

Prof. Dr. Mustafa KESKİN danışmanlığında Numan ŞARLI tarafından hazırlanan “Silindirik Nanotellerin Magnetik Özelliklerinin Spin-1 ve Karma Spin-(1/2, 1) Ising Sistemleri Kullanılarak Etkin Alan Teorisiyle İncelenmesi” adlı bu çalışma jürimiz tarafından Erciyes Üniversitesi Fen Bilimler Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında Doktora tezi olarak kabul edilmiştir.

04.12.2012

JÜRİ:

Başkan : Prof. Dr. Ayhan GÜLDESTE

Üye : Prof. Dr. Erhan ALBAYRAK

Üye : Prof. Dr. Mustafa KESKİN

Üye : Doç. Dr. Mustafa BÖYÜKATA

Üye : Doç. Dr. Mehmet ARI

[Handwritten signatures of the jury members]

ONAY:

Bu tezin kabulü, Enstitü Yönetim Kurulunun 18.12.2012 tarih ve 2012/59-08 sayılı kararı ile onaylanmıştır.

18.12.2012



Prof. Dr. Necmettin MARAŞLI

Enstitü Müdürü

T.C.
ERCIYES ÜNİVERSİTESİ
BİLİMSEL ARAŞTIRMA PROJELERİ
KOORDİNASYON BİRİMİ



**SİLİNDİRİK NANOTELLERİN MANYETİK ÖZELLİKLERİNİN
SPİN-1 VE KARMA SPİN (1/2, 1) İŞİNG SİSTEMLERİ KULLANILARAK
ETKİN ALAN TEORİSİYLE İNCELENMESİ**

Proje No: FBD-10-3350

Doktora Tez Projesi

SONUÇ RAPORU

Proje Yürütücüsü:

Prof. Dr. Mustafa KESKİN
Fen Fakültesi / Fizik Bölümü

Araştırmacı

Numan ŞARLI
Fen Bilimleri Enstitüsü / Fizik Bölümü

Ocak 2013

KAYSERİ

ÖNSÖZ / TEŞEKKÜR

Doktora ders aşamasında, özellikle sayın Prof. Dr. Sedat ÖZSOY, asalet timsali sayın Doç. Dr. Fevziye YAŞUK ve sayın Dr. Mehmet ERTAŞ'a maddi ve manevi desteklerinden dolayı en derin duygularla teşekkür ederim.

Doktora tez aşamasında, tez çalışmamda bilgisayar programının yazılımında ve nanotel sistemimizin teorik olarak incelenmesinde gerekli olan denklemlerin elde edilmesinde katkılarından dolayı Recep Tayyip Erdoğan Üniversitesi öğretim elemanı sayın Arş. Gr. Mehmet BATI'ya, tez çalışmamda teorik sonuçların değerlendirilmesinde öneri ve katkılarından dolayı sayın Prof. Dr. Erhan ALBAYRAK, Prof. Dr. Ayhan GÜLDESTE, Doktora Öğr. Yasin POLAT ve danışman sayın Prof. Dr. Mustafa KESKİN'e, bu tez çalışmasına maddi destek veren Erciyes Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Birimi'ne (Proje No: FBD-10-3350) ve doktora eğitimim süresince bana maddi destek veren Kredi ve Yurtlar Kurumu'na en derin duygularla teşekkür ederim.

Doktora tez çalışmamın başarılı bir şekilde sonuçlandırılmasında öneri ve katkılarından dolayı Fizik Bölüm Başkanı sayın Prof. Dr. Mehmet AKKURT, Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü sayın Prof. Dr. Necmettin MARAŞLI, bütün Fen Bilimleri Enstitüsü Personeli ve Bozok Üniversitesi Öğr. üyesi sayın Doç.Dr. Mustafa BÖYÜKATA'ya en derin duygularla teşekkür ederim.

Ayrıca; Sağlık Kültür ve Spor Daire Başkanlığı'na ve Sosyal Hizmetler Şube Müdürü Nimet SUSAM'a maddi ve manevi desteklerinden dolayı en derin duygularla teşekkür ederim.

