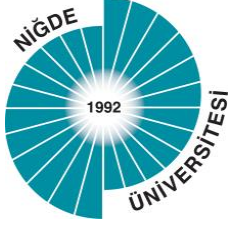


A. ŞAHİN, 2016



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

YÜKSEK LİSANS TEZİ

ÇEKİRDEK-YÜZEY TİPİ BİR NANOPARÇACIĞIN KRİSTAL ALAN ETKİSİ
ALTINDA KUADRUPOL ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

AYŞE ŞAHİN

NİĞDE ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Haziran 2016

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

ÇEKİRDEK-YÜZEY TİPİ BİR NANOPARÇACIĞIN KRİSTAL ALAN ETKİSİ
ALTINDA KUADRUPOL ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

AYŞE ŞAHİN

Yüksek Lisans Tezi

Danışman

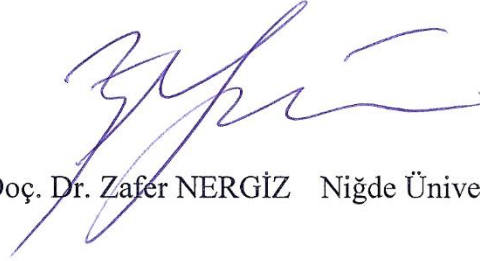
Prof. Dr. Orhan YALÇIN

Haziran 2016

Ayşe ŞAHİN tarafından Prof. Dr. Orhan YALÇIN danışmanlığında hazırlanan “Çekirdek-Yüzey Tipi Bir Nanoparçacığın Kristal Alan Etkisi Altında Kuadrupol Özelliklerinin İncelenmesi” adlı bu çalışma jürimiz tarafından Niğde Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında Yüksek Lisans Tezi olarak kabul edilmiştir.



Başkan: Yrd. Doç. Dr. Harun BAYRAKDAR Çanakkale Onsekiz Mart Üniversitesi



Üye: Yrd. Doç. Dr. Zafer NERGİZ 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.

Ayşe ŞAHİN



ÖZET

ÇEKİRDEK-YÜZEY TİPİ BİR NANOPARÇACIĞIN KRİSTAL ALAN ETKİSİ ALTINDA KUADRUPOL ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

ŞAHİN, Ayşe

Niğde Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

Danışman

:Prof. Dr. Orhan YALÇIN

Haziran 2016, 43 sayfa

Bu yüksek lisans tezinde, yüzey-çekirdek tipi altıgen nanoparçacıkların manyetik ve kuadrupol özellikleri altıgen örgü üzerine tanımlanan bilineer (J) ve kristal alan (D) etkileşmeli spin-1 Ising modeli ile incelendi. Nanoparçacıkların yüzey, arayüzey ve çekirdek bölgelerindeki spinleri çift yaklaşım yöntemiyle hesaplandı. Yüzey, ara yüzey ve çekirdek için bağ enerjileri model Hamiltoniyen ile tanımlandı. Bu bağ enerjileri kullanılarak yüzey-çekirdek tipi altıgen nanoparçacıklar için öz uyumluluk denklemleri elde edildi. Altıgen örgülü homojen ve kompozit nanoparçacıklar için kuadrupol özelliklerinin kaynağı sıcaklık ve kristal alan altında gözlemlendi.

Anahtar Sözcükler: Altıgen nanoparçacıklar, çift yaklaşım yöntemi, kuadrupol özellikler, bilineer ve kristal alan etkileşimleri

SUMMARY

INVESTIGATION OF QUADRUPOLE PROPERTIES OF A CORE-SURFACE TYPE NANOPARTICLE WITH CRYSTAL FIELD EFFECTS

ŞAHİN, Ayşe

Nigde University

Graduate School of Natural and Applied Sciences

Department of Physics

Supervisor : Prof. Dr. Orhan YALÇIN

June 2016, 43 pages

In this Msc thesis, the magnetic and quadrupole properties of surface-core type hexagonal nanoparticles were performed by spin-1 Ising model with bilinear (J) and crystal field (D) interactions on hexagonal lattices. The spins of nanoparticles in surface, surface-core and core parts were interpolated with the pair approximation method. The bond energy parameters for surface, surface-core and core parts were defined with the model Hamiltonian. Using this bond energy, the self-consistent equations were extracted for surface-core type hexagonal nanoparticles. The origin of the quadrupole properties for homogeneous and composite hexagonal nanoparticles were observed at various temperature and crystal field.

Keywords: Hexagonal nanoparticles, pair approximation methods, quadrupole properties, bilinear and crystal field interactions

ÖN SÖZ

Bu tezde, altıgen örgüden oluşan bilineer (J) ve kristal alan (D) etkileşmeli spin-1 Ising modeli yüzey-çekirdek tipi homojen ve kompozit nanoparçacıklara uygulanarak kuadrupol özellikleri incelendi. Bu nanoparçacıklara ait yüzey, arayüzey ve çekirdek bölgelerindeki spin durumları çift yaklaşım yöntemiyle bulundu. Sisteme ait hamiltoniyen ifadesi kullanılarak yüzey, ara yüzey ve çekirdek için bağ enerjileri ve buradan hareketle de öz-uyumluluk denklemleri türetildi. Böylece altıgen örgü üzerine inşa edilen homojen ve kompozit nanoparçacıkların kuadrupol özellikleri detaylıca araştırıldı.

Tez çalışmam süresince değerli destek ve yardımlarını gördüğüm danışmanım Sayın Prof. Dr. Orhan YALÇIN'a en içten teşekkürlerimi sunarım.

Akdeniz Üniversitesi, Fen Fakültesi Fizik Bölümü öğretim üyesi Sayın Prof. Dr. Rıza ERDEM'e hocama kuadrupol ve diğer özelliklerin araştırılmasında verdiği destek için minnettarım.

Çalışmalarında kıymetli vakitlerini ayırıp desteklerini esirgemeyen Dr. Songül ÖZÜM hanımefendiye teşekkürlerimi borç bilirim.

Kıymetlerini ölçemediğim annem Fatma ŞENER ve babam Yaşar ŞENER'e sonsuz teşekkürleri bir borç olarak sunarım. Ayrıca maddi ve manevi desteğini esirgemeyen ve tez çalışmam süresince anlayışı için değerli eşim Hulusi ŞAHİN'e teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER DİZİNİ

ÖZET	IV
SUMMARY	V
ÖN SÖZ	VI
İÇİNDEKİLER DİZİNİ	VII
ÇİZELGELER DİZİNİ	IX
ŞEKİLLER DİZİNİ	X
SİMGE VE KISALTMALAR	XII
BÖLÜM I GİRİŞ	1
BÖLÜM II KURUMSAL BİLGİ	5
2.1 Manyetizma	5
2.2 Manyetik Sistemlerin Sınıflandırılması	5
2.1.1 Diyamanyetik sistemler	5
2.1.2 Paramanyetik sistemler	6
2.1.3 Ferromanyetik sistemler	7
2.1.4 Antiferromanyetik sistemler	8
2.1.5 Ferrimanyetik sistemler	9
2.1.6 İkinci ve birinci derece faz geçişleri	10
BÖLÜM III MATERYAL VE YÖNTEM	11
3.1 Ising Modeli	11
3.2 Çift Yaklaşım Yöntemi	11
3.3 Hamiltoniyen'in Nanoparçacıklara Uyarlanması	13
BÖLÜM IV BULGULAR VE TARTIŞMA	17
4.1 Homojen Nanoparçacığın Manyetik özellikleri	17
4.1.1 Homojen nanoparçacığın mıknatıslanma ve kuadrupol düzen eğrileri	17
4.1.2 Homojen nanoparçacığın D ve T_C değerlerinin R 'ye göre gelişimi	20
4.1.3 Homojen nanoparçacığın manyetik ve kuadrupol histerezis eğrileri	21
4.2 Kompozit Nanoparçacığın Manyetik Özellikleri	24
4.2.1 Kompozit nanoparçacığın mıknatıslanma ve kuadrupol düzen eğrileri	24
4.2.2 Kompozit nanoparçacığın D ve T_C değerlerinin R 'ye göre gelişimi	27
4.2.3 Kompozit nanoparçacığın manyetik ve kuadrupol histerezis eğrileri	28

BÖLÜM V SONUÇ.....	31
KAYNAKLAR	33
ÖZ GEÇMİŞ	42
TEZ ÇALIŞMASINDAN ÜRETİLEN ESERLER	43



ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 3.1. Nanoparçacığın yarıçapına göre yüzey, ara yüzey ve çekirdeki toplam spin sayıları ve spin çift sayıları	16
Çizelge 3.2. Çekirdek-yüzey tipi altıgen nanoparçacıkların $S = 1$ Ising modeli için bağ enerjileri.....	16



ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1. Diyamanyetik bir sistemde temsili $m-h$ grafiği.....	6
Şekil 2.2. Paramanyetik sistemde temsili manyetik momentlerin yönelimleri	6
Şekil 2.3. Paramanyetik bir sistemde temsili $m-h$ grafiği	7
Şekil 2.4. Ferromanyetik bir sistemde temsili manyetik momentlerin yönelimi.....	7
Şekil 2.5. Ferromanyetik bir sistemde temsili $m-h$ grafiği.....	8
Şekil 2.6. Antiferromanyetik bir sistemde temsili manyetik momentlerin yönelimi	8
Şekil 2.7. Antiferromanyetik bir sistemde temsili $m-h$ grafiği.....	9
Şekil 2.8. Ferrimanyetik bir sistemde temsili manyetik momentlerin yönelimi.....	9
Şekil 2.9. Ferrimanyetik bir sistemde temsili $m-h$ grafiği	10
Şekil 2.10. (a) İkinci dereceden ve (b) birinci dereceden faz dönüştürümünün temsili gösterimi.....	10
Şekil 3.1. İki boyutta dokuz kabuktan oluşan altıgen örgünün şematik gösterimi	14
Şekil 4.1. Altıgen örgüye ait mıknatıslanma eğrisinin (m) sıcaklığa bağlı ($k_B T/J_0$) değişimi ve kuadrupol özelliği. $R = 6, D = -0.3, h = 0.0, J_0 = J_S = J_{CS} = J_C = 1$	17
Şekil 4.2. Homojen nanoparçacık için mıknatıslanma eğrisi ve kuadrupol özelliği $D=-0.4$ $h=0.0$	18
Şekil 4.3. Homojen nanoparçacık için mıknatıslanma eğrisi ve kuadrupol özelliği $D=-0.5$ $h=0.0$	18
Şekil 4.4. Homojen nanoparçacık için mıknatıslanma eğrisi ve kuadrupol özelliği $D=-0.6$ $h=0.0$	19
Şekil 4.5. Homojen nanoparçacık için mıknatıslanma eğrisi ve kuadrupol özelliği.....	20
Şekil 4.6. Homojen sistem için D değerlerinin ve kritik sıcaklığın (T_C) R 'ye göre farklı durum altındaki ($h=0.0, h=0.9$) manyetik alan ve kuadrupol değişimi.....	20
Şekil 4.7. Homojen altıgen nanoparçacık için mıknatıslanma değerinin (m) dış manyetik alan h göre değişimi.....	22
Şekil 4.8. Homojen altıgen nanoparçacık için kuadrupol değerinin (Q) kristal alana (D) göre değişimi	23
Şekil 4.9. Altıgen örgülü kompozit nanoparçacığa ait mıknatıslanma eğrisinin (m)	

sıcaklığa bağlı ($k_B T/J_0$) değişimi ve kuadrupol özelliği. $R = 6, D = -0.1,$ $h = 0.0, J_S \neq J_{CS} \neq J_C$	24
Şekil 4.10. Altıgen örgülü kompozit nanoparçacığa ait mıknatıslanma eğrisinin (m) sıcaklığa bağlı ($k_B T/J_0$) değişimi ve kuadrupol özelliği. $R = 6, D = -0.2, h=0.0$ $J_S \neq J_{CS} \neq J_C$	25
Şekil 4.11. Altıgen örgüye ait mıknatıslanma eğrisinin (m) sıcaklığa bağlı ($k_B T/J_0$) değişimi ve kuadrupol özelliği. $R = 6, D = -0.3, h = 0.0, J_S \neq J_{CS} \neq J_C$	25
Şekil 4.12. Altıgen örgülü kompozit nanoparçacığa ait mıknatıslanma eğrisinin (m) sıcaklığa bağlı ($k_B T/J_0$) değişimi ve kuadrupol özelliği. $R = 6, D = -0.4, h =$ $0.0, J_S \neq J_{CS} \neq J_C$	26
Şekil 4.13. Altıgen örgülü kompozit nanoparçacığa ait mıknatıslanma eğrisinin (m) sıcaklığa bağlı ($k_B T/J_0$) değişimi ve kuadrupol özelliği. $R = 6, D = -0.5, h =$ $0.0, J_S \neq J_{CS} \neq J_C$	26
Şekil 4.14. Kompozit sistem için D değerlerinin ve kritik sıcaklığın (T_C) R 'ye göre farklı durum altındaki ($h = 0.0, h = 0.9$) manyetik alan ve kuadrupol değişimi	27
Şekil 4.15. Kompozit altıgen nanoparçacık için mıknatıslanma değerinin (m) dış manyetik alana (h) göre değişimi	29
Şekil 4.16. Kompozit altıgen nanoparçacık için kuadrupol değerinin (Q) kristal alana (D) göre değişimi	30

SİMGE VE KISALTMALAR

Simgeler	Açıklama
D	Tek iyon anizotropisi
E	Etkileşme enerjisi
ε_{ij}	Bağ enerjisi
Φ	Serbest enerji
γ	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
σ_i	Yüzey spin değeri

T_c	Kritik sıcaklık
Z	Bölüşüm fonksiyonu

Kısaltmalar

Açıklama

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



BÖLÜM I

GİRİŞ

Nano, uzunluk ölçü birimi olarak metrenin milyarda biri büyüklüğüne karşılık gelir. Bu da yaklaşık olarak art arda dizilmiş 5 ila 10 ortalama bir atom büyüklüğüne tekabül eder. Teknoloji, bilimsel verilerin günlük hayata aktarma işlemine denirken, nanoteknoloji ise atomik ve moleküler boyutlardaki teknolojinin adıdır. Yarıiletken fiziği, malzeme bilimi, elektronik, kimya ve biyoloji gibi bilim dallarından araştırmacılar, nanoteknoloji ile ilgili çalışmalar yapmaktadır. Nanoparçacıkların büyüklüğü nanometre ölçütlerine göre azaltıldığında yeni ilginç özellikler sergiler ve bu özelliklerden en önemlisi kuantum boyut etkisidir. Nanoparçacıklar ve kuantum noktaları manyetik nanoyapıların önemli bir kısmını oluşturur (Aktaş vd., 2003; Aktaş vd., 2006; Kartopu ve Yalçın, 2010).

