	$+h$	0	$+h$
	ε_{31}	$+J_C$	$+J_{CS}$	$+J_S$
	ε_{32}	$+h$	0	$+h$
ε_{33}	$-J_C + 2h$	$-J_{CS}$	$-J_S + 2h$	

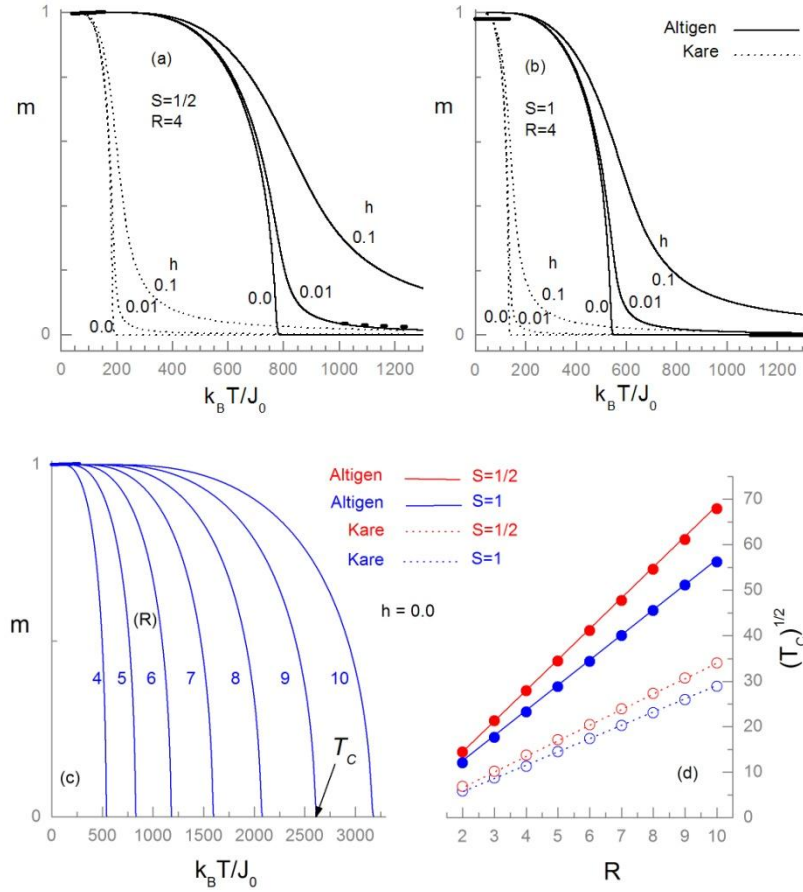
(3.6) numaralı denklem kullanılarak bir çekirdek-yüzey tipi nanoparçacığın $S = 1/2$ modeli için dört adet ($i, j = 1, 2$), $S = 1$ modeli için de benzer şekilde dokuz adet ($i, j = 1 - 3$) lineer olmayan denklem aşağıdaki gibi yazılır:

$$P_{ij} = \frac{1}{Z} (p_i p_j)^{\bar{y}} \exp \left[-\beta (N_P^C \varepsilon_{ij}^C + N_P^{CS} \varepsilon_{ij}^{CS} + N_P^S \varepsilon_{ij}^S) \right] \equiv \frac{e_{ij}}{Z} \quad (3.11)$$

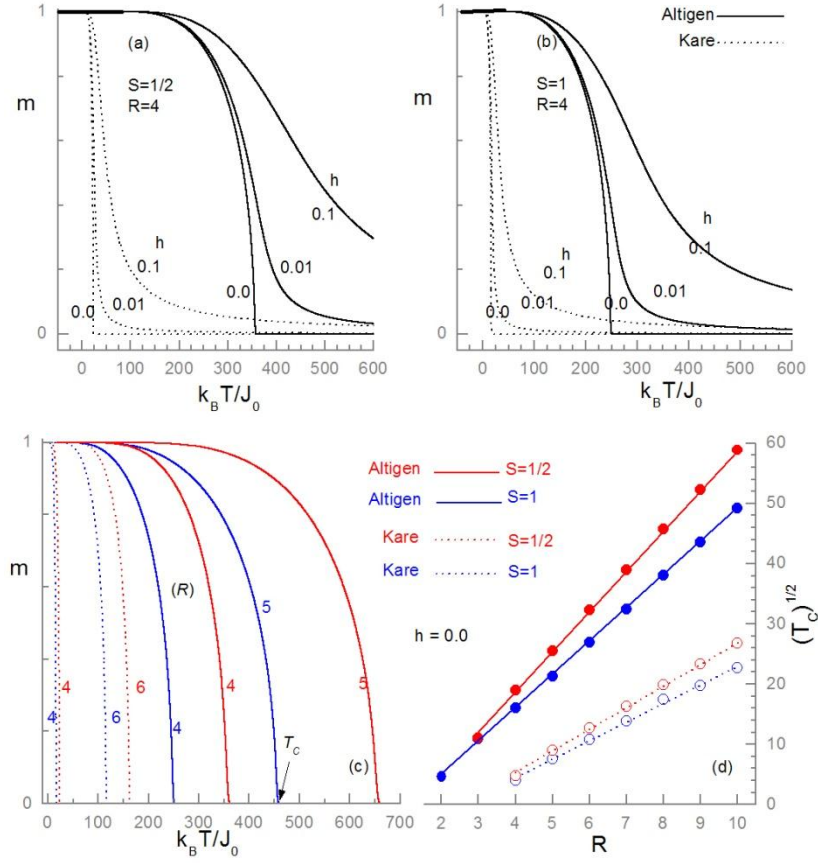
(3.11) numaralı denklem takımı nümerik olarak çözülerek $S = 1/2$ ve $S = 1$ için normalize mıknatıslanma değerleri hesaplanır (Yalçın vd., 2012). Hesaplama sonuçları Şekil 3.4 – 3.9 'da detaylıca verildi.

Şekil 3.4 ve 3.5'te normalize mıknatıslanmanın (m) indirgenmiş sıcaklığa (kT/J_0) göre değişimi ve ferromanyetik (FM) fazdan paramanyetik (PM) faza geçiş sıcaklığının (T_C) parçacık büyüklüğüne (R) bağlılığı görülmektedir. Şekil 3.4 'deki eğriler, FM çekirdek ($J_0 = 1, J_C = 1$), FM yüzey ($J_S = J_0$) ve FM çekirdek-yüzey ($J_{CS} = J_0$) etkileşmeli homojen $S = 1/2$ ve $S = 1$ nanoparçacıklarına ait mıknatıslanma eğrileridir. Şekil 3.5'deki eğriler ise, her iki modelin FM çekirdek ($J_C = J_0$), FM yüzey ($J_S = J_0$) ve AFM çekirdek-yüzey ($J_{CS} = -J_0$) etkileşmeli kompozit nanoparçacıklara ait sonuçlardır. Bu grafiklerin elde edilmesinde farklı manyetik alan değerleri söz konusudur ($h = 0 - 0.1$). Sürekli eğriler altıgen örgüye noktalı olanlar ise kare örgüye karşılık gelir. Şekillerden görüldüğü gibi, dış manyetik alanın olmadığı durumlarda ($h = 0$) normalize mıknatıslanma doymuş değerinden ($m = 1$) başlayarak sıcaklık artışıyla azalmakta ve T_C geçiş sıcaklığında kaybolmaktadır ($m = 0$) (Şekil 3.4 (a)-(c), Şekil 3.5 (a)-(c)). İki boyutta altıgen ve kare örgü yapılarındaki nanoparçacıklar için mıknatıslanmanın indirgenmiş sıcaklığa göre sergilediği bu davranış normal manyetik (bulk) malzemelerin manyetizasyon eğrilerine benzer. Ancak, parçacık yarıçap değerinin azaltılması faz dönüşüm sıcaklığının azalmasına yol açar (Şekil 3.4 (c) ve Şekil 3.5 (c)). Bu sonuç, $\sqrt{T_C}$ 'nin R 'ye göre değişim grafiğinde bir çizgisel artış olarak kendini gösterir (Şekil 3.4 (d) ve Şekil 3.5 (d)). Parçacık yarıçapının daha çok artması durumunda ise bulk malzemelerin Curie sıcaklığına yaklaşılır. Bu sonuç bir Heisenberg nanoparçacığın ortalama alan yaklaşımına dayalı manyetik yapısı ile uyumludur (Usov ve

Gudoshnikov, 2005). Diğer taraftan, kompozit $S = 1/2$ ve $S = 1$ Ising nanoparçacıklarının T_C geçiş sıcaklığı homojen parçacığın geçiş sıcaklığından daha düşüktür (Şekil 3.4(d) ve Şekil 3.5 (d)).