Numan ŞARLI

Kasım 2012, Kayseri

İÇİNDEKİLER

SİLİNDİRİK NANOTELLERİN MAGNETİK ÖZELLİKLERİNİN SPİN-1 VE KARMA SPİN-(1/2, 1) ISING SİSTEMLERİ KULLANILARAK ETKİN ALAN TEORİSİYLE İNCELENMESİ

	<u>Sayfa</u>
BİLİMSEL ETİĞE UYGUNLUK SAYFASI	i
YÖNERGEYE UYGUNLUK SAYFASI	ii
KABUL ve ONAY SAYFASI	iii
ÖNSÖZ/TEŞEKKÜR	iv
ÖZET	v
ABSTRACT	vi
İÇİNDEKİLER	vii
ŞEKİLLER LİSTESİ	x
 GİRİŞ	 1

1. BÖLÜM

MODEL ve FORMÜLASYON

1.1. Model	5
1.1.1. Spin-1/2 Ising Modeli	6
1.1.2. Boyuna Spin-1 Blume Capel Modeli	6
1.1.3. Enine Spin-1 Blume Capel Modeli	6
1.1.4. Boyuna Karma Spin-(1/2, 1) Ising Modeli	6
1.2. Formülasyon	7
1.2.1. Etkin Alan Teorisi	7
1.2.2. Silindirik Öz/Yelek Spin-1/2 Ising Nanoteli	15
1.2.3. Boyuna Silindirik Öz/Yelek Spin-1 Ising Nanoteli	17
1.2.4. Enine Silindirik Öz/Yelek Spin-1 Ising Nanoteli	18

1.2.5. Boyuna Karma Silindirik Öz/Yelek Spin-(1/2, 1) Ising Nanoteli.....	18
1.2.6. Silindirik Öz/Yelek Ising Nanotelinin Magnetik Özellikleri.....	20
1.2.6.1. Alınganlık.....	20
1.2.6.2. Öz Isı.....	20
1.2.6.3. İç Enerji.....	21

2. BÖLÜM

NÜMERİK BULGULAR

2.1. Silindirik Öz/Yelek Spin-1/2 Ising Nanoteli.....	22
2.1.1. Ferromagnetik Durum	22
2.1.1.1. Mıknatıslanma ve Histerezis Özellikleri	23
2.1.2. Antiferromagnetik Durum	26
2.1.2.1. Mıknatıslanma ve Histerezis Özellikleri	26
2.2. Boyuna Silindirik Öz/Yelek Spin-1 Ising Nanoteli.....	30
2.2.1. Ferromagnetik Durum	30
2.2.1.1. Mıknatıslanma ve Alınganlık.....	30
2.2.2. Antiferromagnetik Durum	33
2.2.2.1. Mıknatıslanma ve Alınganlık.....	33
2.2.3. Magnetik Tersinme Olayları.....	35
2.2.3.1. Histerezis Eğrileri ile Alınganlık İlişkisi	35
2.3. Enine Silindirik Öz/Yelek Spin-1 Ising Nanoteli.....	37
2.3.1. Ferromagnetik Durum	37
2.3.1.1. Termal Özelliklerin Sıcaklığa Bağımlılığı.....	37
2.3.1.2. Termal Özelliklerin Dış Magnetik Alana Bağımlılığı.....	40
2.3.2. Antiferromagnetik Durum	45
2.3.2.1. Termal Özelliklerin Sıcaklığa Bağımlılığı.....	45
2.3.2.2. Termal Özelliklerin Dış Magnetik Alana Bağımlılığı.....	47
2.4. Boyuna Silindirik Öz/Yelek Karma Spin-(1/2, 1) Ising Nanoteli.....	52
2.4.1. Ferromagnetik Durum	52
2.4.1.1. Termal Özelliklerin Sıcaklığa Bağımlılığı.....	52
2.4.1.2. Termal Özelliklerin Dış Magnetik Alana Bağımlılığı.....	54
2.4.2. Antiferromagnetik Durum	56

2.4.2.1. Termal Özelliklerin Sıcaklığa Bağımlılığı.....	56
2.4.2.2. Termal Özelliklerin Dış Magnetik Alana Bağımlılığı.....	58

3. BÖLÜM

TARTIŞMA ve SONUÇ

3.1. Tartışma ve Sonuç.....	60
-----------------------------	----

KAYNAKLAR	64
-----------------	----

ÖZGEÇMİŞ

SİLİNDİRİK NANOTELLERİN MAGNETİK ÖZELLİKLERİNİN SPİN-1 VE KARMA SPİN-(1/2, 1) İSİNG SİSTEMLERİ KULLANILARAK ETKİN ALAN TEORİSİYLE İNCELENMESİ