Nanoparçacık mikroskobik parçacıklarla kıyaslandığında kendine özgü yapısının değiştiği görülür. Çok ince (ultrathin) kaplamalarda ise önemi gittikçe artmaktadır. Ev eşyaları, otomobil, uçak, malzeme bilimi ve bilgisayar dalında olsun nanoparçacıklar yüzeylere, çizilmezlik ve parçalanmama özelliği ile korozyona karşı dayanıklılık ve büyük ölçüde kaydırma özelliği kazandırmaları bu özelliklerden bazılarıdır. Optik bilgisayarlarda yüksek yoğunluklu bilgilerin nakli, sert disk oluşturmak ve nano robotların montajı gibi çekirdek-yüzey tipi nanoparçacıkların teknolojilerdeki kullanımı son derece önemlidir. Bununla birlikte yeni nesil manyeto-elektronikte ince film cihazları, spin-transistörleri, spin bağımlı tünelleme cihazları ile nanoparçacıklar yakından ilgilidir (Babin vd., 2003). Moleküllerde elektrik akımı, mıknatıslık ve kimya ile manipüle edilebilecek durumlar ve bunların kendi kendilerine düzenli bir şekil almalarını önem arz eder. Nanoteknolojinin hedefi moleküllerin doğal düzeni ve insan elinin bu işe karışmamasıdır.

Nanoteknolojinin merkezinde olan nanoparçacıklara dair çok sayıda çalışmalara rastlamak mümkündür. Bu nedenle tez çerçevesince önemli görülen bazı çalışmalar vurgulandı. Elektrokimyasal depolama yöntemi ile üretilen çekirdek-kabuk nanoparçacıkların termodinamik denge durumları Oviedo vd. (2010) tarafından incelenmiştir. Kaneyoshi nanosistemleri Ising modeli ile tanımlayarak nanoparçacıkların mıknatıslanmasını, yüzey etkilerini, nano sistemlerin yüzey spin-camsı özelliklerini,

değiş-tokuş etkileşmeleri ve antiferromanyetik spin özelliklerini incelemiştir (Kaneyoshi, 2009; Kaneyoshi, 2012; Ortega vd., 2014; Kaneyoshi, 2015a; Kaneyoshi, 2015b; Kaneyoshi, 2015c; Kaneyoshi, 2015d;). Nano sistemlerin (nanoparçacık, Nanotel) faz diyagramları üzerine çalışmalar giderek artmaktadır (Boughazi vd., 2013; Kaneyoshi, 2015a; Lipowski vd., 2015; Genzor vd., 2016). Nano küp, nano tüp ve nanoparçacıkların manyetik, kinetik, termal ve anti mikrobiyal özellikleri üzerine çalışmalar bulunmaktadır. (Zaim vd., 2009; Khater ve Abou Ghantous, 2011; Magoussi vd., 2013; Deviren vd., 2013; Bouhou vd., 2015; El Hamri vd., 2015; Tareco vd., 2015; Bouhou vd., 2016). Özellikle son zamanlarda çekirdek-kabuk nanoparçacıklar başta olmak üzere karma spinlerden oluşan nano sistemlerin manyetik özellikleri sıkça çalışılmaktadır (Kantar ve Keskin 2013; Benhouria vd., 2014; Amiri-Aref vd., 2015; Deviren ve Şener, 2015; Vatansever ve Polat, 2015; Kantar ve Kocakaplan, 2015; Albayrak, 2015). Yüzey plazmonik rezonans tekniği ile nanoparçacıkların optik özelliklerinin araştırılması kuadropol açıdan önem arz etmektedir (Acapulco Jr vd., 2015; Moal vd., 2016; Zharov vd., 2016). Nanoparçacıkların elektronik, manyetik durulma ve ara yüzey etkileri de çalışılan konular arasındadır (Laguno-Marco vd., 2016; Psine vd., 2015; Camara vd., 2015). Nanoparçacıkların manyetik histerezislerinin yanında termal histerezislerinin çalışılması titizlikle yürütülmektedir (Linares vd., 2015; Dumitru vd., 2013; Erdem vd., 2015). Nanoparçacıkların süperparamanyetik, dielektrik ve spin-tork özellikleri incelemeler arasındadır. (Seraj vd., 2014; Benhouria vd., 2014; Van Mourik vd., 2016).

Genel olarak çekirdek-yüzey tipi nanoparçacık; yüzey (S), ara yüzey (CS) ve çekirdek (C) şeklinde üç bölgeden oluşur. Ara yüzeyde ferromanyetik veya antiferromanyetik spin-spin etkileşmesi görülürken çekirdekte ve yüzeyde de spinler kendi aralarında ferromanyetik ve antiferromanyetik olarak etkileşir. Bu etkileşmeler yüzey (S), ara yüzey (CS) ve çekirdek (C) gibi bölgelerden oluşan altıgen ve küresel yapıdaki nanoparçacık türlerine göre kübik nanoparçacıklarda yüzey atomları arası etkileşmeler ihmal edilebilir. Bu nedenle kübik nanoparçacıkların çalışılması ve elde edilmesi güç olup manyetik nano yapıların anlaşılmasında önemli bir yere sahiptir. (El-Sayed vd., 2010; Campbell vd., 2011; Özüm vd., 2015). 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).

1948 yılında tek domenli nanoparçacıklarda ilk çalışma Stoner-Wohlfarth tarafından yapıldı. 2016 yılında bunun kuantum karşılığı Hatomura ve arkadaşları tarafından gerçekleştirildi (Hatomura vd.,2016). Son yıllarda nanoparçacıkların manyetik yapısı ve histerezis özellikleri incelenirken Ising tarafından ferromanyetizma problemi için önerilen Ising modeli tercih edilen modeller arasındadır. Bu model spin durum sayısı ve düzen parametresine göre isimler alır. Yani $S=1/2$ iki spin durumu (yukarı-aşağı) tek düzen parametresi (mıknatıslanma) olarak karakterize edilen fiziksel sistem Ising sistemidir (Ising, 1925). Rego ve Figueiredo tarafından (Rego ve Figueiredo, 2001) nano parçacıklar için klasik spin modeli, tek domenli nanoparçacıkların iki boyutlu altıgen örgü yapısı en yakın komşu etkileşmeli $S=1/2$ Ising spinleri göz önünde bulundurularak tasarlandı. Blume-Emery-Griffiths (BEG) (Blume vd., 1971) modeli olarak ta bilinen bu model, spin-1 Ising sisteminde üç spin durumlu (yukarı, boşluk ve aşağı) ve iki düzen parametrelili (dipol-kuadrupol) bir sisteme karşılık gelir. Altıgen ve kare örgü için Yalçın ve arkadaşları tarafından kullanılan teorik formülasyon çekirdek-yüzey tipi nanoparçacıklar için martensitik ve östenitik fazlar detaylıca araştırılmıştır (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. Birçok farklı çalışmalar neticesinde $S=1$ için zengin bir denge faz özelliklerine sahip olduğu gözlemlendi. (Takahashi ve Tanaka, 1980; Benyoussef vd., 1987; Tuncer, 1989; Koza vd., 1990; Hoston ve Berker, 1991; Netz ve Berker, 1993; Keskin ve Arslan, 1995; Goveas ve Mukhopodhyay, 1997). Süperparamanyetik bir nanoparçacığın kristal alan (D) ve bilineer etkileşme (J) altında manyetik özellikleri ilk defa spin-1 modeli kullanılarak Kokorina ve Medmedev tarafından yapılmıştır (Kokorina ve Medmedev, 2007).

Çiftçi; (Çiftçi N, 2011) nanoparçacığın manyetik özelliklerini spin-1 modeli için kuadrupol-kuadrupol (K) ve dipol-kuadrupol (L) etkileşmelerini dikkate alarak inceledi. D sabiti manyetik nano-yapılardan sadece ferrimanyetik nanoparçacık Ising modelinin Monte Carlo benzetim çalışmasında ve iki boyutta Ising nanoparçacıkları ile spin-1/2 Ising nanotellerine etkin alan teorisinde dahil edilmiştir (Zaim ve Kerouad, 2010; Yüksel vd., 2011; Ghantous ve Khater, 2011; Şarlı ve Keskin, 2012). Çift yaklaşımı kullanılarak spin-1 modeli tek nanoparçacığa uygulanarak boyut etkisi araştırılmıştır (Yalçın vd., 2008). Ayrıca spin-1 Ising modeli kullanılarak altıgen örgülü nanoparçacığın manyetik özellikleri ise bilineer (J), biquatratik (K) ve kristal alan (D) etkileşimi altında

incelendi (Özüm S.,vd 2010). Bu sonuçlar Spin-1/2 sonuçları ile karşılaştırılmıştır (Yalçın vd., 2012).

Bu yüksek lisans tezinde bilineer (J) ve kristal alan (D) etkileşmeli homojen ve kompozit altıgen nanoparçacığın $S = 1$ modeli çift yaklaşım yöntemiyle incelenip, mıknatıslanma ve kuadrupol özellikleri detaylıca verildi. Mıknatıslanma ve kuadrupol özelliklerinin karşılaştırılması yapıldı. Bu giriş bilgilerinden sonra, ikinci bölümde Ising Modeli ve çift yaklaşım yöntemi hakkında bilgi verildi. Üçüncü bölümde, bilineer ve kristal alan etkileşmeli homojen ve kompozit altıgen nanoparçacığın $S = 1$ modeline ait mıknatıslanma denklemi türetildi. Yapılan hesaplamalar sonucu elde edilen bulgular ve fiziksel yorumları dördüncü bölümde tartışıldı.



BÖLÜM II

KURAMSAL BİLGİ

2.1 Manyetizma

Elektronun yörünge ve spin hareketlerinden dolayı dipol momentler oluşur. Elektronun bu yörüngesel ve spin hareketinden kaynaklanan manyetik dipol momentlerin vektörel toplamı manyetizmayı oluşturur. Bir enerji düzeyinde bulunan elektronlar yukarı ve aşağı yönlü olmak üzere iki farklı yönetime sahip olabilir (pauli dışarlama ilkesi). Bunun yanı sıra çekirdekten kaynaklanan dipol moment küçük olduğundan mıknatıslanmada göz önünde bulundurulmaz. Bir atomda oluşan manyetik dipol momentlerin yönü sıcaklığa, atomlar arası etkileşime ve dış manyetik alana bağlı olarak değişir. Maddenin manyetik alandaki etkileşim derecesine manyetik geçirgenlik denir. Manyetik geçirgenliği 1'den küçük maddelere diyamanyetik, 1'den biraz büyük maddelere paramanyetik, 1'den çok büyük olan maddelere ise ferromanyetik maddeler denir. Bir maddenin mıknatıslanması sistemdeki manyetik momentler ile doğrudan ilişkilidir.

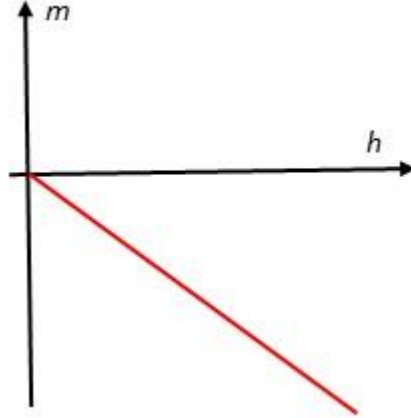
2.2 Manyetik Sistemlerin Sınıflandırılması

Mıknatıslanma özelliği maddeler için ayırt edici bir özellik olup maddelerin manyetik alana karşı duyarlılıklarını inceler. Aslında tüm maddelerin atomları dış manyetik alandan etkilenir ancak bazı maddelerde bu etkilenme sıfır olup net manyetik alan da sıfır olur. Maddeler manyetik açıdan ilk defa Michael Faraday tarafından Paramanyetik, Diyamanyetik ve Ferromanyetik olarak sınıflandırılmıştır. Günümüzde ise bunlara ilave olarak ferrimanyetik ve antiferromanyetik gibi sınıflandırılmalar da dâhil edilmiştir.

2.1.1 Diyamanyetik sistemler

Diyamanyetik sistemlerde elektronun dış manyetik alan altında dönme hızlarının artmasıyla alana ters yönde dipol momentleri oluşur. Böylece dış manyetik alan diyamanyetik maddeyi iter. Diyamanyetik sistemlerin kalıcı mıknatıslanması yoktur ancak dış manyetik alan uygulandığında alana ters bir mıknatıslanma özelliği gösterir.