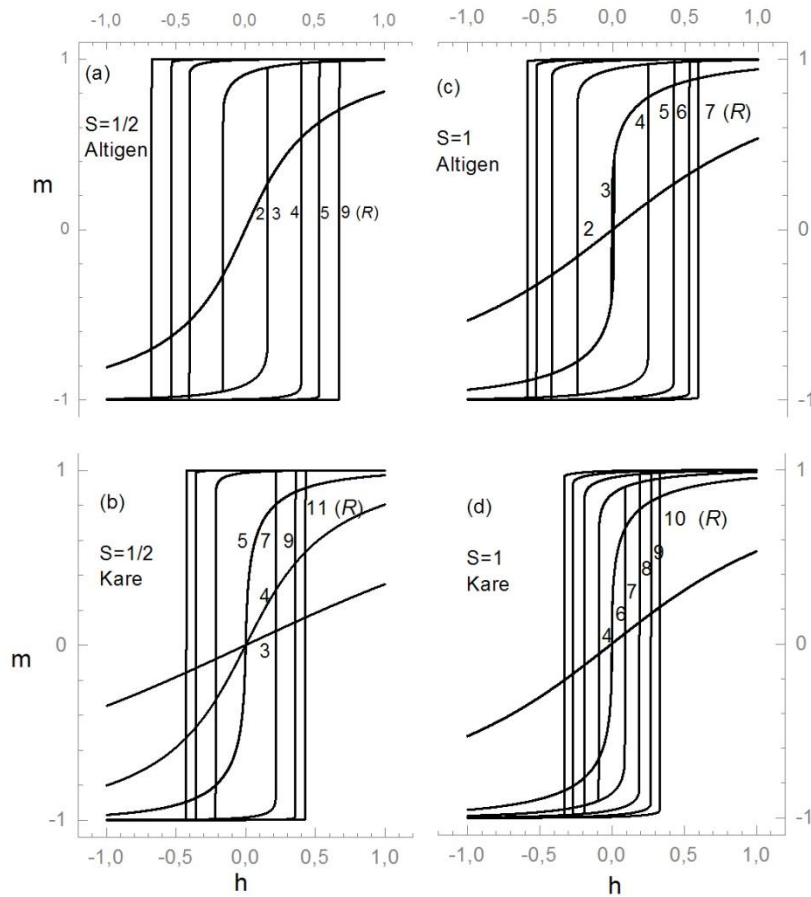
Şekil 3.4. (a) $S = 1/2$ Ising nanoparçacığı için normalize mıknatıslanmanın (m) indirgenmiş sıcaklığa göre gelişimi. $h = 0.0 - 0.1$ (b) şekil 3.4(a) ile aynı ancak $S = 1$ Ising nanoparçacığı için elde edildi (c) mıknatıslanma eğrilerinin parçacık yarıçapına bağlılığı $h = 0.0$ (d) şekil 3.4 (c) ile aynı ancak T_C sıcaklığının parçacık yarıçapına bağlılığı gösterildi $J_0 = J_C = J_{CS} = J_S = 1$



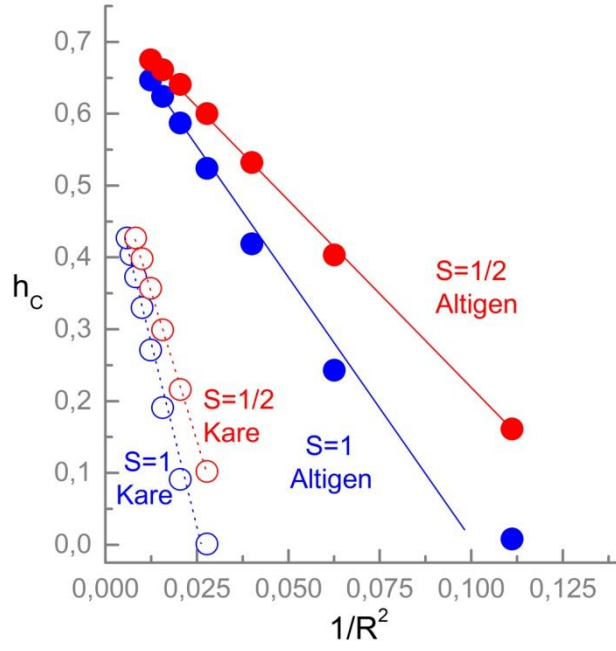
Şekil 3.5. Şekil 3.4 ile aynı ancak $J_0 = J_C = J_S = 1$, $J_{CS} = -J_0 = -1$

Şekil 3.6–3.9’da homojen ($J_0 = J_C = J_{CS} = J_S = 1$) ve kompozit ($J_0 = J_C = J_S = 1$, $J_{CS} = -J_0 = -1$) nanoparçacıkların manyetik alana göre gelişimleri (histerezis eğrileri) ve bu eğriler için koersif alanın (h_c) $1/R^2$ ’ye göre değişimi verilmiştir. Küçük yarıçaplara ait histerezis eğrilerinde döngü söz konusu olmadığından parçacık süperparamanyetik (SP) özellik gösterir. SP yapısının ortaya çıktığı yarıçap aralıkları kullanılan spin modeline ($S = 1/2, S = 1$) ve örgü çeşidine (altıgen, kare) göre değişir. Bununla birlikte, SP özelliğinin gözlenmediği histerezis döngülerinin şekli ve genişliği tamamen parçacık büyüklüğüne bağlıdır. Başka bir ifadeyle parçacık yarıçapı arttıkça histerezis döngüleri daha keskin şekilde değişerek genişlik bakımından bulk malzemelerinkine yaklaşır (Şekil 3.6, Şekil 3.8). Koersif alanının (h_c) parçacık büyüklüğüne bağlılığı homojen parçacık için Şekil 3.6 ’daki histerezis eğrilerinden şekil 3.7’deki gibi bulunur. Bu şekildeki kırmızı ve mavi daireler sırasıyla şekil 3.6 (a) ve şekil 3.6 (c)’deki eğrilerinden, kırmızı ve mavi çemberler ise sırasıyla şekil 3.6 (b) ve

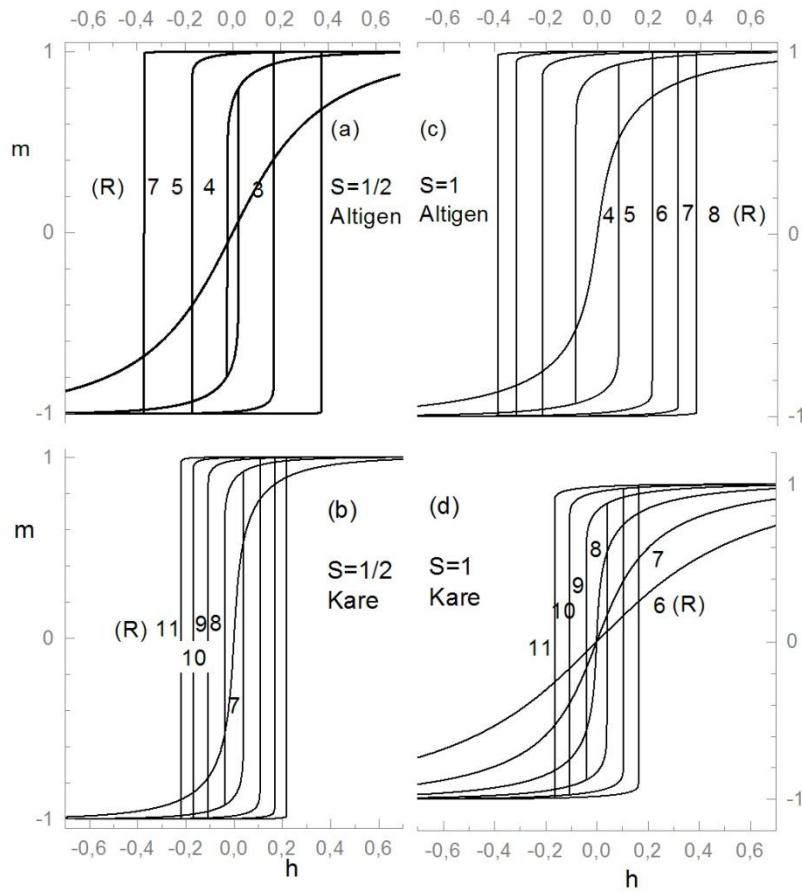
şekil 3.6 (d)'deki eğrilerden tespit edilmiştir. Bu daireleri ve çemberleri birleştiren doğru parçalarına göre koersif alan $1/R^2$ ile doğrusal olarak azalmaktadır. Son olarak, parçacıkların histerezis döngüleri ve koersif alanın sıcaklığa bağlılığı da incelenebilir. Örneğin şekil 3.9 (a) 'da altıgen örgü yapısında beş kabuklu ($R = 5$) bir $S = 1/2$ Ising tipi kompozit nanoparçacığının farklı sıcaklık değerlerine ($T = 150 - 700$) karşılık gelen histerezis döngüleri ve şekil 3.9 (b)'de ise aynı parçacığa ait koersif alanın $(kT)^{1/2}$ değişimi verilmiştir. Karşılaştırma açısından bu şekle diğer örgü yapılarındaki farklı büyüklük ve spin değerine sahip parçacıklara ait hesaplama sonuçları da ilave edilmiştir. Sıcaklık artışı ile histerezis döngüleri daraldığından $T = 700J_0/k$ sıcaklık değerinde nanoparçacık SP özelliği göstermeye başlar. $T < 700J_0/k$ sıcaklık aralığında ise FM fazı söz konusudur (Şekil 3.9 (a)).