Numan ŞARLI

Erciyes Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü

Doktora Tezi, Kasım 2012

Danışman: Prof. Dr. Mustafa KESKİN

ÖZET

Bu tez çalışmasında, spin-1/2, spin-1 ve karma spin-(1/2, 1) Ising sistemleri kullanılarak silindirik öz ve yelekten oluşan nanotel sistemlerinin magnetik özelliklerinin (mıknatıslanma, alınganlık, öz ısı ve iç enerji) sıcaklık, dış magnetik alan, boyuna kristal alan, enine kristal alan ve öz/yelek etkileşim parametrelerine bağımlılıkları, etkin-alan teorisi (EFT) kullanılarak incelendi. Nanotel sistemlerinin faz geçiş türleri, kritik sıcaklık noktaları ve zorlayıcı alan noktaları belirlendi. Nanotel sistemi, boyuna kristal alana bağlı olarak, ikinci-dereceden faz geçişi veya birinci-dereceden faz geçişi yapmaktadır. Enine kristal alan arttıkça nanotel sisteminin magnetik özellikleri azalmakta ve yüksek enine kristal alan değerlerinde sistem tamamen paramagnetik özellik sergilemektedir. Güçlü öz/yelek etkileşimi için sistem bir tane kritik sıcaklık ve zorlayıcı alan noktasına sahip olurken, zayıf öz/yelek etkileşimi için sistemin öz ve yeleği birbirinden ayrık davranır ve farklı kritik sıcaklık ve zorlayıcı alan noktalarına sahip olur. Termal özellikler dış magnetik alana karşı zorlayıcı noktalarında belirgin pik yapmaktadır. Bu pikler bant yapısı oluştururlar ve bantların alanları histerezis çevrimlerinin alanları gibi sıcaklık arttıkça kaybolmaktadır. Teorik sonuçlarımız, diğer teorik ve deneysel sonuçlarla çok iyi uyum içersindedir.

Anahtar Kelimeler: Nanotel, Magnetik özellikler, Faz geçişleri, Etkin-alan teorisi

**THE INVESTIGATION OF THE MAGNETIC PROPERTIES OF THE
CYLINDRICAL NANOWIRES BY USING SPIN-1 AND MIXED SPIN-(1/2, 1)
ISING SYSTEMS WITHIN THE EFFECTIVE FIELD THEORY**

Numan ŞARLI

Erciyes University, Graduate School of Natural and Applied Sciences

Ph.D. Thesis, November 2012

Supervisor: Prof. Dr. Mustafa KESKİN

ABSTRACT

In this thesis, the temperature, applied field, transverse field, crystal field and core/shell interaction parameter dependencies of the magnetic properties (magnetization, susceptibility, specific heat and internal energy) of the cylindrical core/shell nanowires are investigated by using spin-1/2, spin-1 and mixed spin-(1/2, 1) Ising systems within the effective field theory (EFT). The phase transition types, critical temperatures and coercivity points of the nanowires are defined. The nanowire undergoes a second-order phase transition or first-order phase transition depending on the crystal field of the nanowire. The magnetic properties of the nanowire decrease as the transverse field increases and it exhibits entirely paramagnetic behavior at high transverse field. The nanowire has one critical temperature and coercive field point for the strong interaction, whereas the core and shell of the nanowire behave separately and they have different critical temperature and different coercive field points for the weak interaction. The thermal properties have distinct peaks at the coercive field points. These peaks constitute a band structure and the areas of the band disappear as the temperature increases just as the areas of the hysteresis loops. Our theoretical results are in good agreement with the other theoretical and the experimental results.

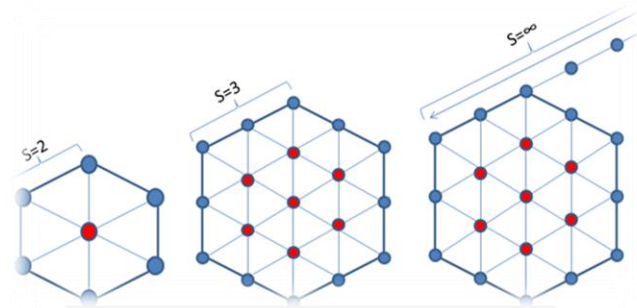
Keywords : Nanowires, Magnetic properties, Phase transitions, Effective-field theory.