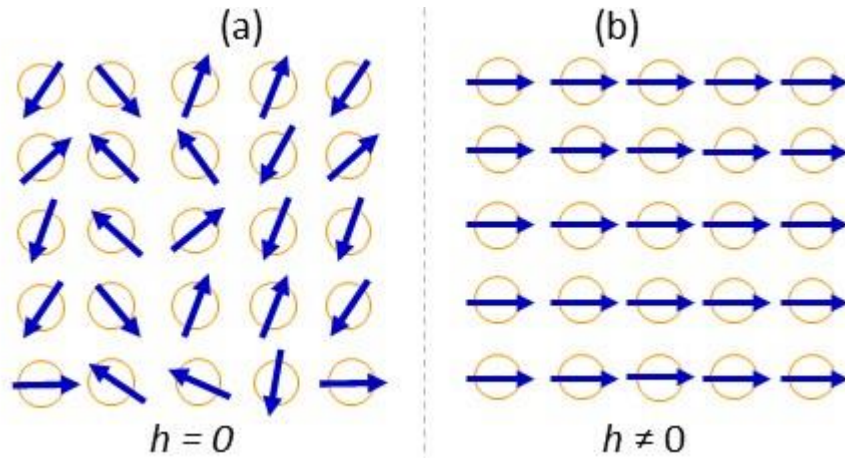
Diyamanyetik maddelere Bakır, Kurşun ve Bizmut'u örnek verilebilir. Böyle bir sistemin mıknatıslanmasının temsili gösterimi Şekil 2.1'de gösterilmiştir.



Şekil 2.1. Diyamanyetik bir sistemin temsili $m-h$ grafiği

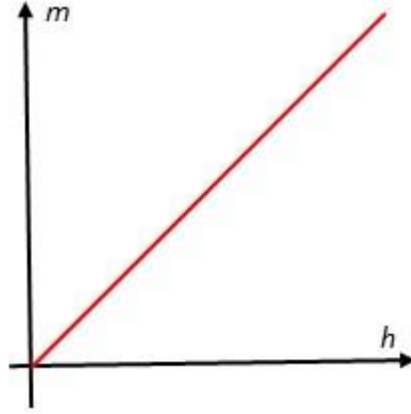
2.1.2 Paramanyetik sistemler

Çiftlenmemiş elektronları bulunan atomların her zaman bir manyetik momenti söz konusudur. Paramanyetik sistemlerin dış alan altındaki dipol momentleri dış manyetik alana paralel yönelirler. Manyetik alan kaldırıldığı zaman kalıcı mıknatıslanma oluşmaz. Böyle bir sistemin manyetik momentlerinin manyetik alan yok iken ve manyetik alan varlığında yönelimlerinin temsili gösterimi Şekil 2.2'de verilmiştir. Paramanyetik sistemler mıknatısa yaklaştırıldığında ondan çok az etkilenir, yani içine konduğu manyetik alanı biraz sıkılaştırmış olur. Ayrıca paramanyetik sistemlerin manyetik histerezis eğrilerinin temsili gösterimi Şekil 2.3'te gösterilmiştir.



Şekil 2.2. Paramanyetik bir sistemin temsili manyetik momentlerin (a) dış manyetik alan yokken (b) dış manyetik alan altında yönelimleri

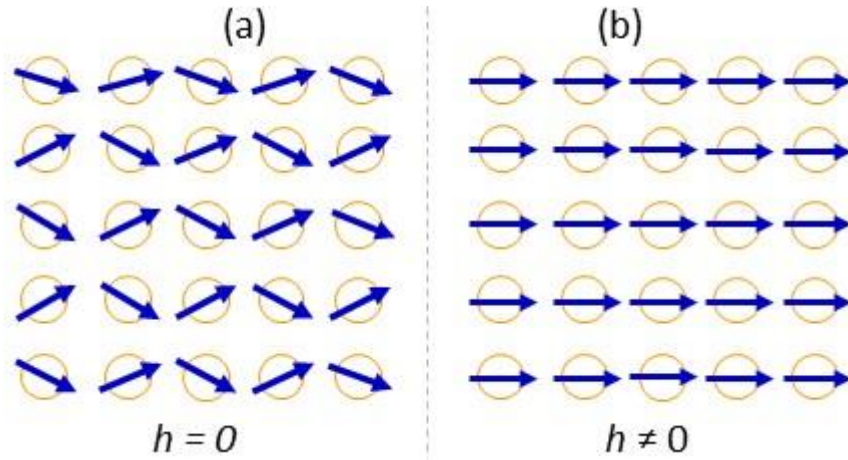
Paramanyetik sistemlere platin, hava, uranyum, manganez, alüminyum, sodyum ve oksijeni örnek verilebilir. Paramanyetik sistemlerin özellikleri ilk defa 1895 yılında Pierre Curie tarafından keşfedilmiştir.



Şekil 2.3. Paramanyetik bir sistemin temsili $m-h$ grafiği

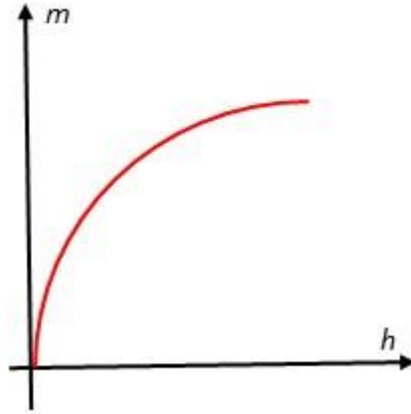
2.1.3 Ferromanyetik sistemler

Bazı sistemler dış manyetik alan olmadan da kalıcı mıknatıslanmaya sahip olabilirler. Bu tür sistemlere ferromanyetik madde denir. Böyle bir sistemin manyetik momentlerinin manyetik alan yok iken ve manyetik alan varlığında yönelimlerinin temsili gösterimi Şekil 2.4'te verilmiştir. Ferromanyetik sistemlerde kalıcı mıknatıslanma iç 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.



Şekil 2.4. Ferroramanyetik bir sistemin temsili manyetik momentlerin (a) dış manyetik alan yokken (b) dış manyetik alan altında yönelimleri

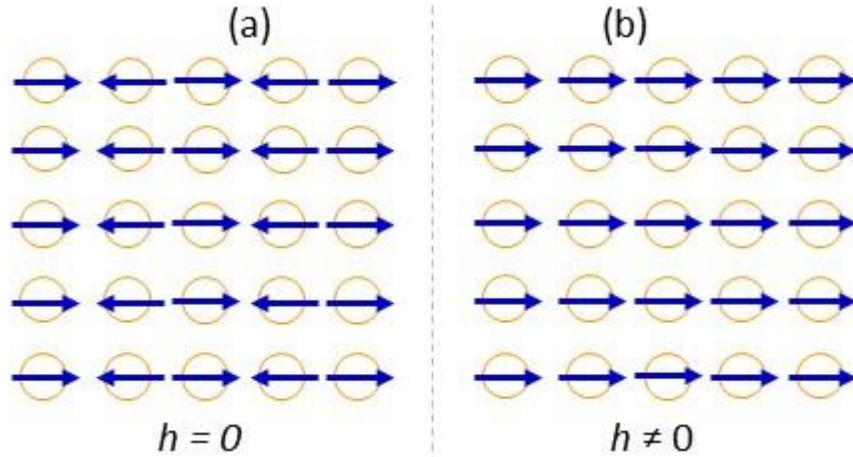
Ferromanyetik sistemlerin manyetik histerezis eğrilerinin temsili gösterimi Şekil 2.5'te görülebilir.



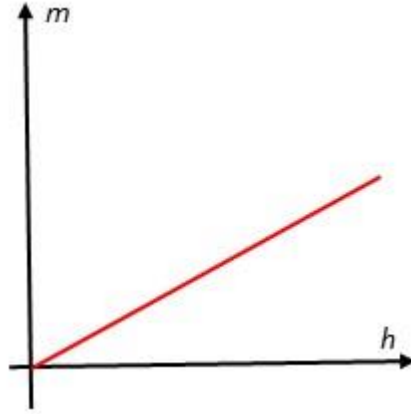
Şekil 2.5. Ferromanyetik bir sistemin temsili $m-h$ grafiği

2.1.4 Antiferromanyetik sistemler

Bir sistemi oluşturan atomlar bir türde (aynı büyüklükte) moment meydana getirmiş ve bunlar karşılıklı etkileşme ile zıt yönlerde düzenlenmişse birbirlerini yok ederler. Bu durum antiferromanyetizma olarak adlandırılır. Bu tür sistemlerin manyetik momentlerinin yönelimleri temsili olarak Şekil 2.6'da manyetik histerezis eğrileri ise Şekil 2.7'de verilmiştir. Antiferromanyetik sistemler tüm sıcaklıklarda düşük doyumluk değerleri verirler. Antiferromanyetik sistemlerde sıcaklıkla doyumluğun değişimi bir kritik sıcaklıkta (Néel sıcaklığı) maksimum değeri verir. Néel sıcaklığının altında antiferromanyetik davranış gösterirken, üstünde paramanyetik davranış gösterirler.



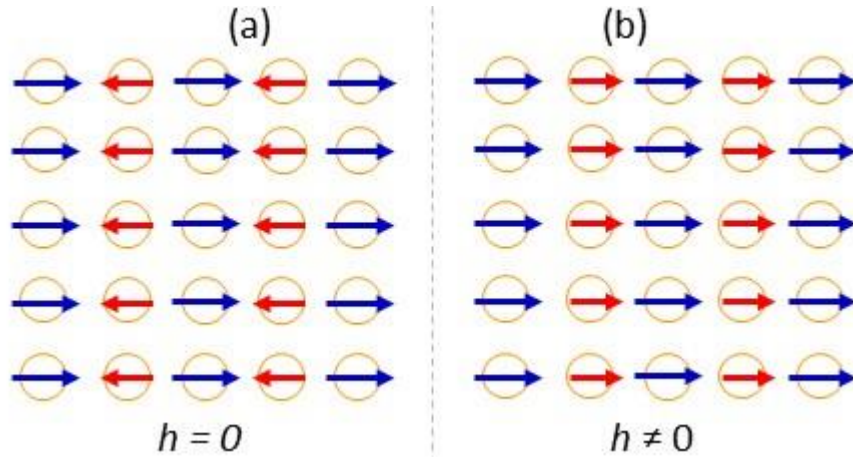
Şekil 2.6. Antiferromanyetik bir sistemin temsili manyetik momentlerin (a) dış manyetik alan yokken (b) dış manyetik alan altında yönelimleri



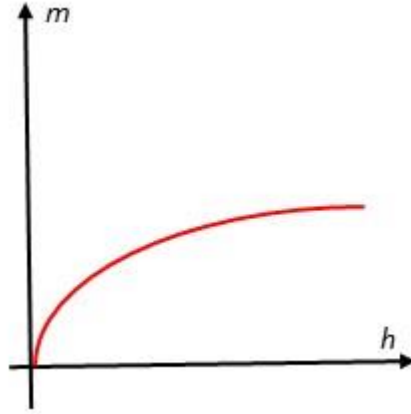
Şekil 2.7. Antiferromanyetik bir sistemin temsili $m-h$ grafiği

2.1.5 Ferrimanyetik sistemler

Ferrimanyetizma, sistemde paramanyetik atomlar tarafından iki veya daha fazla türde moment oluştuğunda gözlenebilen bir özelliktir. Farklı değerlerdeki momentlerin zıt yönlerde dizilişlerinden bu momentlerin farklarına eşit bir moment doğar ki, böylece ferrimanyetizma ortaya çıkar. Ferrimanyetik sistemler ferromanyetik sistemlere benzer şekilde oda sıcaklığında kendiliğinden manyetizasyonu olan endüstriyel açıdan daha fazla önemi olan manyetik malzemelerdir. Bu tür sistemlerin manyetik momentlerinin temsil yönelimleri Şekil 2.8’de, manyetik histerezis eğrilerinin temsili yönelimleri ise Şekil 2.9’da verilmiştir.



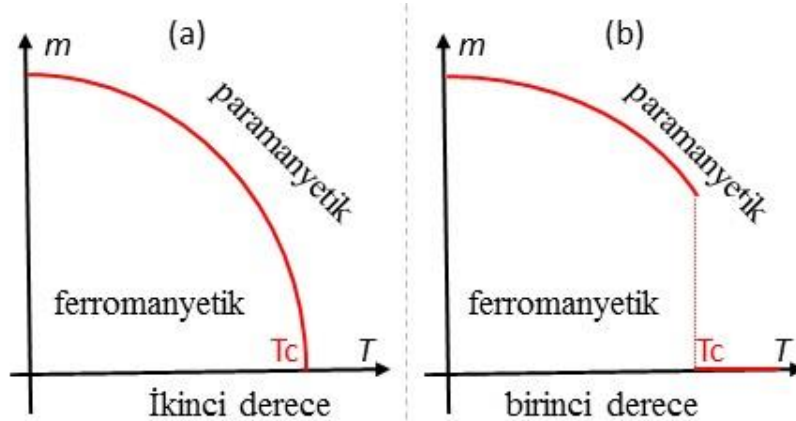
Şekil 2.8. Ferrimanyetik bir sistemin temsili manyetik momentlerin (a) dış manyetik alan yokken (b) dış manyetik alan altında yönelimleri



Şekil 2.9. Ferrimanyetik bir sistemin temsili $m-h$ grafiği

2.1.6 İkinci ve birinci derece faz geçişleri

Manyetik sistemlerde mıknatıslanmanın sıcaklıkla gelişimlerinde faz geçişleri gözlenebilir. Artan sıcaklıkla birlikte sistemin mıknatıslanması sürekli olarak değişim gösterip bir değerden sonra sıfırda kalıyorsa bu tür faz geçişlerine ikinci dereceden faz geçişleri denir. Böyle bir sistemin temsili gösterimi Şekil 2.10a'da verildi. Eğer sistemin mıknatıslanması artan sıcaklıkla birlikte azalarak devam ederken belli bir değerde bir anda atlama gösterip sıfıra düşüyor ise sistem birinci dereceden faz geçişi sergilediği söylenir. Böyle bir durum ise aşağıda Şekil 2.10b'de temsili olarak verildi. Şekillerde gösterilen T_c değerleri kritik sıcaklık değerlerini göstermektedir.