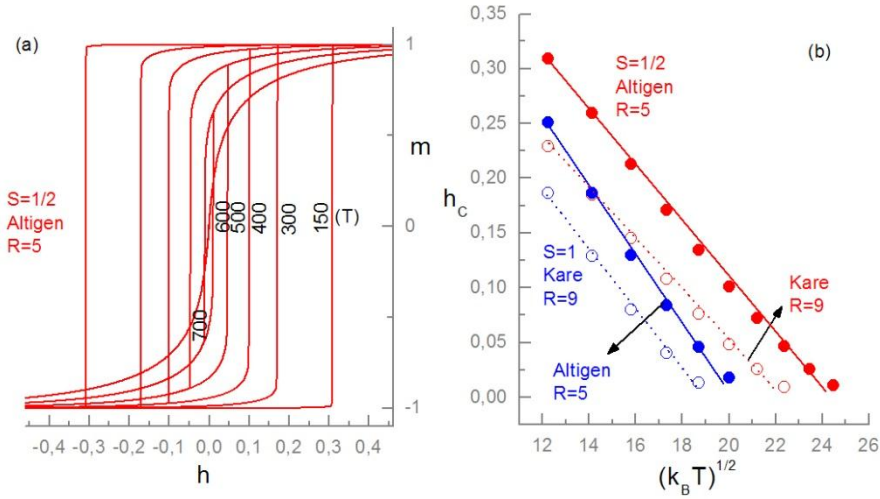
Şekil 3.6. (a) Altıgen örgü yapısında ve farklı büyüklüklerdeki $S = 1/2$ Ising nanoparçacığı için histerezis eğrileri (b) şekil 3.6 (a) ile aynı fakat kare örgü için elde edilmiştir (c) şekil 3.6 (a) ile aynı fakat $S = 1$ için elde edilmiştir (d) şekil 3.6 (b) ile aynı fakat $S = 1$ için elde edilmiştir. $J_0 = J_C = J_{CS} = J_S = 1$ ve $T = 300J_0/k$



Şekil 3.7. Koersif alanın (h_c) $1/R^2$ 'ye göre değişimi



Şekil 3.8. Şekil 3.6 ile aynı fakat $J_0 = J_C = J_S = 1$, $J_{CS} = -J_0$



Şekil 3.9. (a) Altıgen örgü yapısında beş kabuktan ($R=5$) oluşan $S=1/2$ Ising nanoparçacığı için histerezis eğrilerinin sıcaklıkla değişimi (b) koersif alanın $(k_B T)^{1/2}$ ile lineer değişimi $J_0 = J_C = J_S = 1$, $J_{CS} = -J_0$

3.4 Kristal Alan Etkisindeki Nanoparçacığın $S=1$ Modeli ile İncelenmesi

Tezde incelediğimiz nanoparçacık ve parçacığı oluşturan atomların dizilişleri bölüm 3.3'te olduğu gibi, altıgen örgü (şekil 3.2) ve kare örgü (şekil 3.3) yapılarında olacaktır. $S=1$ model Hamiltoniyeni kristal alan sabiti (D) dahil edildiğinde aşağıdaki gibidir:

$$H\{S_i\} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - h \sum_{\langle ij \rangle} (S_i + S_j) - D \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^2 + S_j^2) \quad (3.12)$$

Burada $S_i = 0, \pm 1$ değerlerini alır. Nanoparçacık çekirdek, yüzey ve ara yüzey olarak ele alınırsa $S=1$ Hamiltoniyen ifadesi (3.1) ve (3.12) ışığında

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

$$H_{CS} = -J_{CS} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \sigma_j, \quad (3.13)$$

$$H_S = -J_S \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i + \sigma_j) - D_S \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i^2 + \sigma_j^2).$$

olarak yeniden düzenlenir. (3.13) yardımıyla spin çifti bağ enerjileri (ε_{ij}) Çizelge (3.4)'te verildi.

Çizelge 3.4. Kristal alan etkileşmeli nanoparçacığın $S = 1$ bağ enerjileri

$S = 1$	Çekirdek (C)	Ara yüzey (CS)	Yüzey (S)
ε_{11}	$-J_C - 2D_C - 2h$	$-J_{CS}$	$-J_S - 2D_S - 2h$
ε_{12}	$-D_C - h$	0	$-D_S - h$
ε_{13}	$+J_C - 2D_C$	$+J_{CS}$	$+J_S - 2D_S$
ε_{21}	$-D_C - h$	0	$-D_S - h$
ε_{22}	0	0	0
ε_{23}	$-D_C + h$	0	$-D_S + h$
ε_{31}	$+J_C - 2D_C$	$+J_{CS}$	$+J_S - 2D_S$
ε_{32}	$-D_C + h$	0	$-D_S + h$
ε_{33}	$-J_C - 2D_C + 2h$	$-J_{CS}$	$-J_S - 2D_S + 2h$

Çizelge 3.4’de gösterilen bağ enerjileri (3.11) ’de yerine yazılmak sureti ile kristal alan etkileşmeli bir manyetik nanoparçacık için bağ değişkenleri bulundu ve iterasyon yöntemine dayalı hazırlanan Fortran bilgisayar programı ile çözüldü. Sonuçlar mıknatıslanma denkleminde kullanılarak manyetizasyon eğrileri ve histerezis eğrileri şeklinde verildi. Bu eğriler gelecek bölümde ayrıntılı olarak tartışıldı.