1. BÖLÜM

MODEL ve FORMÜLASYON

1.1. Model

Silindirik nanotellere en yakın Ising sistemi hegzagonal örgü yapısıdır. Bu nedenle, S yüzeyin bir kenarındaki (yelek) atom sayısını göstermek üzere, Şekil 1.1.'de nanotelleri tanımlamak için yaygın olarak kullanılan basit şematik gösterimler verilmektedir. Şekil 1.1.'de mavi noktalar nanotelin yüzeyindeki (yelek) magnetik atomları, kırmızı noktalar ise nanotelin içindeki (öz) magnetik atomları temsil etmektedir. İki atom arası uzaklık $1\text{\AA}$ (Angström) olduğu dikkate alındığında, yeleğin bir kenarındaki atom sayısı $S=2$ olan en basit bir Ising nanotel sistemi teorik olarak alanı $0.015\sqrt{3}\text{ nm}^2$ olan bir nanotel sistemini veya yarıçapı $r=0.1\text{ nm}$ olan ve alanı 0.01π olan silindirik bir nanotel sistemini temsil etmektedir. Yeleğinin bir kenarındaki atom sayısı $S=3$ olan bir Ising nanotel sistemi ise, teorik olarak alanı $0.06\sqrt{3}\text{ nm}^2$ olan bir nanotel sistemini veya yarıçapı $r=0.2\text{ nm}$ olan ve alanı 0.04π olan silindirik bir nanotel sistemini temsil etmektedir. Yeleğin bir kenarındaki veya yarıçap üzerindeki atom sayısı artıkça ($S=\infty$) sistem nano boyutlardaki bir sistemi temsil etmez ve nanoboyuttan çok büyük bir yapı oluşturur. Bu tez çalışmasında, yeleğinin bir kenarında üç atom ($S=3$) bulunan Ising nanotel sisteminin magnetik özellikleri spin-1/2, spin-1 ve karma spin-(1/2, 1) Ising sistemleri kullanılarak etkin alan teorisi ile incelenecektir.



Şekil 1.1. Nanotellerin yeleğindeki atom sayılarına göre şematik gösterimi [16].

1.1.1. Spin-1/2 Ising Modeli

Silindirik nanotel sisteminin spin-1/2 Ising modeline göre Hamiltonyeni ($\mathcal{H}$), J_{Yelek} , $J_{\text{Öz}}$ ve $J_{\text{Öz/Yelek}}$ sırasıyla, yelekde, özde ve biri yelek diğeri özde bulunan iki atom arasındaki etkileşimi ve H dış magnetik alanı temsil etmek üzere aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$\mathcal{H} = -J_{\text{Yelek}} \sum_{\langle ij \rangle} S_i^z S_j^z - J_{\text{Öz}} \sum_{\langle mn \rangle} S_m^z S_n^z - J_{\text{Öz/Yelek}} \sum_{\langle im \rangle} S_i^z S_m^z - H \left(\sum_i S_i^z + \sum_m S_m^z \right). \quad (1.1)$$

1.1.2. Boyuna Spin-1 Blume Capel Modeli

Silindirik nanotel sisteminin spin-1 Blume Capel modeline göre Hamiltonyeni, D boyuna kristal alanı temsil etmek üzere aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$\mathcal{H} = -J_{\text{Yelek}} \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - J_{\text{Öz}} \sum_{\langle mn \rangle} S_m S_n - J_{\text{Öz/Yelek}} \sum_{\langle im \rangle} S_i S_m - D_{\text{Yelek}} \sum_i S_i^2 - D_{\text{Öz}} \sum_m S_m^2 - H \left(\sum_i S_i + \sum_m S_m \right). \quad (1.2)$$

1.1.3. Enine Spin-1 Blume Capel Modeli

Silindirik nanotel sisteminin enine spin-1 Blume Capel modeline göre Hamiltonyeni, Ω enine alanı temsil etmek üzere aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$\mathcal{H} = -J_{\text{Yelek}} \sum_{\langle ij \rangle} S_i^z S_j^z - J_{\text{Öz}} \sum_{\langle mn \rangle} S_m^z S_n^z - J_{\text{Öz/Yelek}} \sum_{\langle im \rangle} S_i^z S_m^z - \Omega_{\text{Yelek}} \sum_k S_k^x - \Omega_{\text{Öz}} \sum_l S_l^x - H \left(\sum_i S_i^z + \sum_m S_m^z \right). \quad (1.3)$$