Şekil 2.10. (a) İkinci ve (b) birinci derece faz dönüşümünün temsili gösterimi

BÖLÜM III

MATERYAL VE YÖNTEM

3.1 Ising Modeli

Ising modeli, modern istatistik fiziğin manyetizmaya uygulanan çok sayıdaki teorilerinden birisidir. Bu çalışmada, tek bir kabuk-çekirdek sisteminden oluşan nanoparçacığın manyetizması üzerinde duruldu. Ising modeli en yakın komşu atomların sayısının (koordinasyon sayısı, γ) gerçek örgü noktalarına karşılık gelmesine dayanır. Yani her bir örgü noktasında manyetik atom bulunmaktadır. Her bir nanoparçacıkta toplam N kadar atom olduğunu düşünürsek, en yakın komşu etkileşim sayısı $N\gamma/2$ olur. En basit şekilde Ising modeli için genel klasik hamiltoniyen denklemi aşağıdaki gibidir.

$$H\{S_i\} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - h \sum_{\langle i \rangle} (S_i + S_j), \quad \text{Burada } S_i = \pm 1 \quad (3.1)$$

Burada h dış manyetik alanı, J ise komşu örgü noktaları arasındaki bilineer etkileşme sabitini göstermektedir. Bilineer etkileşme sabiti $J < 0$ olduğunda sistem ferromanyetik, $J > 0$ olma durumunda ise sistem antiferromanyetik özellik gösterir. Spin durum değişkenlerini $S_i = \pm 1$ dir. Buda X_i ile gösterilir. Buradaki X_i 'ler $\sum_{i=1}^2 X_i = 1$ normalizasyon şartına uyarlar. Modeldeki uzun-düzen parametreleri miknatislanma (M), $M = X_1 - X_2$ ve $Q = X_1 + X_2$ olarak tanımlanır. Buradaki tanım ve normalizasyon şartından nokta değişkenleri (3.2) formunda aşağıda gösterilmiştir.

$$X_1 = \frac{1}{2}(1 + M), \quad X_2 = \frac{1}{2}(1 - M) \quad (3.2)$$

3.2 Çift Yaklaşım Yöntemi

Spinler arası çiftlerin etkileşimi çift yaklaşımı (pair approximation) olarak düşünülür. Burada iki değişken tanımlanır. Nokta değişkeni olan (X_i) ve yeni bir değişken olan (Y_{ij}) dir. Bu değişkene en yakın komşu çifti denir. Burada (i,j) en yakın komşu örgü

noktaları olarak ifade edilip bağ değişkenleri olarak adlandırılır. Durum değişkenleri arasındaki $X_i = \sum_{j=1}^n Y_{ij}$ şartını sağlarken bağ değişkeni olan $\sum_{i,j=1}^n Y_{ij} = 1$ de normalizasyon şartını sağlar. Burada n ise verilen bir spin (S) modelindeki spin durumlarının sayısıdır. Etkileşme enerjisi (E) ve entropi (S_E), Y_{ij} terimi de kullanılarak aşağıdaki gibi yazılır.

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

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

Burada $\beta = 1/kT$ (k Boltzman sabiti ve T sıcaklıktır). (3.3) numaralı denklemdaki η_{ij} parametresi (3.1) denkleminde tanımlanan spin çiftleri için (i, j) bağ enerjileri olarak adlandırılır. Her bir durum için serbest enerji ifadesi Φ , (3.5) numaralı denklem ile elde edilir.

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

Denge durumundaki sistem için lineer olmayan denklem sistemi $\partial\Phi/\partial Y_{ij} = 0$ kullanılarak (3.6) numaralı denklem elde edilir.

$$Y_{ij} = \frac{1}{Z} (X_i X_j)^{\bar{\gamma}} e^{-\beta \eta_{ij}} \equiv \frac{e_{ij}}{Z} \quad (3.6)$$

Burada $\bar{\gamma} = (\gamma - 1)/\gamma$ ve Z bölüşüm fonksiyonu olup aşağıdaki gibi tanımlanır.

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

(3.7) numaralı denklemde λ , normalizasyon şartında kullanılan ek bir terimdir.

3.3 Hamiltoniye'nin Nanoparçacıklara Uyarlanması

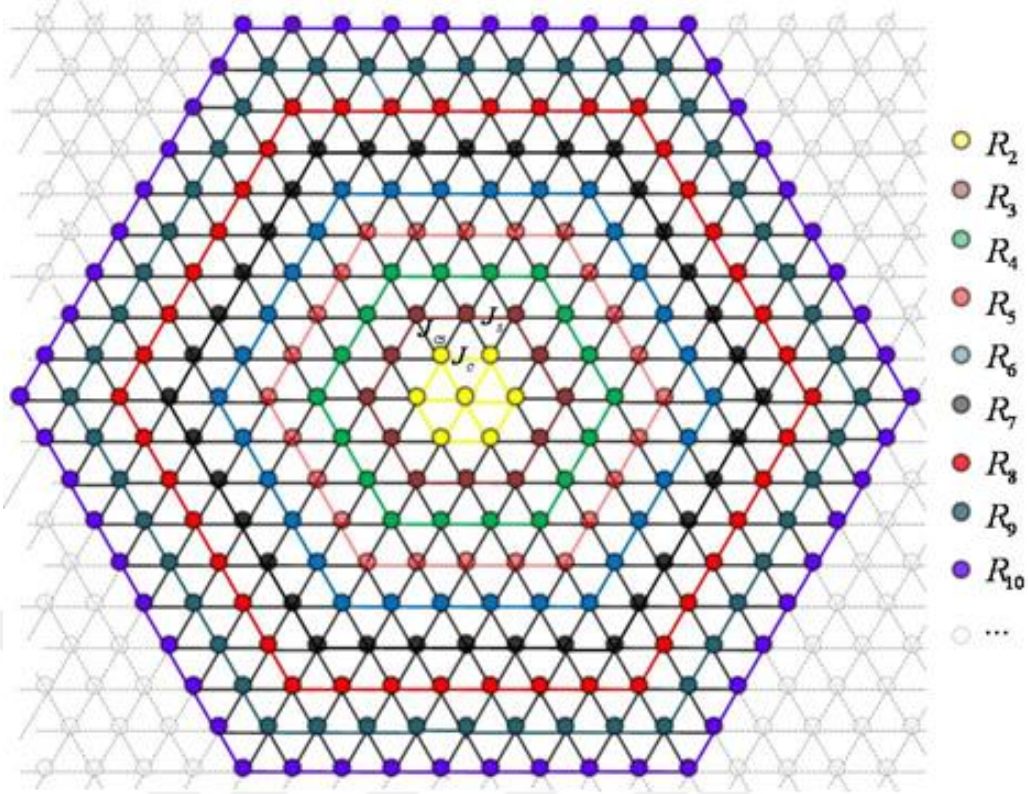
Bir sistemi Ising (Ising,1925) modeli ile tanımlarken spin durumları S_i ile temsil edilir. Spin değeri 1 olan sistem için üç farklı değer olur. Bunlar -1, 0 ve +1 dir. Bu değerler sırasıyla spin yöneliminin aşağı, örgü noktasının boş ve spin yönelimlerinin yukarı yönelimini gösterir. Spin yöneliminin aşağı olması dış manyetik alana zıt, spin yöneliminin yukarı olması ise dış alana paralel durumu gösterir. Spin durumunun i 'nci ($i = -,0,+$) olasılığı p_i ile gösterilir. Bunlara nokta değişkenleri denir ve normalizasyon şartını sağlarlar. Bu sistem spin 1 Ising modeli olarak bilinir. Bu şartlar altında bilinear, iyon anizotropi (tek kristal anizotropi) ve dış manyetik alan altında en basit şekliyle Hamiltoniye'nin aşağıdaki gibi yazılır.

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - D \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^2 + S_j^2) - h \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i + S_j) \quad (3.8)$$

Burada $\langle i,j \rangle$ en yakın komşu etkileşmeli spinlerin toplamını gösterir. J komşu spinler arası dipol-dipol (bilinear) etkileşme, D tek iyonun anizotropi sabiti ve h ise dış manyetik alanı göstermektedir. Sistem $J > 0$ durumunda antiferromanyetik, $J < 0$ ise ferromanyetik özellik sergiler. Bu parametrelerin birimleri $k_B T$ (k_B Boltzman sabiti ve T sıcaklıktır) enerji birimidir. Spinlerin bir tarafa yönelmesinin diğer tarafa yönelmesinden fazlalığı $m \equiv \langle S_i \rangle$ ile gösterilip uzun düzen parametresi ortalama mıknatıslanma olarak adlandırılır. İkinci bir uzun menzil düzen parametresi ise kuadrupol düzen olarak adlandırılır ve $Q \equiv \langle S_i^2 \rangle$ ile gösterilir. Durum değişkenlerine bağlı olarak mıknatıslanma ve kuadrupol sırasıyla $m = p_+ - p_-$ ve $Q = p_+ + p_-$ şeklinde de yazılabilir. Çekirdek-yüzey şeklinde tanımlanan nanoparçacık için Hamiltoniye'nin ifadesi çekirdek (C), çekirdek-yüzey (CS) ve yüzey (S) bölgeleri dikkate alınarak üç farklı Hamiltoniye'nin toplamı şeklinde yazılabilir. Bu durum aşağıdaki gibi gösterilebilir.

$$H = H_S + H_{CS} + H_C \quad (3.9)$$

Bu Hamiltoniye'nin ifade ettiği çekirdek-yüzey tipi bir nanoparçacığın kesitten temsili görünümü aşağıdaki şekil 3.1 de görülmektedir.



Şekil 3.1. İki boyutta dokuz kabuktan oluşan altıgen örgünün şematik gösterimi

Burada dokuz kabuktan oluşan altıgen örgülü nanoparçacığın temsili olarak kesit görünümünden yararlanarak her bir bölgeye ait Hamiltoniyen ifadesinin terim ve sembollerinin detaylıca yazılmasına zemin oluşturuldu. Bu iş için parçacıkta bulunan ve Hamiltoniyen’de yer alacak olan gösterimler detaylıca verildi.

İki boyutta kabukların sayısı ve nanoparçacığın büyüklüğü atom sayısı ile orantılıdır. Kabukların sayısı nanoparçacığın yarıçapını göstermektedir. Kabuk sayısı arttıkça parçacığın büyüklüğü de artmaktadır. Altıgen örgüden oluşan nanoparçacık yüzey, ara yüzey ve çekirdek olmak üzere üç bölgeden oluştuğu düşünüldüğü için her bir bölgeye ait spin sayısı yüzey için N_c , ara yüzey için N_{CS} ve çekirdek için N_s ile gösterildi. Nanoparçacığı oluşturan toplam spin sayısı ise $N = N_s + N_c$ ’dir. Bu şartlar altında denklem 3.9 ile verilen ifade nanoparçacığın her bir bölgesi için detaylı bir şekilde aşağıdaki gibi yazıldı.

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

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

$$H_C = -J_C \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - D_C \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^2 + S_j^2) - h \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i + S_j) \quad (3.10)$$

Burada bilineer ve kristal alan etkileşme sabitleri için yüzey, ara yüzey ve çekirdek etkileşmeler sırasıyla J_S , D_S , J_{CS} , D_{CS} , J_C , D_C 'dir. Homojen nanoparçacıklarda $J_S = J_{CS} = J_C = 1$ dir. Kompozit nanoparçacıklarda ise $J_S \neq J_{CS} \neq J_C$ dir.

Şekil 3.1.'de bir nanoparçacığın kesit ve atom yerleşimlerinin yüzey, arayüzey ve çekirdek bölümlerinin şematik gösterimi yer almaktadır. Ising nanoparçacığın $S = 1$ modelinin etkileşme enerjisini iki boyutta Y_{ij} terimi de katılarak aşağıdaki gibi yazıldı.

$$\beta E = \sum_{\langle i,j \rangle} (N_P^S \eta_{ij}^S + N_P^{CS} \eta_{ij}^{CS} + N_P^C \eta_{ij}^C) Y_{ij} \quad (3.11)$$

Burada yüzey, ara yüzey ve çekirdek için spin çiftlerinin sayısı, sırasıyla N_P^S , N_P^{CS} ve N_P^C ile gösterildi. Burada bağ değişkenleri 3.11 ifadesini kapsayacak şekilde aşağıdaki gibi genel olarak yazılabilir.

$$Y_{ij} = Z^{-1} (Y_i Y_j)^{(\gamma-1)/\gamma} \exp \left[-\beta (N_P^C \varepsilon_{ij}^C + N_P^{CS} \varepsilon_{ij}^{CS} + N_P^S \varepsilon_{ij}^S) \right] \equiv e_{ij} Z^{-1} \quad (3.12)$$

Bu denklemdeki parçacık ve çift sayıları aşağıda tablo halinde verildi.

Çizelge 3.1. Nanoparçacığın yarıçapına göre yüzey, ara yüzey ve çekirdeki toplam spin sayıları ve spin çifti sayıları (Yalçın vd.,2012)

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

Aynı sistemin bağ enerjileri ise aşağıda tablo halinde verildi.