BÖLÜM IV

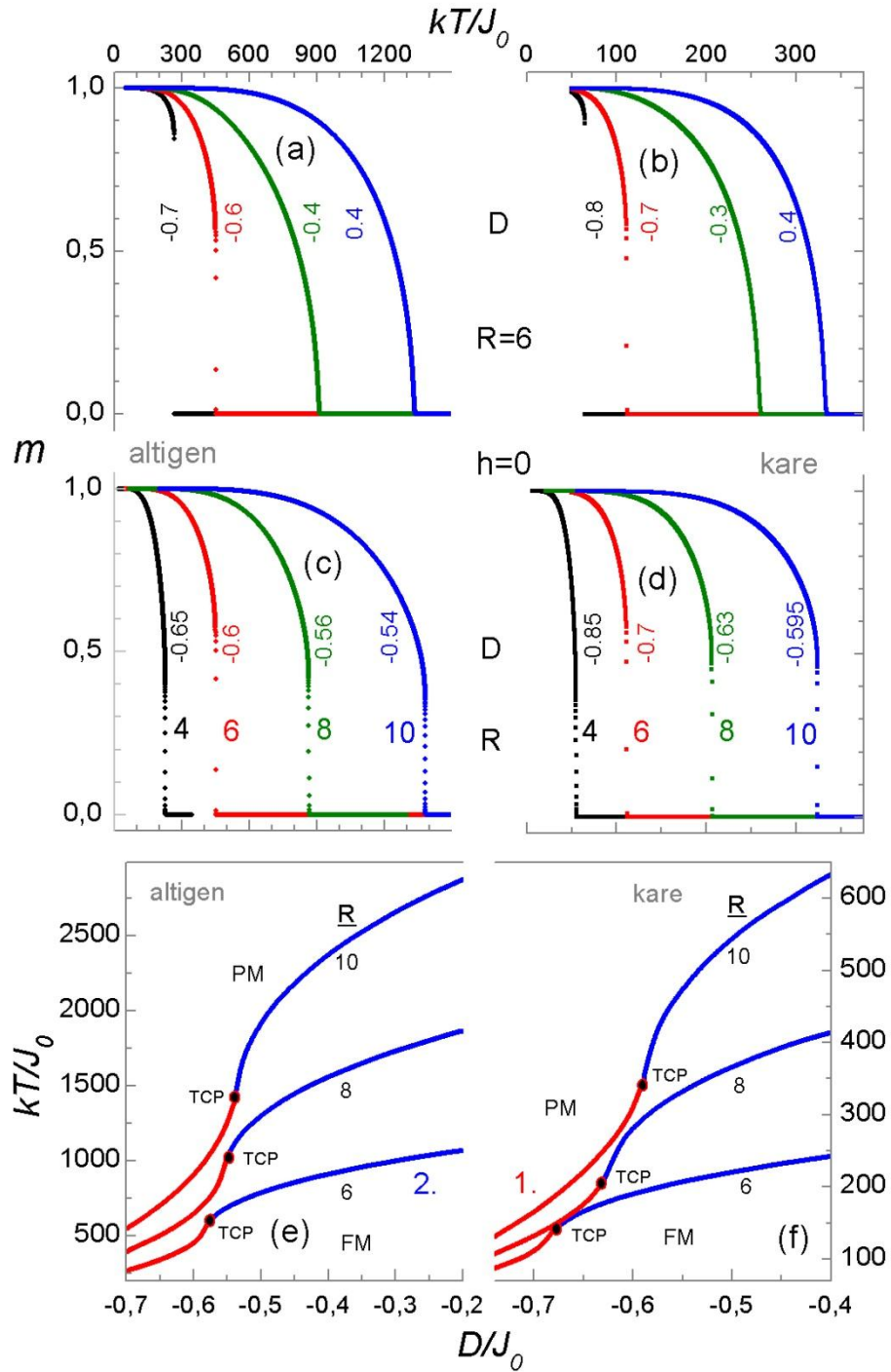
BULGULAR VE TARTIŞMA

4.1 Mıknatıslanma Eğrileri ve Faz Diyagramları

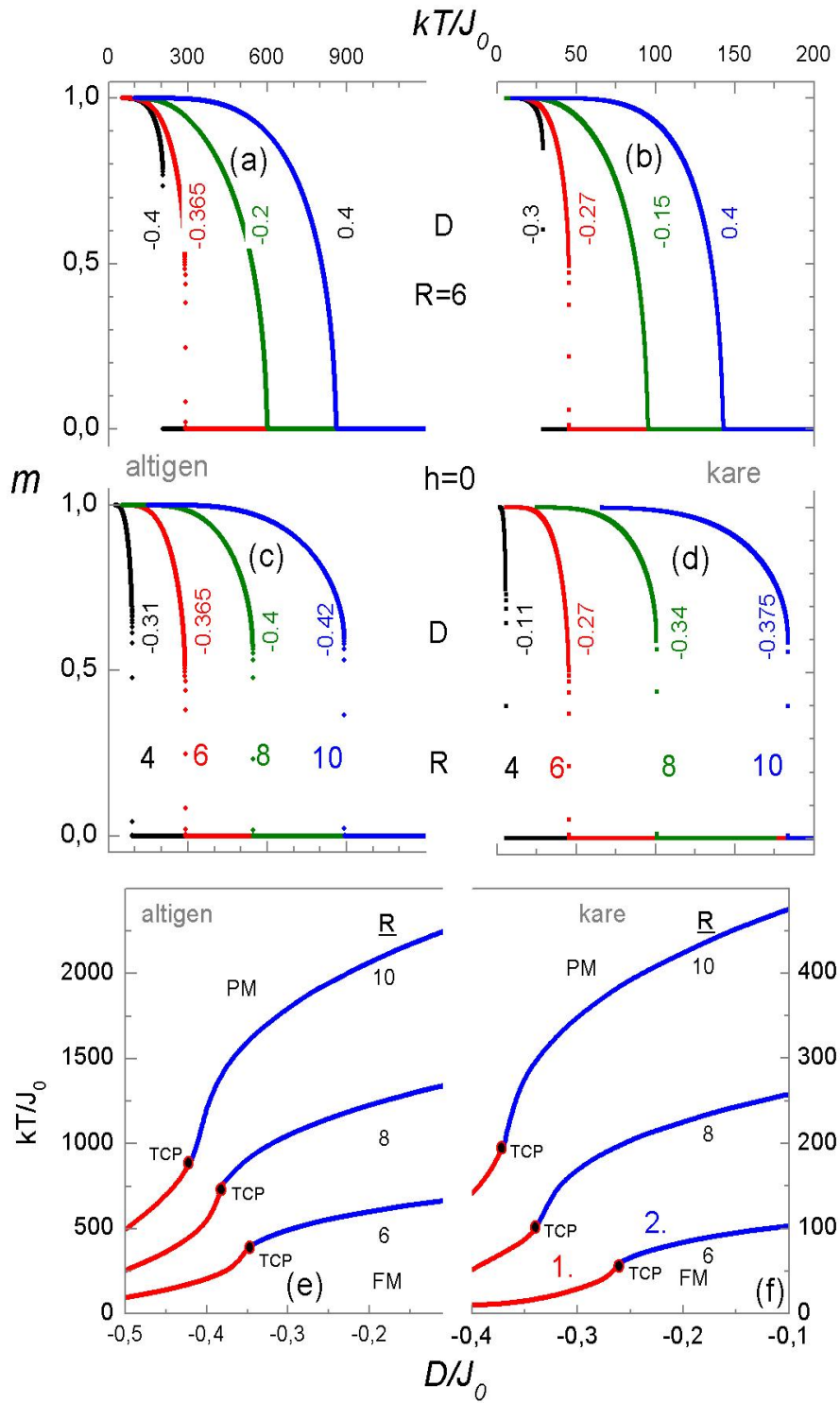
Şekil 4.1 ve şekil 4.2’de altıgen ve kare örgüler üzerinde tanımlanan farklı kabuk sayısına sahip tek domenli homojen ve kompozit nanoparçacığın değişik kristal alan değerleri için manyetik alan yokluğunda ($h=0$) elde edilen mıknatıslanma eğrileri ve faz diyagramları verildi. Şekil 4.1 ’de çekirdek, yüzey ve ara yüzey dipol-dipol etkileşme değerleri $J_0 = J_C = J_{CS} = J_S = 1$ şeklinde seçildi. Şekil 4.2’de ise bu değerler $J_0 = J_C = J_S = 1, J_{CS} = -J_0$ olarak alındı.

Şekil 4.1 (a), şekil 4.1 (b), şekil 4.1 (c) ve şekil 4.1 (d)’ de artan sıcaklıkla birlikte homojen nanoparçacığın manyetizasyon değeri azalır ve sistem faz dönüşümü geçirir. Faz dönüşüm sıcaklığı kristal alan sabitine (D), örgü türüne ve parçacık yarıçapına (R) bağlıdır. Ayrıca, seçilen D sabitinin değerine göre parçacık ikinci derece faz dönüşüm türüne ilave olarak birinci derece faz dönüşümü de sergiler. Altıgen örgüde her iki faz geçiş türüne ait sıcaklık değerleri kare örgüye göre daha büyüktür. Bir sistemde mıknatıslanma, sıcaklığa bağlı olarak sürekli bir değişim gösteriyorsa bu sistem ikinci derece faz dönüşümü göstermektedir. Eğer sistemin manyetizasyonu sıcaklık ile sürekli değilde kesikli değişim sergiliyorsa bu sistem birinci derece faz dönüşümü gerçekleştirir. Altıgen örgülü parçacığın kare örgülü parçacığa göre faz geçiş türüne ait sıcaklığının daha büyük olması altıgen örgülü parçacığın birim hücre başına düşen atom sayısının daha fazla olmasından yani daha sıkı yapıya sahip olmasından kaynaklanmaktadır. Şekil 4.1 (e),(f)’de birinci ve ikinci derece faz geçişi üçlü kritik nokta (TCP) adı verilen özel bir noktada birleşir. Parçacık büyüklüğünün ve D ’nin artmasıyla TCP sıcaklığı büyümektedir. Nanoparçacığın büyüklüğünün artmasıyla üçlü kritik nokta sıcaklığının artması beklenen bir durumdur. Bir nanoparçacığın büyüklüğü arttıkça parçacık hacimsel yapılı malzemeye yaklaşacak dolayısıyla parçacığın faz dönüşümü yapması için daha yüksek sıcaklığa ihtiyaç olacaktır. Diğer taraftan, Şekil 4.2 (a) ve şekil 4.2 (b), şekil 4.2 (c) ve şekil 4.2 (d)’de de görüldüğü gibi kompozit nanoparçacığın birinci ve ikinci derece faz geçiş sıcaklıkları homojen parçacığınkine

göre daha düşüktür. Şekil 4.2 (e), (f)'de gözlenen TCP sıcaklığı ve parçacık büyüklüğündeki artış ise D 'nin azalmasına bağlıdır.



Şekil 4.1. (a) Farklı D değerleri için altıgen örgüye ait mıknatıslanma eğrileri (b) şekil 4.1 (a) ile aynı ancak kare örgü için elde edilmiştir (c) farklı R değerleri için altıgen örgüye ait mıknatıslanma eğrilerinin üçlü kritik nokta davranışları (d) şekil 4.1 (c) ile aynı ancak kare örgü için elde edilmiştir (e) altıgen örgü için T - D düzleminde faz diyagramı (f) şekil 4.1 (e) ile aynı ancak kare örgü için elde edilmiştir. $J_0 = J_C = J_{CS} = J_S = 1$