1.1.4. Boyuna Karma Spin-(1, 1/2) Ising Modeli

Silindirik nanotel sisteminin karma spin-(1, 1/2) Ising modeline göre Hamiltonyeni, aşağıdaki gibi tanımlanır. D boyuna kristal alanı, $S_{i,j} = \pm 1, 0$ (spin-1) ve $\sigma_{m,n} = \pm 1$ (spin-1/2) olmak üzere aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$\mathcal{H} = -J_{\text{Yelek}} \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - J_{\text{Öz}} \sum_{\langle mn \rangle} \sigma_m \sigma_n - J_{\text{Öz/Yelek}} \sum_{\langle im \rangle} S_i \sigma_m - D_{\text{Yelek}} \sum_i S_i^2 - H \left(\sum_i S_i + \sum_m \sigma_m \right). \quad (1.4)$$

1.2. Formülasyon

Silindirik nanotel sistemi, spin-1/2 Ising, boyuna spin-1 Blume-Capel, enine spin-1 Blume-Capel ve karma spin-(1/2, 1) Ising sistemleriyle etkin alan teorisi (EFT) kullanılarak incelenecektir. Bu bölümde etkin alan teorisinin (EFT), en basit sistem olan spin-1/2 Ising sistemine uygulaması yapılacak ve her bir model için silindirik nanotel sisteminin magnetik özelliklerinin hesaplanması için gerekli olan denklemler verilecektir.

1.2.1. Etkin Alan Teorisi

Bu tez çalışmasında silindirik nanotellerin magnetik özellikleri spin-1/2 Ising, boyuna spin-1 Blume-Capel, enine spin-1 Blume-Capel ve karma spin-(1/2, 1) Ising sistemleriyle etkin alan teorisi (EFT) kullanılarak incelenecektir.

Silindirik yapılara en yakın örgü hekzagonal örgü yapısıdır. Bu nedenle silindirik nanotelin enine kesiti alınarak, nanoteli oluşturan atomlar hekzagonal örgünün öz ve yeleğine Şekil 1.2.'deki gibi dizilerek oluşturulan öz/yelek Ising nanotel sistemi differansiyel operatör tekniği kullanılarak etkin alan teorisi (EFT) ile incelenecektir. Metodu tanımlamak için etkin alan teorisini (EFT) en basit sistem olan spin-1/2 Ising sistemine uygulayalım.

Spin-1/2 Ising modeli için Hamiltonyeni,

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i, \quad (1.5)$$

eşitlik (1.5) ile tanımlanır. Burada H dış magnetik alandır. Birinci toplam en yakın komşu çiftler üzerinden alınacağını, ikinci toplam N özdeş spin üzerinden alınacaktır. $S_i = \pm 1$ değerlerini alır ve J, i ve j örgü noktaları arasındaki değiş-tokuş etkileşme parametresidir. Sistemin bölüşüm fonksiyonu ve i. örgü noktasındaki spin değişkeninin beklenen değeri,

$$Z = \text{Tr } e^{-\beta H}, \quad (1.6)$$

$$\langle S_i \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} [S_i e^{-\beta H}]. \quad (1.7)$$

Burada, Tr sistemin girilebilir durumlar üzerinden toplamı anlamına gelmektedir ve $\beta = 1/k_B T$, k_B Boltzmann sabitidir. Spin değişkenlerinin ortalama değeri için kesin bağıntıları, (1.6) ve (1.7) denklemlerinden elde edilebilir. Bunu elde etmek için, Hamiltonyeni birbiri ile sıra-değiştiren iki kısma ayırabiliriz; Biri i. örgü noktası ile ilişkili tüm katkıları içeren H_i , diğeri i. örgü noktasına bağlı olmayan kısım H' 'dür. Bu durumda Hamiltonyen,

$$H = H_i + H', \quad (1.8)$$

şeklinde yazılabilir. Burada $H_i = - S_i E_i$ iken $E_i = J \sum_{j=1}^z S_j + H'$ dir ve E_i i. duruma ait yerel alanı açıklayan operatördür. Spin değişkenleri sıra değiştirebilir, yani $[S_i, S_j] = 0$, komitatiftir. Dolayısıyla $[H_i, H'] = [H_i, H'] = 0$ 'dır. Bu durumda denklem (1.7) aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\langle S_i \rangle = \frac{1}{\text{Tr } e^{-\beta H'}} \left\{ \text{Tr } e^{-\beta H'} \left[\frac{\text{tr } S_i e^{-\beta H_i}}{\text{tr } e^{-\beta H_i}} \right] \right\}, \quad (1.9)$$