Çizelge 3.2. Çekirdek-yüzey tipi altıgen nanoparçacıkların $S = 1$ Ising modeli için bağ enerjileri

Bağ Enerjileri	\mathcal{E}_{++}	$-J_S - 2D_S - 2h$	$-J_{CS}$	$-J_C - 2D_C - 2h$
	\mathcal{E}_{+0}	$-D_S - h$	0	$-D_C - h$
	\mathcal{E}_{+-}	$+J_S - 2D_S$	$+J_{CS}$	$+J_C - 2D_C$
	\mathcal{E}_{0+}	$-D_S - h$	0	$-D_C - h$
	\mathcal{E}_{00}	0	0	0
	\mathcal{E}_{0-}	$-D_S + h$	0	$-D_C + h$
	\mathcal{E}_{-+}	$+J_S - 2D_S$	$+J_{CS}$	$+J_C - 2D_C$
	\mathcal{E}_{-0}	$-D_S + h$	0	$-D_C + h$
	\mathcal{E}_{--}	$-J_S - 2D_S + 2h$	$-J_{CS}$	$-J_C - 2D_C + 2h$

BÖLÜM IV

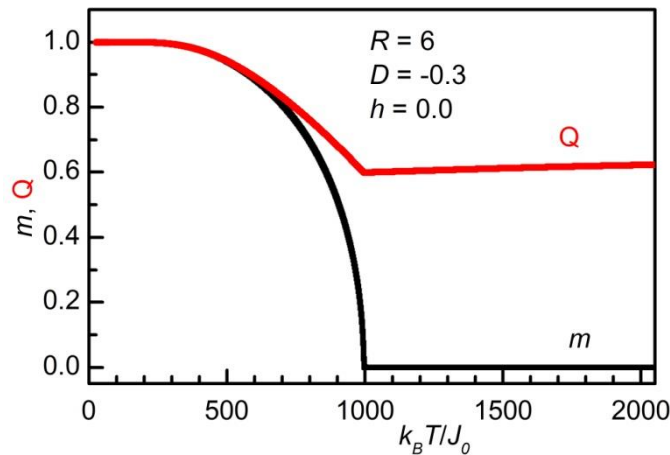
BULGULAR VE TARTIŞMA

4.1 Homojen Nanoparçacığın Manyetik özellikleri

4.1.1 Homojen nanoparçacığın mıknatıslanma ve kuadrupol düzen eğrileri

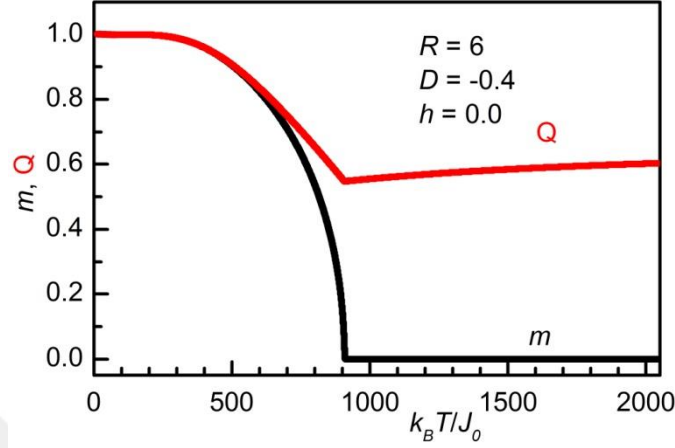
Şekil 4.1-Şekil 4.5’de altıgen örgü üzerinde tanımlanan farklı kabuk sayısına sahip tek domenli homojen nanoparçacığın farklı kristal alan değerleri için manyetik alanın sıfır olması durumundaki ($h = 0.0$) elde edilen mıknatıslanma eğrileri verildi. Yüzey, ara yüzey ve çekirdek bölgeleri için dipol-dipol etkileşme değerleri $J_0 = J_S = J_{CS} = J_C = 1$ şeklinde kullanıldı.

Bir sistemde mıknatıslanma, sıcaklığa bağlı olarak sürekli bir değişim gösteriyorsa bu sistem ikinci derece faz dönüşümü gösterir. Şekil 4.1 ‘de artan sıcaklıkla birlikte homojen nanoparçacığın mıknatıslanma değeri azalır ve ikinci derece faz dönüşümü geçirir. Burada faz dönüşüm sıcaklığı kristal alan sabitine (D) ve parçacık yarıçapına (R) bağlı olduğu görüldü. Kuadrupol özellik, mıknatıslanma eğrisinin (m) sıcaklığa bağlı ($k_B T/J_0$) değişimi ile benzer özellik göstermektedir. Şekilde görüleceği üzere kritik sıcaklık değerinden sonra manyetizasyon ve kuadrupol özelliklerin sırasıyla sıfır ve 0.666 değerinde sabit kaldığı görüldü.



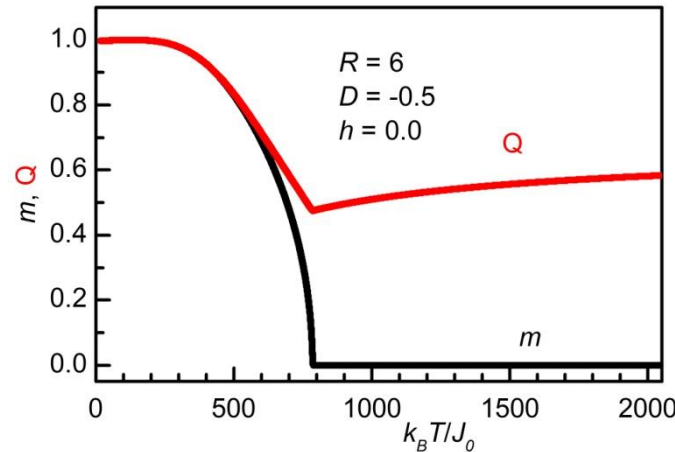
Şekil 4.1. Altıgen örgüye ait mıknatıslanma eğrisinin (m) sıcaklığa bağlı ($k_B T/J_0$) değişimi ve kuadrupol özelliği. $R = 6$, $D = -0.3$, $h = 0.0$, $J_0 = J_S = J_{CS} = J_C = 1$.

Şekil 4.2' de homojen nanoparçacığın kristal alan değeri ($D = -0.4$), $R = 6$ yarıçap değerleri için manyetik alan yokluğunda ($h=0.0$) elde edilen mıknatıslanma eğrisi verildi. Buradaki davranış genel görünüm olarak şekil 4.1 benzemekle birlikte kritik sıcaklık değerinin daha düşük olduğu tespit edildi.



Şekil 4.2. Homojen nanoparçacık için mıknatıslanma eğrisi ve kuadrupol özelliği. $D = -0.4, h = 0.0$

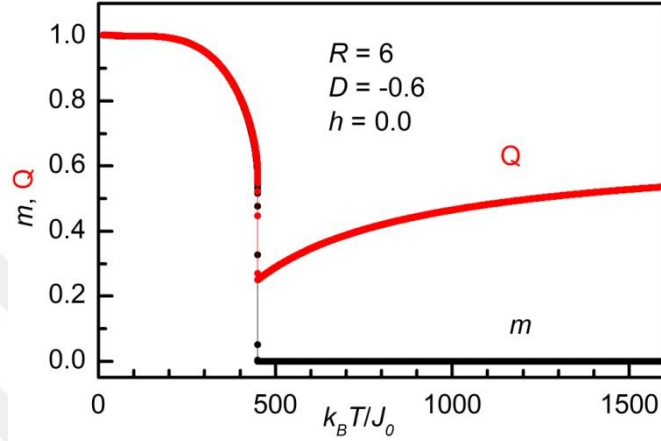
Kristal alan değeri $D = -0.5$ ve $R = 6$ değerleri için homojen nanoparçacığın mıknatıslanma ve kuadrupol eğrileri şekil 4.3'de verildi. Artan sıcaklıkla birlikte ikinci derece faz geçiş sıcaklığı daha küçük değerde gözlemlendi. Kritik sıcaklık değerinden sonra kuadrupol özellik 0.5 den itibaren artarak 0.666 değerine ulaştığında sabit kaldığı gözlemlendi.



Şekil 4.3. Homojen nanoparçacık için mıknatıslanma eğrisi ve kuadrupol özelliği. $D = -0.5, h = 0.0$

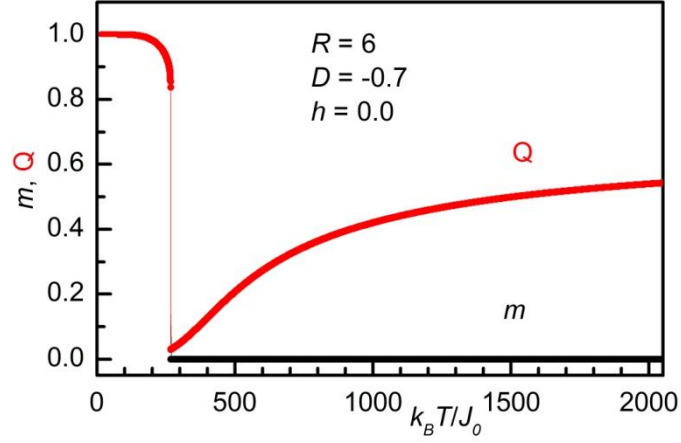
Şekil 4.4 'de altıgen örgüye sahip homojen nanoparçacığın dış manyetik alan $h=0.0$ ve kristal alan $D = -0.6$ değerlerinin mıknatıslanmanın sıcaklığa göre gelişimi ve kuadrupol

özelliđi görölmektedir. Artan sıcaklıkla birlikte mıknatıslanma ve kuadrupol eğrilerinin belli bir değerde birden atlama gösterdiđi belirlendi. Bu durum birinci dereceden faz geçişı olarak adlandırılmaktadır. Bu nedenle $D=-0.6$ değesinde ilk defa sistem birinci derece faz geçişı gösterdiđi bulundu. Bundan sonra azalan kristal alan değeri ile birlikte sistemin birinci dereceden faz geçişı yapmaya devam edeceđi ve kritik sıcaklıđın daha düşük değerde gerçekleşeceđi öngörüsüne ulaşıldı.



Şekil 4.4. Homojen nanoparçacık için mıknatıslanma eğrisi ve kuadrupol özelliđi.
 $D = -0.6, h = 0.0$

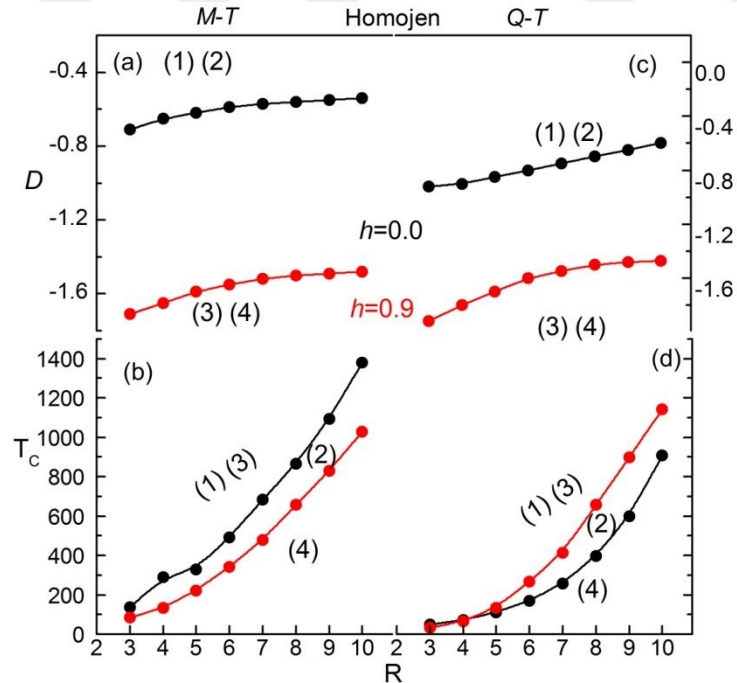
Şekil 4.5 'de altıgen örgüye sahip homojen nanoparçacığın dış manyetik alan $h=0.0$ ve kristal alan $D = -0.7$ değeri için sıcaklığa göre gelişimi ve kuadrupol özelliđi verildi. Sıcaklık artarken hem mıknatıslanma hemde kuadrupol özelliđinin birinci derece faz geçişı gerçekleştirdiđi bulundu. Burada kritik sıcaklık değeri hem daha küçük sıcaklıkta gerçekleştiđi hemde kuadrupol özelliđinde mıknatıslanmada olduđu gibi sıfır değerde olayın cereyan ettiđi belirlendi. Bundan sonra artan sıcaklıkla birlikte yumuşak bir deđişimle kuadrupol özellik sıfırdan itibaren artarak 0.666 değeriye ulaşıtıđı ve bu değerden sonra ise sabit kaldıđı gözlemlendi.



Şekil 4.5. Homojen nanoparçacık için mıknatıslanma eğrisi ve kuadrupol özelliği.
 $D = -0.7, h = 0.0$.

4.1.2 Homojen nanoparçacığın D ve T_C değerlerinin R 'ye göre gelişimi

Homojen nanoparçacık için M - T ve Q - T eğrilerinden elde edilen kritik D ve T_C değerlerinin parçacık büyüklüğüne göre gelişimi şekil 4.6'da verildi. Görüldüğü üzere D ve T_C 'nin dört farklı ana bölgeye ayrıldığı belirlendi. Bu bölgeler sistemin hangi sıcaklık değerlerinde, hangi büyüklükte de ne tür bir faz geçişi göstereceğinin diyagramını vermektedir.