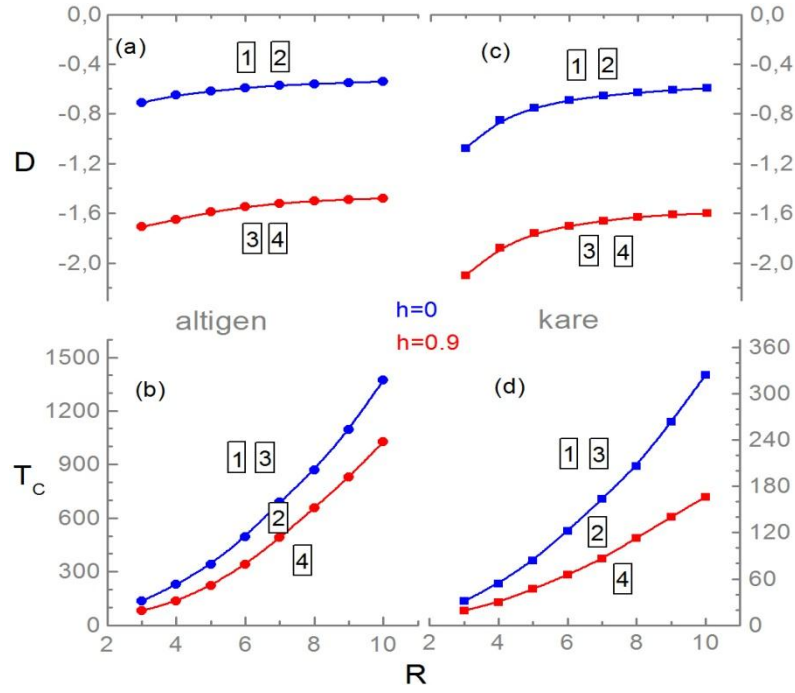


Şekil 4.2. Şekil 4.1 ile aynı ancak $J_0 = J_C = J_S = 1$, $J_{CS} = -J_0$

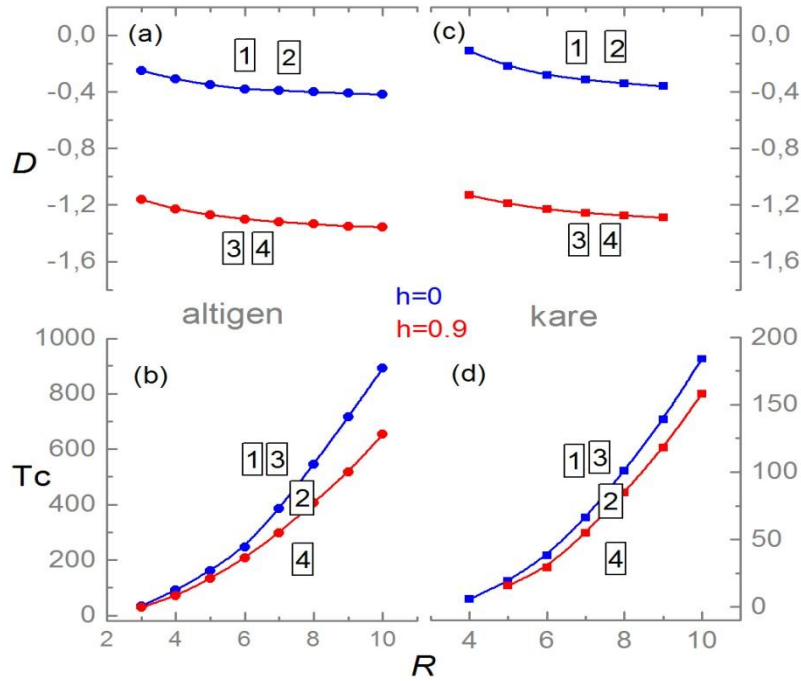
Şekil 4.3 (a), (b)'de altigen örgüye sahip homojen nanoparçacığın farklı dış manyetik alan ($h=0, h=0.9$) değerlerinde sırasıyla kristal alan (D) ile kritik sıcaklık (T_C)

değerlerinin nanoparçacığın büyüklüğüne göre değişimi görülmektedir. Şekil 4.3 (c), (d) ise şekil 4.3 (a), (b) ile aynı fakat örgü yapısı kare seçilmiştir. Şekil 4.3' te homojen nanoparçacık için elde edilen değerler kompozit nanoparçacıklar için de elde edilerek şekil 4.4 oluşturulmuştur.

Şekil 4.3 (a)'da kristal alan değerleri parçacık büyüdükçe küçük miktarda yumuşak bir şekilde büyüme göstermektedir. Büyüklüğe bağlı olarak kritik sıcaklık değerleri ise üstel bir artış sergilemektedir (Şekil 4.3 (b)). Farklı manyetik alan değerleri için her iki davranışta benzerdir. Ancak kristal alan ve kritik sıcaklık değerleri aynı büyüklükteki homojen bir nanoparçacık için yüksek manyetik alanda daha küçük değerleri göstermektedir. Şekil 4.3 (c)'de kristal alan değerleri nanoparçacığın yarıçapı ile logaritmik artış göstermekte ve bu artışın altıgen örgüye göre daha sert olduğu gözlemlenmiştir. Aynı zamanda artışın; kare örgüde kristal alan ve kritik sıcaklık değerleri daha düşük değerlerden başlamakta farklı dış manyetik alan ($h = 0, h = 0.9$) değerleri arası azda olsa genişlemektedir. Şekil 4.3 (d)'de nanoparçacığın büyüklüğü arttıkça kritik sıcaklık değeri üstel artış göstermekte yine altıgen örgüye göre daha belirgin ve düşük değerlerden başlamaktadır Şekil 4.3'te homojen nanoparçacık için dört farklı bölge olduğu tespit edildi. Bu bölgeler nanoparçacığın büyüklüğü sabit alınarak sırasıyla; birinci bölgede yüksek kristal alan ve yüksek sıcaklık değeri, ikinci bölgede yüksek kristal alan değeri ve iki dış manyetik alan ($h = 0, h = 0.9$) arasındaki sıcaklık değerine karşılık gelmektedir. Aynı şekilde üçüncü bölgede düşük kristal alan ve yüksek sıcaklık değerine, dördüncü bölgede ise düşük kristal alan değeri ve düşük sıcaklık değerine karşılık gelmektedir. Şekil 4.4 (a) ve şekil 4.4 (c)'de kompozit bir nanoparçacık için elde edilen kristal alan değerlerinin homojen bir nanoparçacığa göre tamamen ters bir davranış sergilediği ve kristal alan değerlerinin daha yüksek değerleri aldığı gözlemlenmiştir. Şekillere dikkatlice bakıldığında homojen nanoparçacıklarda kristal alan değerleri logaritmik artış gösterirken kompozit nanoparçacıklarda ise üstel bir azalma görülmektedir. Bu azalma ise altıgen örgü ile kare örgüde benzerdir. Kompozit nanoparçacıklarda kritik sıcaklık değerleri homojen nanoparçacığa göre daha küçük değerleri almaktadır (Şekil 4.4 (b), (d)).



Şekil 4.3. (a) Altıgen yapıda, D değerlerinin homojen nanoparçacığın büyüklüğüne göre farklı manyetik alan altındaki ($h = 0, h = 0.9$) gelişimi (b) altıgen yapıda, farklı büyüklükteki homojen nanoparçacıkların kritik sıcaklık değerleri şekil 4.2. (e)'deki $R = 6, 8,$ ve 10 büyüklüğündeki nanoparçacıkların üçlü kritik noktalarıyla uyumlu (c) kare örgüde, D değerlerinin homojen nanoparçacığın büyüklüğüne göre farklı manyetik alan altındaki ($h = 0, h = 0.9$) gelişimi (d) kare örgüde, farklı büyüklükteki homojen nanoparçacıkların kritik sıcaklık değerleri şekil 4.2. (f)'deki $R = 6, 8,$ ve 10 büyüklüğündeki nanoparçacıkların üçlü kritik noktalarıyla uyumlu



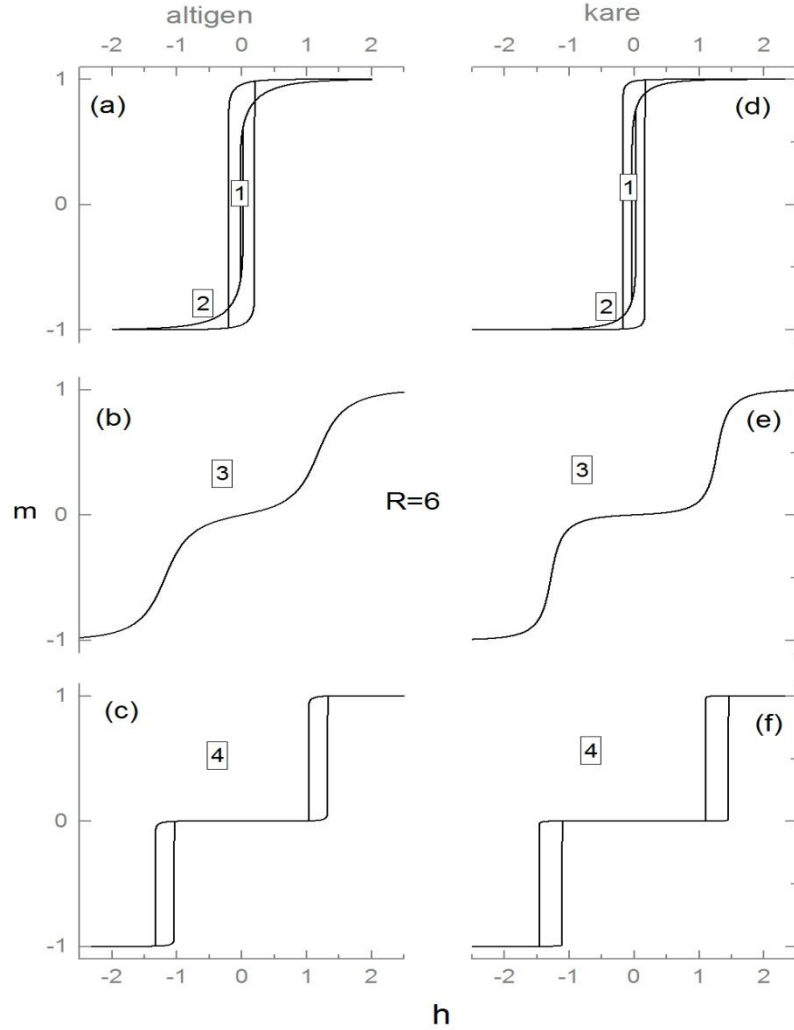
Şekil 4.4. Şekil 4.3 ile aynı ancak $J_0 = J_c = J_s = 1, J_{cs} = -J_0$