Burada, $\text{tr} = \sum_{i=-1}^{+1}$ i. durumdaki izi temsil etmektedir. S_i 'nin kısmi izi alınarak,

$$\langle S_i \rangle = \frac{e^{\beta E_i} - e^{-\beta E_i}}{e^{\beta E_i} + e^{-\beta E_i}}, \quad (1.10)$$

elde edilir. Burada, $\langle S_i \rangle$ ifadesi trigonometrik formda yazılırsa,

$$\langle S_i \rangle = \langle \tanh(\beta E_i) \rangle, \quad (1.11)$$

elde edilir. Bu eşitlik H. B. Callen tarafından 1963'te elde edilen, spin korrelasyonunu ifade eden Callen eşitliğidir [47]. Bu eşitliğin genelleştirilmiş formu,

$$\langle \{f_i\} S_i \rangle = \langle \{f_i\} \tanh(\beta E_i) \rangle, \quad (1.12)$$

şeklinde tanımlanır. Burada $\{f_i\}$, S_i hariç spin değişkenlerinin herhangi bir keyfi fonksiyonunu, $\langle \dots \rangle$ ise kanonik küme ortalamasını göstermektedir.

Honmura ve Kaneyoshi 1979'da diferansiyel operatör tekniğini kullanarak bu bağıntıları spin-1/2 ve yüksek dereceden spin sistemleri için kolayca elde etmişlerdir [48]. Bu tez çalışmasında, silindirik nanotel sistemlerinin magnetik özellikleri Honmura ve Kaneyoshi yaklaşımları ile incelenecektir. Şimdi, diferansiyel operatör tekniği kullanarak etkin alan teorisini tanıyalım.

$$\tanh(\beta E_i) = \exp(E_i \nabla) \tanh(x) \Big|_{x=0}, \quad (1.13)$$

olmak üzere, burada $\nabla = \partial/\partial x$ diferansiyel operatördür. Burada aşağıdaki matematiksel ilişki ile verilen diferansiyel operatör tekniği kullanılacaktır. Diferansiyel operatör tekniğine göre üstel bir diferansiyel operatör herhangi bir $f(x)$ fonksiyonu üzerine etki ederse diferansiyel operatör ve $f(x)$ arasındaki ilişki aşağıdaki gibi verilebilir [48].

$$e^{a \nabla} f(x) = f(x+a). \quad (1.14)$$

Bu bağıntı Taylor serisinin üstel terime genişletilmesiyle kolaylıkla görülebilir,

$$e^{a \nabla} f(x) = \left[1 + a \nabla + \frac{a^2}{2!} \nabla^2 + \dots \right] f(x) = f(x) + a \nabla f(x) + \dots = f(x+a), \quad (1.15)$$

bu eşitlikler kullanılarak (1.11) ve (1.12) bağıntıları sırasıyla aşağıdaki formlarda yazılabilir,

$$\langle \{f_i\} S_i \rangle = \langle \{f_i\} e^{E_i \nabla} \rangle \tanh(\beta E_i), \quad (1.16)$$

$$\tanh(\beta E_i) = f(x) \Big|_{x=0}. \quad (1.17)$$

(1.17) eşitliği kullanılarak, (1.16) eşitliği genel formda,

$$\langle \{f_i\} S_i \rangle = \langle \{f_i\} e^{E_i \nabla} \rangle f(x) \Big|_{x=0}, \quad (1.18)$$

yazılabilir, bu denklem aynı zamanda diferansiyel operatör tekniğinin temel bağıntısıdır. $f(x)$ fonksiyonu aşağıdaki gibi yazılabilir [49],

$$f(x) = \frac{1}{\sum_{n=1}^m \exp(\beta \lambda_n)} \left\{ \sum_{n=1}^m \langle \varphi_n | S_i | \varphi_n \rangle \exp(\beta \lambda_n) \right\}, \quad (1.19)$$

burada λ_n ve φ_n sırasıyla H_i 'nin özdeğerleri ve özfonksiyonlarıdır. Spin-1/2 Ising sistemi için $f(x)$ fonksiyonun bulunabilmesi için öncelikle matris temsili bulunmalıdır [50]. Bunlar ise,