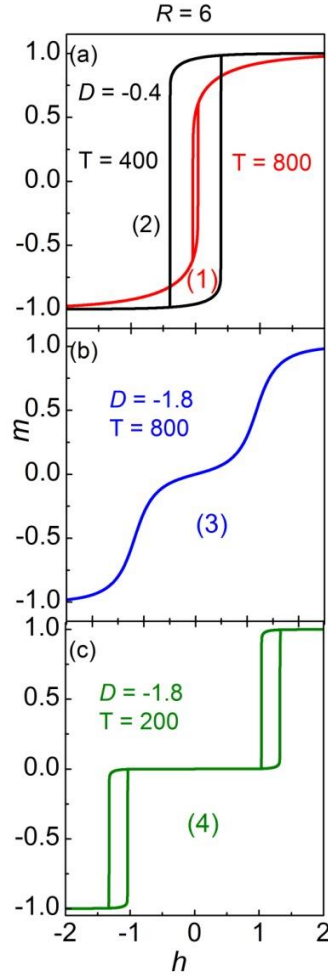
Şekil 4.6. Homojen sistem için D değerlerinin ve kritik sıcaklığın (T_C) R 'ye göre farklı durumları altındaki ($h = 0.0, h = 0.9$) manyetik alan ve kuadrupol değişimi

Şekil 4.6 'de siyah renkle gösterilen eğriler altıgen örgülü homojen nanoparçacığın $h=0.0$ altında D ve T_C değerlerinin R 'ye göre değişimini, kırmızı renkle gösterilen eğriler ise $h=0.9$ altında D ve T_C değerlerinin R 'ye göre değişimini göstermektedir. R değerleri arttıkça M-T'den elde edilen D ve T_C 'lerin üstel bir artış göstermektedir. Benzer bir durum Q-T'den elde edilen sonuçlar içinde geçerlidir. Sadece D değerlerinde farklı manyetik alan altında değişimin benzerliği bozma eğiliminde olduğu tespit edilmiştir. Sistem $h=0.0$ 'da birinci bölgelerde en büyük D ve T_C değerine sahip iken ikinci bölgede büyük D değeri olmasına rağmen T_C değeri $h=0.0$ ile $h=0.9$ arasında olduğu gözlenmiştir. Üçüncü bölgede $h=0.0$ ve $h=0.9$ düşük D değerleri için yüksek T_C değerleri olduğu görülürken dördüncü bölgede ise hem D hem de T_C en küçük değerleri aldığı gözlemlendi.

4.1.3 Homojen nanoparçacığın manyetik ve kuadrupol histerezis eğrileri

Şekil 4.7 altıgen örgü üzerinde tanımlanan $R=6$ için tek domenli homojen nanoparçacığın değişik sıcaklık ve kristal alan değerlerindeki manyetik histerezis eğrilerini, Şekil 4.8 ise aynı nanoparçacığın kuadrupol histerezis eğrilerini göstermektedir. Her iki şekil içinde yüzey, arayüzey ve çekirdek dipol-dipol etkileşme değerleri $J_0 = J_S = J_{CS} = J_C = 1$ şeklinde seçildi.

Şekil 4.7 (a)'da kristal alan değeri -0.4 ve sıcaklığı 800 durumunda birinci bölgede zayıf paramanyetik davranış sergilediği, sıcaklık değeri azaltıldığında ($T=400$) ikinci bölgede ise ferromanyetik davranış sergilediği gözlemlendi. Şekil 4.7 (b)'de iki farklı paramanyetik davranış görülmektedir. Dördüncü bölgede ($D=-1.8$, $T=200$) ise nanoparçacık iki farklı bölgede ferromanyetik davranış sergilemektedir.



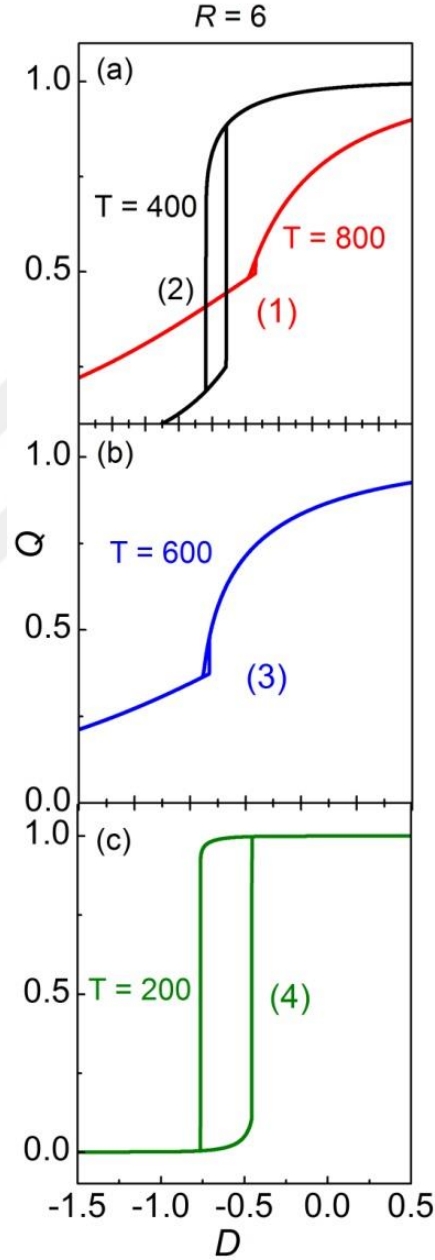
Şekil 4.7. Homojen altıgen nanoparçacık için mıknatıslanma değerinin (m) dış manyetik alana (h) göre değişimi

Şekil 4.8 (a)'da altıgen örgülü homojen bir nanoparçacığın yüksek sıcaklık ($T=800$) değerlerinde birinci bölgede paramanyetik davranış sergilediği, sıcaklık değeri azaltıldığında ($T=400$) ikinci bölgede ise ferromanyetik davranış sergilediği gözlemlendi. Burada Kuadrupol histerezis eğrileri kristal alana göre negatif bölgede doğrusal bir davranış göstermesi manyetik histerezis eğrisinde gözlenmeyen bir davranış olduğu bulundu.

Şekil 4.8 (b)'de kristal alana göre negatif bölgedeki doğrusal hareket devam ederken sistemin özelliği manyetik histerezis eğrisiyle benzerlik göstermektedir. Diğer bir ifadeyle sistemin ferromanyetik bir davranış sergilediği sonucuna ulaşılmıştır. Ayrıca kuadrupol histerezislerinin kristal alana göre dar bölgede gerçekleşmesi manyetik histerezis eğrilerinden ayrılan bir özellik olarak tespit edilmiştir.

Şekil 4.8 (c)'de ise M-H eğrisinden çok farklı olarak tek bir ferromanyetik histerezis eğrisi gözlenmekle birlikte eğrinin negatif kristal alana doğru kaydığı tespit edilmiştir.

Q-D histerezis eğrilerinin M-H eğrilerinden farklılıklar gösterdiği bütün histerezislerde gözlenmiştir. Bunun nedeninin manyetik alan ile kristal alanın farklı oluşu ve kuadrupol özelliğinden kaynaklandığı sonucuna ulaşılmıştır.



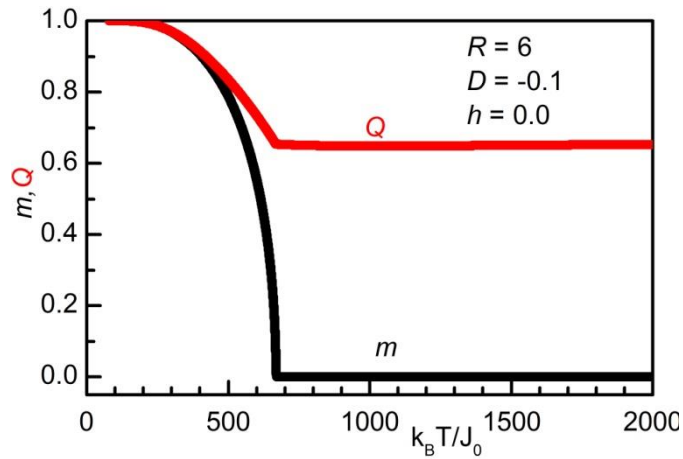
Şekil 4.8. Homojen altıgen nanoparçacık için kuadrupol değerinin (Q) kristal alana alana (D) göre değişimi

4.2 Kompozit Nanoparçacığın Manyetik Özellikleri

4.2.1 Kompozit nanoparçacığın mıknatıslanma ve kuadrupol düzen eğrileri

Şekil 4.9-Şekil 4.12’de altıgen örgü üzerinde tanımlanan kompozit nanoparçacığın değişik kristal alan değerleri için manyetik alan yokluğunda ($h = 0.0$) elde edilen mıknatıslanma eğrileri verildi. Yüzey, ara yüzey ve çekirdek dipol-dipol etkileşme değerleri $J_S \neq J_{CS} \neq J_C$ şeklinde seçildi.

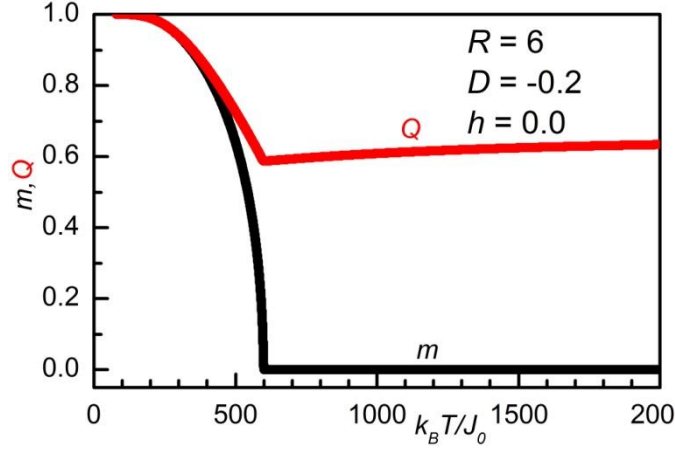
Şekil 4.9 ‘de artan sıcaklıkla birlikte kompozit nanoparçacığın manyetizasyon ve kuadrupol değerleri azalarak ikinci derece faz dönüşümü geçirmiştir. Faz geçişinin gözlemlendiği yerde mıknatıslanma sıfır, kuadrupol özellik ise 0.666 değerinde olduğu bulunmuştur. Kompozit nanoparçacıklar için genel olarak mıknatıslanma ve kuadrupol davranışın homojen nanoparçacığın davranışına benzediği görülmüştür. Tek fark kompozit nanoparçacıklarda kritik sıcaklığın homojene göre daha düşük olduğu gözlemlenmiştir. Ayrıca faz dönüşüm sıcaklığının kristal alan sabitine (D) ve parçacık yarıçapına (R) bağlı olduğu düşünüldüğünde, artan parçacık büyüklüğüyle birlikte kritik sıcaklık değerinin arttığı da tespit edilmiştir.



Şekil 4.9. Altıgen örgülü kompozit nanoparçacığa ait mıknatıslanma eğrisinin (m) sıcaklığa bağlı ($k_B T / J_0$) değişimi ve kuadrupol özelliği. $R = 6$, $D = -0.1$, $h = 0.0$,

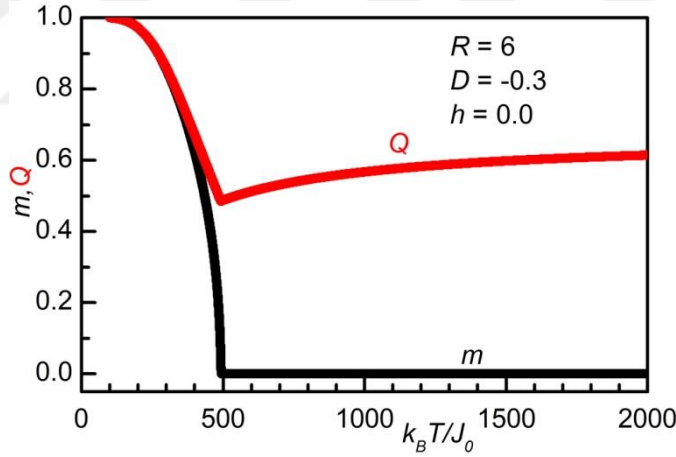
$$J_S \neq J_{CS} \neq J_C$$

Şekil 4.10’da aynı büyüklükteki nanoparçacık için daha düşük kristal alan değerindeki ($D = -0.2$) mıknatıslanma ve kuadrupol özellikler homojen nanoparçacığın sonuçlarıyla uyumlu olup kritik sıcaklığın daha düşük olduğu gözlemlendi.



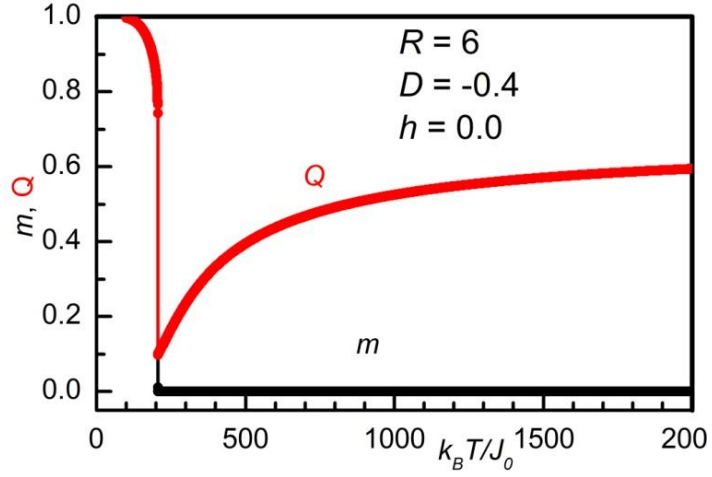
Şekil 4.10. Altıgen örgülü kompozit nanoparçacığa ait mıknatıslanma eğrisinin (m) sıcaklığa bağlı ($k_B T / J_0$) değişimi ve kuadrupol özelliği. $R = 6$, $D = -0.2$, $h = 0.0$, $J_S \neq J_{CS} \neq J_C$

$D = -0.3$ için şekil 4.10 daki diğer değerler için kompozit nanoparçacığın mıknatıslanma ve kuadrupol özelliklerin sıcaklıkla değişimi şekil 4.11 de verildi. Burada kritik sıcaklığın homojen nanoparçacığın kritik sıcaklık değerinden başka farklılık olmadığı sonucuna ulaşıldı.