4.2 Histerezis Eğrileri

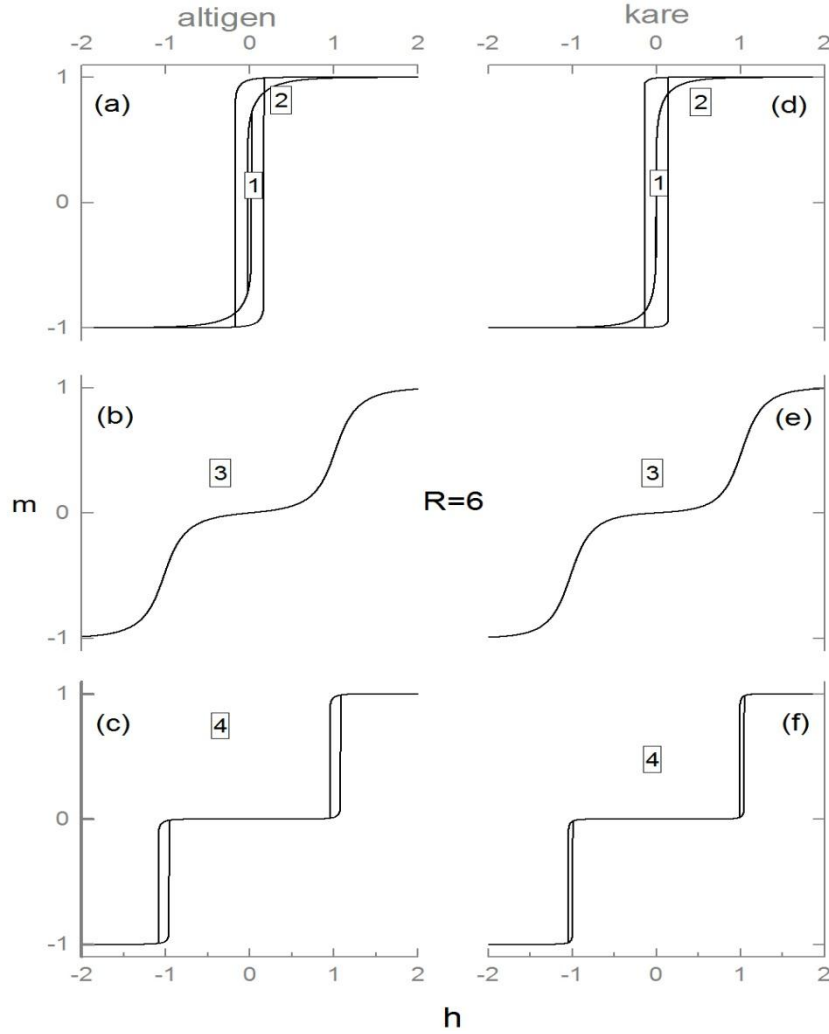
Şekil 4.3' te oluşturulan dört bölgeden okunan değerler yardımıyla homojen bir nanoparçacık için histerezis eğrileri (Şekil 4.5) elde edildi. Benzer olarak şekil 4.4' deki değerler kullanılarak kompozit bir nanoparçacık için histerezis eğrileri (Şekil 4.6) elde edildi.

Şekil 4.5 (a)'da altıgen örgülü homojen bir nanoparçacığın yüksek kristal alan ($D = -0,4$) ve yüksek sıcaklık ($k_B T = 800$) değerlerinde (birinci bölgede) paramanyetik davranış sergilediği, sıcaklık değeri ($k_B T = 400$) azaltıldığında (ikinci bölgede) ise ferromanyetik davranış sergilediği gözlemlendi. Artan dış manyetik alan ile azalan dış manyetik alan altında histerezis eğrileri birbiri üzerinden geçiyorsa parçacık paramanyetiktir yani kalıcı mıknatıslanma oluşmuyor demektir. Fakat histerezis döngüsünde artan ve azalan dış manyetik alan altında eğriler farklı konumlardan geçerek bir kalıcı mıknatıslanma oluşturuyorsa sistem ferromanyetiktir. Burada aynı büyüklükteki parçacığın sıcaklığı azaltıldığından parçacığın ferromanyetikliği artmaktadır. Şekil 4.5 (b)'de sıcaklığın yüksek değerinde ($k_B T = 800$) kristal alan değeri ($D = -1,8$) azaltıldığında (üçüncü bölgede) nanoparçacığın iki farklı domende paramanyetik davranışı görülmektedir. Kristal alan (D) bir sistemdeki her bir atomun sahip olduğu enerjidir dolayısıyla bu davranış D 'nin azalmasına bağlıdır. D 'nin azalması sistemin toplam enerjisini artırmakta aynı zamanda sistemdeki atomların sahip olduğu enerji sisteme hâkim olmaktadır ve sistemde iki farklı domen (manyetik bölge) oluşturmaktadır. Dördüncü bölgede ($D = -1,8, k_B T = 200$) ise nanoparçacık yine iki farklı domen oluşturmakta fakat sıcaklık değeri azaltıldığı için ferromanyetik davranış sergilemektedir (Şekil 4.5 c). Bu davranış hayali spin valf olarak adlandırılır. Kare örgüye sahip homojen nanoparçacığın birinci bölgedeki ($D = -0,6, k_B T = 150$) histerezis eğrisi altıgen örgülü nanoparçacığın aynı bölgedeki histerezis eğrisine benzer davranışlar sergilemekte ikinci bölgede ($D = -0,6, k_B T = 75$) ise histerezis eğrileri altıgen örgüye göre daha keskin davranışı görülmektedir (Şekil 4.5 d). Üçüncü bölgede ($D = -2,0, k_B T = 150$) ve dördüncü bölgede ($D = -2,0, k_B T = 40$) kare örgünün histerezis eğrileri altıgen örgüye göre daha keskin davranışı vardır (Şekil 4.5 (e), (f)). Şekil 4.6 (a), (b), (c)'de altıgen örgüye sahip kompozit bir nanoparçacığın birinci

bölgede ($D = -0,2, k_B T = 500$), ikinci bölgede ($D = -0,2, k_B T = 230$), üçüncü bölgede ($D = -1,4, k_B T = 500$) ve dördüncü bölgede ($D = -1,4, k_B T = 150$) histerezis davranışı homojen bir nanoparçacığın aynı örgü türündeki histerezis davranışına benzerdir. Fakat dördüncü bölgede histerezis eğrisi daha dardır. Kompozit bir nanoparçacığın mıknatıslanması homojen nanoparçacığa göre daha düşük olmasından dolayı kristal alan değeri ve indirgenmiş sıcaklık değeri daha düşük alınmıştır. Buda kompozit bir nanoparçacığın doyum mıknatıslanmasına ulaşması için gereken sıcaklığın daha düşük olduğunu göstermektedir. Şekil 4.6 (d), (e), (f)'de kare örgülü kompozit nanoparçacığın birinci bölgede ($D = -0,1, k_B T = 100$) ikinci bölgede ($D = -0,1, k_B T = 35$) üçüncü bölgede ($D = -1,3, k_B T = 100$) ve dördüncü bölgede ($D = -1,3, k_B T = 27$) benzer davranışı görülmektedir.