$S_z |s, m_s\rangle = m_s \hbar |s, m_s\rangle$, $S^2 |s, m_s\rangle = s(s+1) \hbar^2 |s, m_s\rangle$ ve $m_s = 1/2, -1/2$ değerleri için S_z matris temsili,

$$S_z = \begin{pmatrix} \langle 1/2, 1/2 | S_z | 1/2, 1/2 \rangle & \langle 1/2, 1/2 | S_z | 1/2, -1/2 \rangle \\ \langle 1/2, -1/2 | S_z | 1/2, 1/2 \rangle & \langle 1/2, -1/2 | S_z | 1/2, -1/2 \rangle \end{pmatrix} \quad (1.20)$$

veya,

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (1.21)$$

elde edilir. Pauli spin matrisleri kullanılarak,

$$\hat{\sigma} = \frac{2}{\hbar} \hat{S} \quad \text{ve} \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.22)$$

olur. Burada σ_z Pauli spin matrislerinin z bileşenidir. Özdeğerleri $\lambda_1=1$ ve $\lambda_2=-1$ 'dir. Özvektörleri ise,

$$\varphi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{ve} \quad \varphi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (1.23)$$

biçiminde elde edilir. (1.19) denklemi kullanılarak,

$$f_{1/2}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sum_{n=1}^2 \exp(\beta \lambda_n)} \left\{ \sum_{n=1}^2 \langle \varphi_n | S_{1/2} | \varphi_n \rangle e^{\beta \lambda_n} \right\}, \quad (1.24)$$

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{e^{\beta x/2} + e^{-\beta x/2}} \left\{ \langle \varphi_1 | S_{1/2} | \varphi_1 \rangle e^{\beta x/2} + \langle \varphi_2 | S_{1/2} | \varphi_2 \rangle e^{-\beta x/2} \right\}, \quad (1.25)$$

$$f_{1/2}(\mathbf{x}) = \frac{1}{e^{\beta x/2} + e^{-\beta x/2}} \left\{ (1 \ 0) \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{\beta x/2} + (0 \ -1) \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} e^{-\beta x/2} \right\}, \quad (1.26)$$

$$f_{1/2}(\mathbf{x}) = \frac{e^{\beta x/2} - e^{-\beta x/2}}{2(e^{\beta x/2} + e^{-\beta x/2})} = \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{\beta}{2} x\right), \quad (1.27)$$

elde edilir. Ortalama mıknatıslanma, kritik sıcaklık, iç enerji, magnetik alınganlık ve öz ısı diferansiyel operatör tekniği kullanılarak hesaplanabilir. Farklı sistemlerin faz diyagramları elde edilir.

Eşitlik (1.27) Ising sistemi için tam bağıntıdır. Ancak bunu hesaplamak için bazı yaklaşımlar yapmaya ihtiyaç vardır. Bu eşitlik aynı zamanda ortalama alan ve Zernike yaklaşımları sonuçlarını vermektedir [51]. Eşitlik (1.27)'de hiperbolik trigonometrik fonksiyonlar cinsinden üstel diferansiyel operatörlere genişletilerek hesaplanabilir. Herhangi bir spin sistemi için üstel diferansiyel operatör, spin değerleri için van der Waerden özdeşliğinin kullanılmasıyla elde edilebilir [52].

Basit bir uygulama olarak spin-1/2 Ising sistemi için van der Waerden özdeşliğini elde edelim. Bu özdeşliğin genel formu,

$$F(S_i) = e^{\lambda S_i} = a_0 + a_1 S + a_2 S^2 + a_3 S^3 + a_4 S^4 + \dots, \quad (1.28)$$