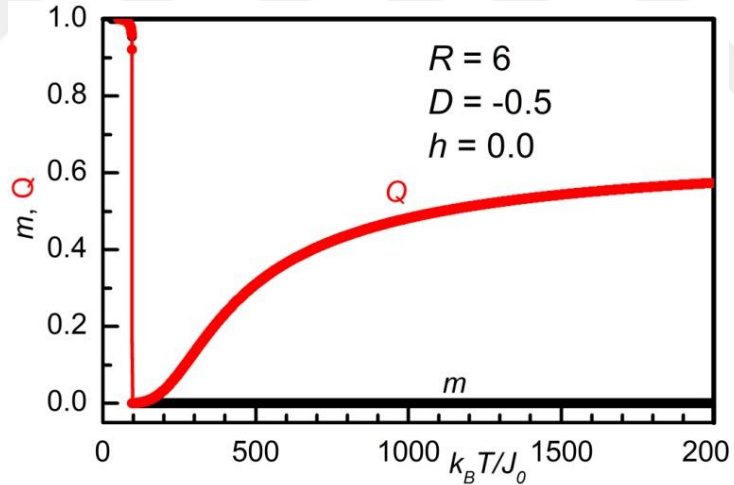
Şekil 4.11. Altıgen örgüye ait mıknatıslanma eğrisinin (m) sıcaklığa bağlı ($k_B T / J_0$) değişimi ve kuadrupol özelliği. $R = 6$, $D = -0.3$, $h = 0.0$, $J_S \neq J_{CS} \neq J_C$

$D = -0.4$ de kompozit nanoparçacığın manyetik ve kuadrupol özelliklerinin sıcaklıkla gelişiminde birinci derece faz geçişi gözlenmiş olup bu durum şekil 4.12 de detaylıca verildi. Diğer sabitlerde göz önüne alındığında homojen nanoparçacığın kritik sıcaklığından daha düşük bir değerde faz geçişi gösterdiği bulundu.



Şekil 4.12. Altıgen örgülü kompozit nanoparçacığa ait mıknatıslanma eğrisinin (m) sıcaklığa bağlı ($k_B T / J_0$) değişimi ve kuadrupol özelliği. $R = 6$, $D = -0.4$, $h = 0.0$,
 $J_S \neq J_{CS} \neq J_C$

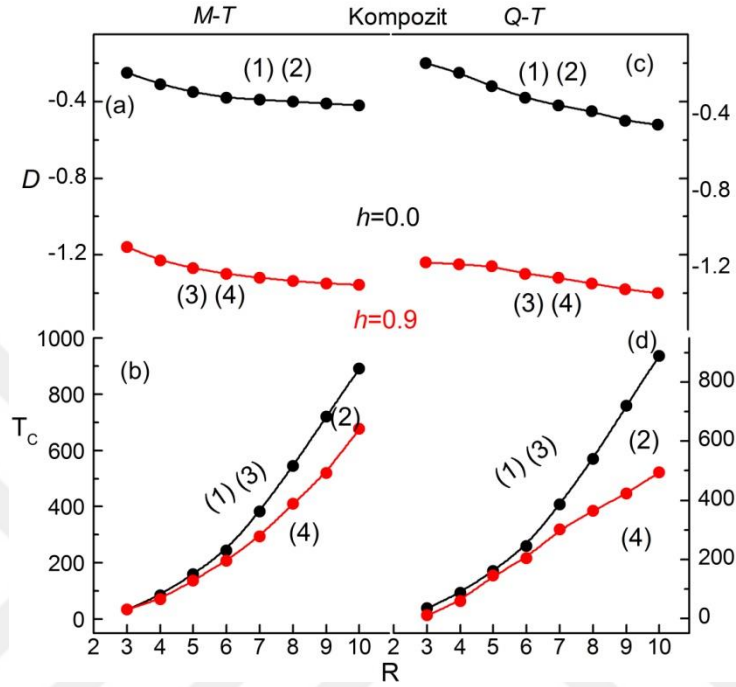
Şekil 4.13 'de de homojen nanoparçacığın mıknatıslanma ve kuadrupol özellikleri aynı şartlar altında homojen nanoparçacığın özellikleriyle uyumlu olup kritik sıcaklık değerinin düşük olması haricinde bir farklılık tespit edilmemiştir



Şekil 4.13. Altıgen örgülü kompozit nanoparçacığa ait mıknatıslanma eğrisinin (m) sıcaklığa bağlı ($k_B T / J_0$) değişimi ve kuadrupol özelliği. $R = 6$, $D = -0.5$, $h = 0.0$,
 $J_S \neq J_{CS} \neq J_C$

4.2.2 Kompozit nanoparçacığın D ve T_c değerlerinin R 'ye göre gelişimi

Kompozit nanoparçacığın $M-T$, ve $Q-T$ eğrilerindeki kritik sıcaklık değerlerinden elde edilen D ve T_c değerlerinin artan R değerlerine göre değişimi şekil 4.14'de verildi.



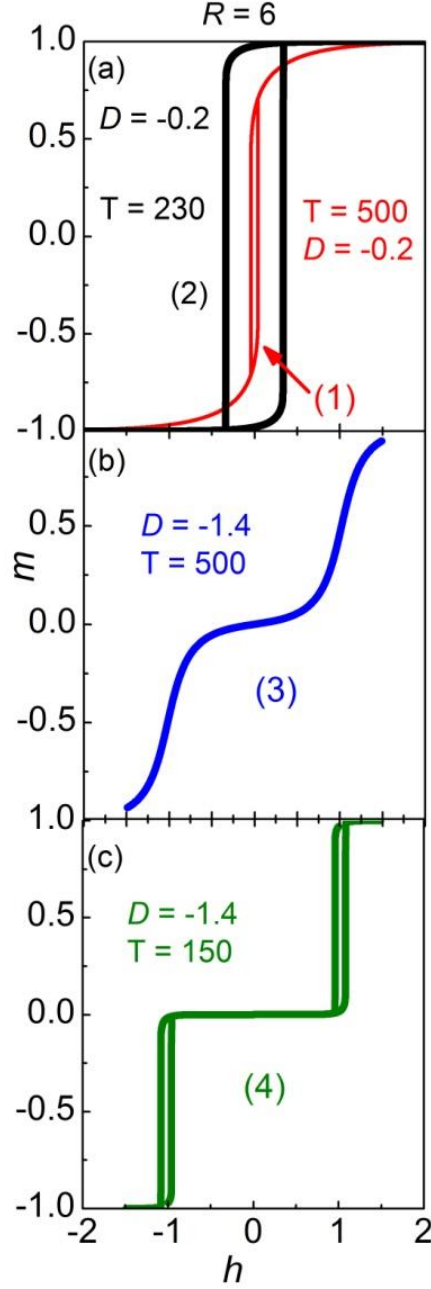
Şekil 4.14. Kompozit sistem için D değerlerinin ve kritik sıcaklığın (T_c) R 'ye göre farklı durumları altındaki ($h=0.0, h=0.9$) manyetik alan ve kuadrupol değişimi

Şekil 4.14 görüldüğü üzere D ve T_c değerlerinin artan nanoparçacığın büyüklüğüne bağlı olarak sırasıyla üstel azalma ve logaritmik bir artma şeklinde olduğu bulundu. D 'nin parçacık büyüklüğüne bağlı bu davranışı homojen nanoparçacığın davranışından farklılık göstermektedir. Bu farklılık doğrudan sistemin net mıknatıslanmasıyla ilgilidir. Buna ilave olarak yüzey etkisinin daha baskın hale geldiği söylenebilir. Dolayısıyla nano boyutlara inildikçe yüzey ve kuantum etkilerin daha aktif olmaya başladığı söylenebilir. Dikkatlice bakıldığında, kompozit nano parçacığın kritik sıcaklık değerlerinin homojen nano parçacığa göre daha düşük değerlerde olduğu görülmektedir. Burada da, homojen nanoparçacıklar için elde edilen bu grafikten dört farklı bölge tespit edilmiştir.

4.2.3 Kompozit nanoparçacığın manyetik ve kuadrupol histerezis eğrileri

Şekil 4.15’de altıgen örgü üzerinde tanımlanan R=6’de kompozit nanoparçacığın farklı kristal alan ve sıcaklıklar için manyetik eğrileri verildi. Yüzey, ara yüzey ve çekirdek dipol-dipol etkileşme değerleri $J_s \neq J_{cs} \neq J_c$ şeklinde seçildi.

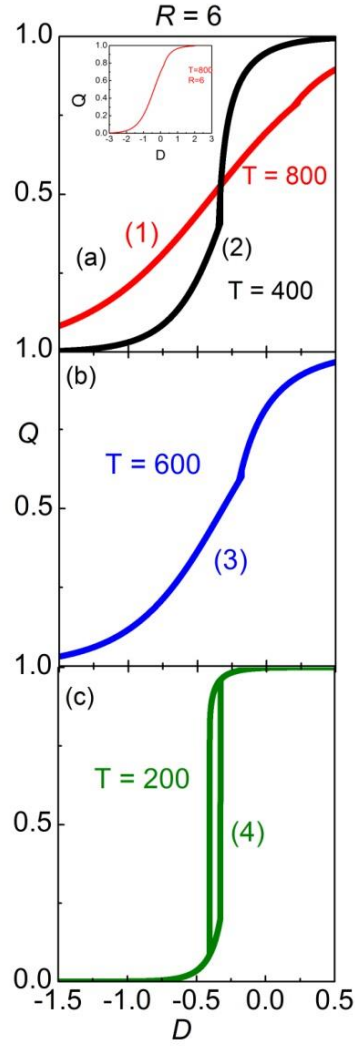
Şekil 4.15’de farklı sıcaklık ve kristal alan değerlerinde histerezis eğrileri elde edildi. Şekil 4.15 (a)’da altıgen örgülü kompozit bir nanoparçacığın yüksek kristal alan ($D=-0.2$) ve yüksek sıcaklık ($T=500$) değerlerinde birinci bölgede paramanyetik davranış sergilediği, sıcaklık değeri azaltıldığında ($T=230$) ikinci bölgede ise ferromanyetik davranış sergilediği gözlemlendi. Şekil 4.15 (b)’de sıcaklığın yüksek değerinde ($T=500$) kristal alan değeri ($D=-1.4$) azaltıldığında üçüncü bölgede nanoparçacığın iki farklı domende paramanyetik davranışı görülürken dördüncü bölgede ($D=-1.4$, $T=150$) ise nanoparçacık yine iki farklı domen oluşturmakla birlikte azalan sıcaklık değerinde ferromanyetik davranış sergilediği belirlendi.



Şekil 4.15. Kompozit altıgen nanoparçacık için mıknatıslanma değerinin (m) dış manyetik alana (h) göre değişimi

Şekil 4.16'da farklı sıcaklık ve kristal alan değerlerinde aynı kompozit nanoparçacığın histerezis eğrileri elde edildi. Şekil 4.16 (a)'da yüksek sıcaklık ($T=800$) değerlerinde birinci bölgede paramanyetik davranış sergilediği yani kalıcı mıknatıslanma oluşturmadığı, sıcaklık değeri azaltıldığı ($T=400$) ikinci bölgede ise ferromanyetik davranış sergilediğinden kalıcı mıknatıslanma oluşturduğu gözlemlendi. Şekil 4.16 (b)'de sıcaklığın yüksek değerindeki ($T=600$) üçüncü bölgede nanoparçacığın iki farklı domende paramanyetik davranışı görüldü. Dördüncü bölgede ise nanoparçacık yine iki

farklı domen oluşturmakta fakat sıcaklık değeri ($T=200$) azaltıldığı için ferromanyetik davranış sergilemektedir.



Şekil 4.16. Kompozit altıgen nanoparçacık için kuadrupol değerinin (Q) kristal alana alana (D) göre değişimi

BÖLÜM V

SONUÇ

Bu tezde, manyetik alan altında bilineer (J) ve kristal alan (D) etkileşmeli altıgen örgüden oluşan homojen ve kompozit nanoparçacıkların manyetik ve kuadrupol özellikleri incelendi. Bu inceleme spin-1 modeli kullanılarak çift yaklaşım yöntemiyle yapıldı.

Bu model iki boyutta tasarlanarak araştırmalar homojen ve kompozit nanoparçacıklar için yapıp veriler üç-boyutta yorumlandı. Bu altıgen örgülü homojen ve kompozit nanoparçacık sistemleri tek yüzey olan ve farklı kabuklardan oluşacak şekilde farklı büyüklüklerde araştırıldı. Özellikle bu tezde bilineer ve kristal alan etkileşmeli homojen ve kompozit nanoparçacıkların kuadrupol özellikleri detaylıca incelendi.

Homojen nanoparçacıkların artan sıcaklıkla birlikte gösterdikleri Curie sıcaklığında ikinci dereceden faz dönüşümünü kompozit nanoparçacıklara göre daha yüksek sıcaklıklarda gözlemlendi. Bu durumun doğrudan net mıknatıslanma ile ilgili olduğu sonucuna ulaşıldı. Azalan kristal alan (D) değeri ile birlikte homojen ve kompozit nanoparçacıkların birinci dereceden faz geçişi gerçekleştirdiği belirlendi. Birinci dereceden faz geçişini ilk gözlemlendiği kristal alan değeri homojen nanoparçacık için -0.6 ve kompozit nanoparçacık için -0.4 olarak tespit edildi.