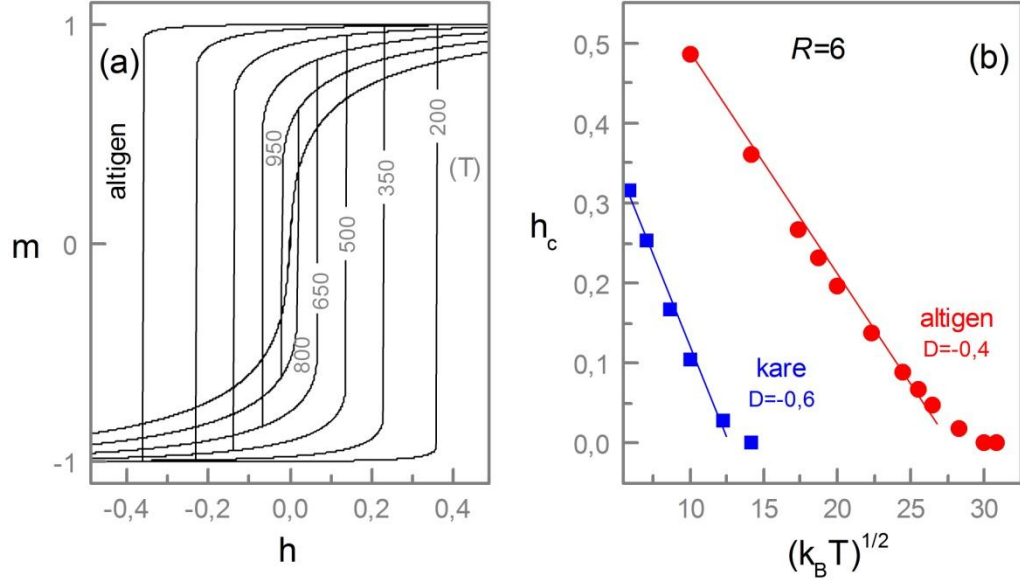


Şekil 4.5. Altigen yapılı nanoparçacığın birinci ve ikinci bölgeleri için (a) üçüncü bölge için (b) dördüncü bölge için (c) histerezis eğrileri. Kare örgülü nanoparçacığın birinci ve ikinci bölgeleri için (d) üçüncü bölge için (e) dördüncü bölge için (f) histerezis eğrileri $J_0 = J_C = J_{CS} = J_S = 1$



Şekil 4.6. Şekil 4.5 ile aynı ancak $J_0 = J_C = J_S = 1$, $J_{CS} = -J_0$

Homojen altıgen örgüden oluşan bir nanoparçacığın histerizis eğrilerinin sıcaklık değişimi şekil 4.7. (a)'da gösterilmiştir. Burada $R=6$ büyüklüğünde bir parçacığın artan sıcaklıkla birlikte koersif alanının azaldığı ve en yüksek sıcaklıkta tek bir çizgi haline geldiği görülmektedir. Düşük sıcaklıktaki davranış ferromanyetik, yüksek sıcaklıktaki davranış ise paramanyetiktir. Ferromanyetik davranış gösteren histerizis eğrileri sıcaklık artarken daha düşük koersif alana kaymaktadırlar. $R=6$ büyüklüğündeki bir nanoparçacığın altıgen ve kare örgüdeki sıcaklık değişimlerinden elde edilen koersif alanların $(k_B T)^{1/2}$ ye göre gelişimi şekil 4.7.(b)'de görülmektedir. Artan $(k_B T)^{1/2}$ ye göre lineer bir azalma gösterirken yüksek değerlerde bu değişim daha da hızlanmaktadır. Aynı $(k_B T)^{1/2}$ değerindeki altıgen ve kare örgü için koersif alanlardan altıgen örgünün ki daha büyüktür. Çünkü birim hücre başına düşen atom sayısı fazla olduğunda ferromanyetik bir özellikle koersif alan atom sayısıyla orantılıdır.



Şekil 4.7. (a) $R = 6$ kabuklu homojen bir nanoparçacığın histerizis eğrilerinin sıcaklıkla gelişimi (b) $R = 6$ kabuktan oluşan nanoparçacığın kare ve altigen örgü için koersif alanların $(k_B T)^{1/2}$ ye göre değişimi. Burada $J_0 = J_C = J_{CS} = J_S = 1$

BÖLÜM V

SONUÇ

Bu tez çalışmasında iki boyutta altıgen ve kare örgüler alınarak, homojen ve kompozit nanoparçacıkların $S=1/2$ ve $S=1$ Ising modelleri kullanılarak nanoparçacığın manyetik özelliklerinin büyüklüğe bağlı olarak incelenmesi yapıldı. Ayrıca kristal alanın nanoparçacığın manyetik özelliklerine etkisi incelendi.

Kristal alan etkisi göz önüne alınmadığında, bütün nanoparçacıklar için faz geçişlerinin ikinci derece faz geçişi olduğu tespit edildi. Düzensiz spin durumlarının, zayıf koordinasyon ve atomlar arasındaki değiş-tokuş etkileşmesinin kırılmasıyla gerçekleştiği belirlendi. Bu durum spin camları (SG)'na karşılık geldiği sonucuna ulaşıldı. Böyle durumlarda homojen olmayan yüzey etkisi görüldü. Kritik sıcaklık ($\sqrt{T_C}$) değerleri parçacık boyutuna bağlı olarak lineer bir şekilde değişmiştir. Nanoparçacığın büyüklüğü arttıkça T_C sıcaklığı da artmakta ve davranışı büyük boyutlu cisimlerin davranışına benzer bir davranış sergilediği bulundu. Homojen nanoparçacıkların $S=1/2$ ve $S=1$ durumlarından elde edilen histerezislerine göre koersif alanı (h_C), R^{-2} ile değişmektedir. Koersif alanın R^{-2} ile değişmesi ters kare kuvvet kanunu ile uyumludur. Küçük boyutlu nanoparçacıkların histerezis eğrileri dikkate alındığında süperparamanyetik davranışı irdelendi. Kompozit nanoparçacıkların sıcaklığa bağlı davranışlarından, daha düşük sıcaklık değerlerinde, koersif alanların daha yüksek olduğu belirlendi. Bu özellik gelecekte inşa edilmesi düşünülen manyetik veri depolama için büyük önem arz etmektedir.

Kristal alan etkisi dikkate alındığında, ikinci derece faz geçişinin yanında azalan ve özellikle negatif kristal alan değerlerinde mıknatıslanmanın sıcaklık etkisi birinci derece faz geçişi tespit edildi. Homojen ve kompozit parçacıkların birinci ve ikinci derece faz geçiş sıcaklık değerleri karşılaştırıldığında, altıgen örgüden tespit edilen kritik sıcaklık değerleri kare örgüden oluşan nanoparçacıkların kritik sıcaklık değerlerine göre daha büyük olmaktadır. İkinci ve birinci derece faz geçiş sıcaklıklarından elde edilen faz diyagramları parçacık büyüklüğüne bağlı olarak detaylıca araştırıldı. Homojen ve kompozit nanoparçacıkların faz diyagramları büyüklüğe bağlı olarak ters davranış

sergiledikleri gözlemlendi. Kristal alan varlığında manyetik histerezis eğrileri kritik sıcaklık ve kritik kristal alan (D) değerlerindeki farklı davranışları sistematik bir şekilde araştırıldı. Homojen ve kompozit nanoparçacıkların histerezis eğrileri genel davranış olarak bir düzen içinde olduğu bulundu. Yüksek sıcaklıklarda parçacıklar süperparamanyetik davranış sergilerken azalan sıcaklıkla birlikte ferromanyetik davranış sergiledikleri gösterildi. Süperparamanyetik ve ferromanyetik davranışa kristal alan etkisi araştırıldığında azalan kristal alan değeri ile birlikte süperparamanyetik davranış önce iki farklı süperparamanyetik daha sonrada iki farklı ferromanyetik davranış etkisi tespit edildi. Atomik boyutlarda bu etkinin kristal alan değerine bağlı olduğu net olarak incelendi. Bu şekilde homojen ve kompozit nanoparçacıkların histerezis eğrilerinin yarılmasının asıl kaynağının kristal alan olduğu ilk defa detaylıca bu tez çalışmasında yapılmış oldu.

KAYNAKLAR

Aktaş, B., Tagirov, L. and Mikailov, F., Nanostructures Magnetic Materials and Their Applications, Kluwer Academic Publisher, Nato Science Series, *Mathematics Physics and Chemistry* 143, 2003.

Aktaş, B., Tagirov, L. and Mikailov, F., “Magnetic Nanostructures”, *Springer Series in materials science* 94, 2006.

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.

Benyoussef, A., Biaz, T., Saber, M. and Touzani, M., “The Spin-1 Ising Model with a Random Crystal Field: The Mean-Field Solution”, *J. Phys. C: Solid State Phys.* 20, 5349–5354, 1987.

Blume, M., Emery, V. J. and Griffiths, R. B., “Ising Model for the λ Transition and Phase Separation in He³-He⁴ Mixtures”, *Phys. Rev. A* 4, 1071–1077, 1971.

Bolle, D., Busquets Blanca, J., Shimb, G.M. and Verbeirena, T., “The Blume–Emery–Griffiths Neural Network: Dynamics for Arbitrary Temperature”, *Physica A* 331, 319–350, 2004.

Burns, T.E., Dennison, J.R. and Kite, J., “Extended BEG Model of Monhalogenated Methanes Physisorbed on Ionic Crystals”, *Surface Science* 554, 211–221, 2004.

Capel, H. W., “On the Possibility of First-Order Phase transitions in Ising Systems of Triplet Ions with Zero-Field Splitting”, *Physica* 32, 966–988, 1966.

Çiftçi, N., Tek Domenli Bir Nanoparçacığın Dipol–Kuadrupol Etkileşmesi Altında Manyetik Özelliklerin İncelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, *Gaziosmanpaşa Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü* Tokat, 2011.

Ekiz, C., Keskin, M. and Yalçın, O., “Metastable and Unstable States of the Blume–Capel Model Obtained by the Cluster Variation Method and the Path Probability Method”, *Physica A* 293, 215–232, 2000.

Erdem, R., Spin–1 Ising Sisteminin Kritik Sıcaklık Yakınlarındaki Durulma Teorisi, Doktora Tezi, *Erciyes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Kayseri, 2001.

Erdem, R., “Frequency Dependence of the Complex Susceptibility for a Spin-1 Ising Model”, *J. Magn. Magn. Mater.* 321, 2592–2595, 2009.

Erdinç, A. and Keskin, M., “Equilibrium and Nonequilibrium Behavior of the Spin-1 Ising Model in the Quadrupole Phase”, *Physica A* 307, 453–468, 2002.

Gauvin, L., Nadal, J. P. and Vannimenus, J., “Schelling Segregation in an Open City: A Kinetically Constrained Blume-Emery-Griffiths Spin-1 System”, *Phys. Rev. E* 81, 066120–1–9, 2010.

Ghantous, M. A. and Khater, A., “Magnetic Properties of 2D Non-Island II: Ising Model with Out-Of-Plane Magnetic Field”, *J. Magn. Magn. Mater.* 323, 2504–2512, 2011.

Goveas, N. and Mukhopadhyay, G., “Study of Blume-Emery-Griffiths Model by a Modified Bethe-Peierls Method”, *Phys. Scripta* 56, 661–666, 1997.

Gu, B. L., Ni, J. and Zhu, J. L., “Structure of the Alloy $(GaAs)_{1-x}Ge_{2x}$ and Its Electronic Properties”, *Phys. Rev. B* 45, 4071–4076, 1992.

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.

Iglesias, O. and Labarta, A., “Finite-Size and Surface Effects in Maghemite Nanoparticles: Monte Carlo Simulations”, *Phys. Rev. B* 63, 184416–1–11, 2001.

Iglesias, O., Labarta, A. and Ritort, F., “Monte Carlo Study of the Finite-Size Effects on the Magnetization of Maghemite Small Particles”, *J. Appl. Phys.* 89, 7597–7599, 2001.

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

Kaneyoshi, T., “Phase Diagrams of a Nanoparticle Described by the Transverse Ising Model”, *Phys. Status Solidi B*, 242, 2938–2948, 2005.

Kartopu, G. and Yalçın, O., *Electrodeposited Nanowires and their Applications*, edited by N. Lupu), available from: <http://sciyo.com/articles/show/title/fabrication-and-applications-of-metal-nanowire-arrays-electrodeposited-in-ordered-porous-templates> *INTECH*, 2010.

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 Erdiñç, A., “The Spin-1 Ising Model on the Body-Centered Cubic Lattice Using the Pair Approximation”, *Turkish Journal of Physics* 19, 88–100, 1995.

Keskin, M. and Arslan, H. A., “Spin-1 Ising Modelin in the Presence of the Magnetic Fields due to the Dipole and Quadrupole Moments”, *Tr. J. Phys.* 19, 408–415, 1995.

Keskin, M. and Erdem, R., “Dynamic Behavior of a Spin-1 Ising Model. I. Relaxation of Order Parameters and the ‘Flatness’ Property of Metastable States”, *J. Stat. Phys.* 89, 1035–1046, 1997.

Keskin, M., Ekiz, C. and Yalcin, O., “Stable, Metastable and Unstable Solutions of the Blume-Emery-Griffiths Model”, *Physica A* 267, 392–405, 1999.

- Kikuchi, R., “A Theory of Cooperative Phenomena”, *Phys. Rev.* 81, 988-1002, 1951.
- Kokorina, E. E. and Medvedev, M. V., “Magnetization Curves of Nanoparticle with Single-Ion Uniaxial Anisotropy”, *J. Magn. Magn. Mater.* 310, 2364–2366, 2007.
- Koza, Z., Jasiukiewicz, C. and Pekalski, A., “Transfer Matrix Methods in the Blume-Emery-Griffiths Model”, *Physica A* 164, 191-206, 1990.
- Lee, H. H. and Landau, D. P., “Phase Transitions in an Ising Model for Monolayers of Coadsorbed Atoms”, *Phys. Rev. B* 20, 2893–2900, 1979.
- Leite, V. S. and Figueiredo, W., “Monte Carlo Simulations of Antiferromagnetic Small Particles”, *Brazilian J. Phys.* 34, 452–454, 2004.
- Meijer, P. H. E., Keskin, M. and Bodegom, E., “A Simple Model for the Dynamics Towards Metastable States”, *J.Stat. Phys.* 45, 215–232, 1986.
- Netz, R. R. and Berker, A. N., “Renormalization-Group Theory of an Internal Critical-End-Point Structure: The Blume-Emery-Griffiths Model With Biquadratic Repulsion”, *Phys. Rev. B* 47, 15019–15022, 1993.
- Onsager, L., “Crystal Statistics, I. A Two Dimensional Model with an Order-Disorder Transition”, *Phys. Rev.* 65, 117–149, 1944.
- Özüm, S., Kristal Alan ve Kuadratik Etkileşimli Nanoparçacığın Spin-1 Modelinin Çift Yaklaşım Yöntemi ile İncelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, *Bozok Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Yozgat, 2010.
- Rego, L. G. C. and Figueiredo, W., “Magnetic Properties of Nanoparticles in the Bethe-Peierls Aproximation”, *Phys. Rev. B* 64, 144424–1–7, 2001.

Stoner, E. C. and Wohlfarth, E. P., “A Mechanism of Magnetic Hysteresis in Heterogeneous Alloys”, *Philos. Trans. R. Soc. Lond. Ser. A* 240, 599–642, 1948.

Şarlı, N. and Keskin, M., “Two Distinct Magnetic Susceptibility Peaks and Magnetic Reversal Events in a Cylindrical Core/shell Spin-1 Ising Nanowire”, *Solid State Communications* 152, 354-359, 2012.

Takahashi, K. and Tanaka, M., “Spin-One Ising Model with Bilinear and Biquadratic Interactions., II. Phase Diagram”, *J. Phys. Soc. Japan* 48, 1423–1428, 1980.

Tucker, J. W., “Improved Effective Field Treatment of the BEG Model”, *J. Magn. Mater.* 80, 203–210, 1989.

Usov, N. A. and Gudoshnikov, S. A., “Magnetic Structure of a Nanoparticle in Mean-Field Approximation”, *J. Magn. Mater.* 290, 727–730, 2005.

Yalçın, O., En Düşük Yaklaşımlı Küresel Değişim Metoduyla Blume–Capel Modelinin İncelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, *Gaziosmanpaşa Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Tokat, 1997.

Yalçın, O., Erdem, R. and Övünç, S., “Spin-1 Model of Noninteracting Nanoparticles”, *Acta Phys. Pol. A* 114, 835–844, 2008.

Yalcin, 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

Yang, Y., “Blume-Emery-Griffiths Dynamics in Social Networks”, *Physics Procedia* 3, 1839-1844, 2010.

Yüksel, Y., Aydiner, E. and 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.

Zahraouy, H. E., Bahmad, L. and Benyoussef, A., “Phase Diagrams of the Blume-Emery-Griffiths Thin Films”, *Brazilian J. Phys.* 36, 557-561, 2006.

Zaim, A., Kerouad, M. and Amraoui, Y. E., “Magnetic Properties of Ferrimagnetic Core/Shell Nanoparticle 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.

ÖZ GEÇMİŞ

Zafer Demir 20.05.1982 tarihinde Niğde’de doğdu. İlk orta ve lise öğretimini Niğde’de tamamladı. 2001 yılında girdiği Niğde Üniversitesi Fizik Bölümü’nden Ocak 2007’de mezun oldu. 2007-10 yılları arasında Niğde Çiftlik ilçesinde farklı okullarda ücretli öğretmen olarak görev yaptı.

2010 yılında Niğde Üniversitesi Fizik Anabilim Dalı’nda yüksek lisans öğrenimine başladı. Mayıs 2013’de yüksek lisans öğrenimini tamamladı.

Tez Çalışmasından Üretilen Eserler

Bu tez çalışmasından, 1 (bir) adet uluslararası kitap bölümü ve 2 (iki) adet ulusal bildiri üretilmiştir. Bu üretilen çalışmalar aşağıda sunulmuştur.

Yalcin, 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.

Erdem, R., Demir, Z. ve Yalçın, O., “Farklı örgü ve spin değerlerine sahip çekirdek–kabuk nanoparçanın büyüklüğe bağlı incelemesi” *18. Yoğun Madde Fiziği – Ankara Toplantısı*, Orta Doğu Teknik Üniversitesi, 25 Kasım 2011.

Demir, Z., Ünlüer, Ş., Erdem, R. and Yalçın, O., “Origin of the Phase Transition in Core-Surface Nanoparticles” *The 2nd International Conference on Computation for Science and Technology*, Niğde Üniversitesi, 9-11 Temmuz 2012.