Birinci dereceden faz geçişlerinde tespit edilen kritik sıcaklık değerlerinin yine homojen nanoparçacıklarda kompozit nanoparçacıklara göre daha büyük olduğu bulundu. Hem homojen hemde kompozit nanoparçacıklarda kuadrupol özellikler birinci dereceden faz geçişinin olduğu kritik sıcaklıklarda en düşük değere ulaştığı gözlemlendi. Kuadrupol özelliklerin sıcaklıkla gelişimindeki kritik sıcaklık değerinin nanoparçacıkların büyüklüklerindeki karşılıklarından yararlanarak D ve T_C 'nin R 'ye göre değişimi elde edildi.

Kritik sıcaklık değerleri artan nanoparçacık büyüklüğüyle birlikte hem homojen hemde kompozit nanoparçacıklar için artarken D 'nin homojen nanoparçacıklar için R ile arttığı kompozit nanoparçacıklar için ise azaldığı bulundu.

Hem nomojen hemde kompozit nanoparçacıkların histerezis eğrilerinde azalan sıcaklıkla birlikte önce tekli paramanyetik histerezis, sonra tekli ferromanyetik histerezis ardından ikili paramanyetik histerezis ve son olarak ikili ferromanyetik histerezis gözlemlendi. Buradaki her bir tür histerezislerin gözlemlendiği sıcaklık değerlerinin homojen nanoparçacıklarda daha büyük olduğu tespit edildi.

Kuadrupol (Q)- D histerezis eğrilerinin $m-h$ 'da gözlenen durumlara karşılık gelen eğrileri burada hem homojen hemde kompozit için aynı sıcaklıkta gözlemlendi. Q - D histerezislerinin simetrik olmadığı ve kristal alana göre çok dar bölgede gerçekleştiği bulundu. Ayrıca Q - D histerezis eğrileri D - eksenine göre de simetrik olmayan bölgelerde gözlemlendi. Bu durumun kristal alanla doğrudan ilişkili olduğu sonucuna ulaşıldı.



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.

Albayrak, E., “ Core-shell structured square mixed-spin 1 and $\frac{1}{2}$ Ising nanowire on the bethe lattice”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 401, 532-538, 2016.

Amiri-Aref, M., Raouf, J.B., Kiekens F. and Wael K., “Mixed hemi/ad micelles coated magnetic nanoparticles for the entrapment of hemoglobin at the surface of a screen-printed carbon electrode and its direct electrochemistry and electrocatalysis”, *Biosensors and Bioelectronics* 74, 518-525, 2015.

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.

Boughazi, B., “Phase diagrams and magnetic properties of a ferrimagnetic cylindrical core/shell spin-1 Ising nanowire”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 354, 173-177, 2014.

Bouhou, S., Essaoudi, I., Ainane, A. and Ahuja, R., “Investigation of a core/shell Ising nanoparticle: Thermal and magnetic properties”, *Physica B* 481, 124-132, 2016.

Bouhou, S., El Hamri, M., Essaoudi, I., Ainane, A. and Ahuja, R., “Magnetic properties of a single transverse Ising ferrimagnetic nanoparticle”, *Physica B* 456, 142-150, 2015.

Benhouria, Y., Essaoudi, I., Ainane, A., Ahuja A. and Dujardin, F., “The dielectric properties and the hysteresis loops of the spin-1 Ising nanowire system with the effect of a negative core/shell coupling: A monte carlo study”, *Superlattices and Microstructures* 73, 121-135, 2014a.

Benhouria, Y., Essaoudi, I., Ainane, A., Ahuja A. and Dujardin, F., “Thermodynamic properties and hysteresis behaviors of a mixed spin 3/2 and spin 1/2 Ising double walled ferrielectric nanotubes: A Monte carlo study”, *Superlattices and Microstructures* 75, 761-774, 2014b.

Camara, C.L., Monzon, L.M.A, Coey, J.M.D. and Yudi, L.M., “Assembly of magnetic nanoparticles at a liquid/ liquid interface. Catalytic effect on ion transfer process”, *Journal of Electroanalytical Chemistry* 756, 77-83, 2015.

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.

Çiftçi, N., Tek Domenli Bir Nanoparçacığın Dipol–Kuadrupol Etkileşmesi Altında Manyetik Özelliklerin İncelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, *Gaziosmanpaşa Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Tokat, s.30-35, 2011.

Deviren, B., Şener. Y. and Keskin, M., “Dynamic magnetic properties of the cylindrical Ising nanotube”, *Physica A* 392,3969-3983,2013.

Deviren, B. and Şener, Y., “Magnetic properties of mixed spin (1,1/3) Ising nanoparticles with core-shell structure”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 386, 12-19, 2015.

Dumitru, Loan., Astefanoaei, L. and Stancu, A., “Thermal stres dependence of magnetic hysteretic processes in core-shell nanoparticles”, *Materials Science and Engineering B* 178, 1323-1328, 2013.

Demir, Z., Kristal Alan Varlığında Nanoparçacığın Manyetik Özelliklerinin Büyüklüğe Bağlı Olarak İncelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, *Niğde Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü* Niğde, 2013.

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.

El Hamri, M., Bouhou S., Essaoudi, I., Ainane A. and Ahuja R., “Investigation of the surface shell effects on the magnetic properties of a trransverse antiferromagnetic Ising nanocube”, *Superlattices and Microstructures* 80, 151-168, 2015.

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.

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.

Genzor, J., Gendiar, A. and Nishino, T., “ Phase transitions in İsing model on a fractal lattice”, *Physical Review E* 93, 012141, 2016.

Ghantaus, M. A. and Khater, A., “Manyetic Properties of 2D Nono-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.

Hatomura, T., Barbara, B. and Miyashita S., “ Quantum Stoner-Wohlfarth Model ”, *Physical Review Letters* 116, 037203, 2016.

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.

Jesus, A.I., Acapulco Jr., Hong, S., Kyu Kim S. and Park, S., “Controlling optical properties of metallic multi-shell nanoparticles through suppressed surface plasmon resonance”, *Journal of Colloid and Interface Science* 461, 376-182, 2016.

Kaneyoshi, T., “Magnetizations of a nanoparticle described by the transverse Ising model”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 321, 3430-3435, 2009.

Kaneyoshi, T., “The effects of surface dilution on magnetic properties in a transverse Ising nanowire”, *Physica A* 391, 3616-3628, 2012.

Kaneyoshi, T., “Transverse Ising nano-systems: Unconventional surface effects ”, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 81, 66-73, 2015a.

Kaneyoshi, T., “Unigue magnetic properties of an Ising nanowire with a spin glass like disorder at tha surface”, *Physica B* 462, 34-39, 2015b.

Kaneyoshi, T., “Cylindrical ising nanowire and nanotube with a negative Exchange interaction at tha surface: Remarkable surface effects”, *Physica E* 71, 84-90, 2015c.

Kaneyoshi, T., “A quadrangular transverse Ising nanowirw with an antiferromagnetic spin configuration”, *Physica E* 74, 531-537, 2015d.

Kaneyoshi, T., “Ferrimagnetism in a transverse Ising antiferromagnet ”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 406, 83-88, 2016.

Kantar, E. and Keskin, M., “Thermal and magnetic properties of ternary mixed Ising nanoparticles with core-shell structure:Effective-field theory approach”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 349,165-172, 2014.

Kantar, E. and Kocakaplan, Y., “Hexagonal type Ising nanowire with mixed spins: Some dynamic behaviors”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 393, 574-583, 2015.

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

Khater, A. and Abou Ghantous, M., “Magnetic properties of 2D nano-islands I: Ising spin model ”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 323,2717-2726, 2011.

Kaur, J., Kotnala, R. K. and Verma, K. C., “Multiferroic properties of Ba (FexTi1-x) O₃ nanorods”, *Mater. Lett.* 65, 3160–3163, 2011.

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.

Koza, Z., Jasiukiewicz, C. and Pekalski, A., “Transfer Matrix Methods in the Blume-Emery-Griffiths Model”, *Physica A* 164, 191-206, 1990.

Kokorina, E. E. and Medvedev, M. V., “Magnetization Curves of Nanoparticle with Single-Ion Uniaxial Anisotropy”, *J. Magn. Magn. Mater.* 310, 2364–2366, 2007.

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

Laguna-Marco M.A., Sanchez-marcos J., Menendez N., Chaboy J., Salas-Colera E. and Prieto C., “Microstructural, electronic and magnetic characterization of Fe-based nanoparticles embedded in Al matrix”, *Materials and Design* 93, 388-396, 2016.

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 δ -TaN nanoparticles at low temperatures”, *Nanoscale Res. Lett.* 8, 126 (1–9), 2013.

Linares, J., Jureschi, C.M., Boulmaail, A. and Boukheddaden, K., “Matrix and size effects on the appearance of the thermal hysteresis in 2D spin crossover nanoparticles”, *Physica B* 486, 164-168, 2015.

Lipowski, A., Ferreira L.A., Lipowska, D. and Gontarek, K., “Phase transitions in Ising models on directed networks”, *Physical Review E* 92, 05811, 2015.

Lopez-Ortega A., Estrader M., Salazar-Alvarez G., Roca A. and Nagues J., “Applications of Exchange coupled bi-magnetic hard/soft and soft/hard magnetic core/shell nanoparticles”, *Physics Reports* 553 ,1-32, 2015.

Magoussi, H., Zaim, A. and Kerrouad, M., “Theoretical investigations of the phase diagrams and the magnetic properties of a random field spin-1 nanotube with core/shell morphology”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 344, 109-115, 2013.

Moal, E., Marguet, S., Cannesson, D., Rogez, B., Boer-duchemin, E., Dujardin, G., Teperik, T., Marinnica, D. and Borisov, A., “Engineering the emission of light from a scanning tunneling microscope using the plasmonic modes of a nanoparticles”, *Physical Review B* 93, 035418, 2016.

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.

Oviedo, O.A., Mariscal, M.M. and Leiva, E.P.M., “Theoretical studies of preparation of core-shell nanoparticles by electrochemical metal deposition”, *Electrochimica Acta* 55, 8244-8251, 2010.

Özüm, S., Kristal Alan ve Kuadratik Etkileşmeli Nanoparçacığın Spin-1 Modelinin Çift Yaklaşım Yötemi ile İncelenmesi. Yüksek Lisans Tezi, Fizik ABD, Bozok Üniversitesi, Yozgat, s. 29-31, 2010.

Özüm, S., Yalçın, O., Erdem, R., Bayrakdar, H. and Eker, H.N., “Martensitic and austenitic transformations in core-surface cubic nanoparticles” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 373, 217-221, 2015.

Pisane, K.L., Despeaux, E.C. and Seehra, M.S., “Magnetic relaxation and correlating effective magnetic moment with particle size distribution in maghemite nanoparticles”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 384, 148-154, 2015.

Rego, L. G. C. and Figueiredo, W., “Magnetic Properties of Nanoparticles in the Bethe-Peierls Aproximation”, *Phys. Rev. B* 64, 144424–1–7, 2001.

Sejar S., Mirzayi B. and Nematollahzadeh A., “Superparamagnetic maghemite/polyrhodanine core/shell nanoparticles: synthesis and characterization”, *Advanced Powder Technology* 25, 1520-1526, 2014.

Salavatti-Niasari, M., Esmaeili-Zare, M. and Sobhani, A., “Cubic Hg Senano particles: sonochemical synthesis and characterization”, *Micro Nano Lett.* 7, 1300–1304, 2012.

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.

Taresco, V., Francolini, L., Padella, F., Mariangela, B., Boni, A., Innocenti, C., Martinelli, A., D’Ilario L. and Piozzi, A., “Desing and characterization of antimicrobial usnic acid loaded-core/shell magnetic nanoparticles”, *Materials Science and Engineering C* 52, 72-81, 2015.

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

Van Mourik, R.A., Phung, T., Parkin, S.S.P. and Koopmans, B., “ In-line spin-torque nano-oscillators in perpendicularly magnetized nanowies ”, *Physical Review B* 93, 014435, 2016.

Vatansever, E. and Polat, H., “Nonequilibrium Dynamics of a mixed spin-1/2 and spin-3/2 Ising ferrimagnetic system with a time dependent oscillating magnetic field source”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 392, 42-49, 2015.

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 Y₂O₃ Nanoparticles”, *Adv. Condens. Matter. Phys.* 2013, 1–6, 2013.

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

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

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.

Yung, T. Y., Lee, J. Y. and Liu, L. K., “Nanocomposite formethanol 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. 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.

Zaim, A., Kerouad M. and El Amraoui, Y., “Magnetic properties of a ferrimagnetic core/shell nanocube Ising model: Amonte carlo simulation study ”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 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.

Zharov, Jr, A.A., Zharov A.A, Shadrivov I. and Zharova N., “Granig plasmonic nanoparticles with light”, *Physical Review A* 93, 013814, 2016.

ÖZ GEÇMİŞ

Ayşe Şahin 16.05.1986 tarihinde Erzurum'da doğdu. İlk, orta ve lise öğrenimini Erzurum'da tamamladı. 2003 yılında girdiği Atatürk Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik bölümünde çift anadal yaparak 2007 yılında Fizik bölümünden 2009 yılında Matematik bölümünden mezun oldu. Erzurum'da çeşitli dershanelerde görev yapmış olup 2012 yılında evlenerek Niğde'ye yerleşmiştir.

2013 yılında Niğde Üniversitesi Fizik Anabilim Dalı'nda yüksek lisans öğrenimine başladı. Halen yüksek lisans öğrenimine devam etmektedir.

TEZ ÇALIŞMASINDAN ÜRETİLEN ESERLER

Bu tez çalışmasından, 1 (bir) adet uluslararası bildiri üretildi.

Erdem R., Yalçın O. , Şahin A. , Demirer N., "Hysteretic Behaviour of Quadrupolar Ordering in the Magnetic Nanoparticles", 4th International Congress on Nanoscience and Nanotechnology, Kuala Lumpur, MALEZYA, 28-29 Ocak 2016, pp.47-47