şeklinde verilir, burada λ herhangi bir sabittir. Eşitlik (1.28)'de spin-1/2 durumu için, ilk iki terimi almak yeterlidir. Buna göre, $F(1/2) = e^{\lambda/2} = a_0 + \frac{a_1}{2}$ ve $F(-1/2) = e^{-\lambda/2} = a_0 - \frac{a_1}{2}$ bağıntılarından a_0 ve a_1 ifadeleri sırasıyla,

$$a_0 = [F(1/2) + F(-1/2)]/2 = [e^{\lambda/2} + e^{-\lambda/2}]/2, \quad (1.29)$$

$$a_1 = [F(1/2) - F(-1/2)]/2 = [e^{\lambda/2} - e^{-\lambda/2}]/2, \quad (1.30)$$

olarak elde edilir. Bu katsayılar eşitlik (1.28)'de yazılıp düzenlendiğinde,

$$e^{\lambda S} = \cosh(\lambda/2) + 2S \sinh(\lambda/2), \quad (1.31)$$

spin-1/2 Ising sistemi için van der Waerden özdeşliği elde edilir. Daha yüksek spinli Ising sistemleri için de bu ifade elde edilebilir. Ancak elde edilen ifadeler oldukça karmaşıktır. Daha yüksek spinli sistemler için bu ifadelerin hesabı Tucker tarafından yapılmıştır [53]. Bu eşitliklerden yararlanarak etkin alan teorisine göre merkezi spinin termal ortalaması,

$$\langle \{f_i\} S_i^z \rangle = \langle F(S_{iz}) \rangle F(x)|_{x=0}, \quad (1.32)$$

şeklinde verilir. Spin-1/2 için elde edilen $F(S_{iz})$ ve $F(x)$ değerleri eşitlikte yerine yazılırsa,

$$\langle S_i \rangle = \langle e^{E_i \nabla} \rangle \frac{1}{2} \tanh \left[\frac{\beta}{2} (x+h) \right] \Big|_{x=0}, \quad (1.33)$$

elde edilir. Eşitlik (1.27) ve (1.28)'den yararlanarak,

$$\langle S_i \rangle = \left\langle \prod_{i=1}^{\delta} \left[\cosh \left(\frac{J \nabla}{2} \right) + 2S_i \sinh \left(\frac{J \nabla}{2} \right) \right] \right\rangle \frac{1}{2} \tanh \left[\frac{\beta}{2} (x+h) \right] \Big|_{x=0}, \quad (1.34)$$

elde edilir. Burada δ en yakın komşu atom sayısı olmak üzere ve bal peteği örgüsü için $\delta = 3$, kare örgü için $\delta = 4$, olarak yazılabilir. Herhangi bir örgü için bu eşitlik,

$$\langle S_i \rangle = \left\langle \left[\cosh \left(\frac{J \nabla}{2} \right) + 2S_i \sinh \left(\frac{J \nabla}{2} \right) \right]^{\delta} \right\rangle \frac{1}{2} \tanh \left[\frac{\beta}{2} (x+h) \right] \Big|_{x=0}, \quad (1.35)$$

formuna dönüşür. Eşitlik (1.35)'u eşitlik (1.32) formuna uyarlırsak, $\langle F(S_{iz}) \rangle$ ve $F(x)|_{x=0}$ fonksiyonları aşağıdaki gibi tanımlanır,

$$\langle F(S_{iz}) \rangle = \left\langle \left[\cosh \left(\frac{J \nabla}{2} \right) + 2S_{iz} \sinh \left(\frac{J \nabla}{2} \right) \right]^{\delta} \right\rangle, \quad (1.36)$$

$$F(x)|_{x=0} = \frac{1}{2} \tanh \left[\frac{\beta}{2} (x+h) \right] \Big|_{x=0}. \quad (1.37)$$

Bu denklem kesindir. Bununla birlikte, yüksek spinli sistemler için spin-spin korrelasyonlarının tamamı ele alınırsa problemin çözümü zorlaşır. Bundan dolayı, korrelasyonlar arasındaki etkileşmeyi indirgeyen bağlantısız (decoupling) yaklaşımıdır.

$$\langle S_i (S_{i'})^2 \dots (S_{j^n}) \rangle \cong \langle S_i \rangle \langle (S_{i'})^2 \rangle \dots \langle (S_{j^n}) \rangle, \quad (1.38)$$

Buna göre $i \neq i' \neq \dots \neq i^n$ olmak üzere korrelasyonlu etkin-alan teorisi bir çok sisteme uygulanmıştır [48, 54, 55]. Bu yaklaşım hacim probleminde Zernike yaklaşımına [56] karşılık gelir ve yüzey problemlerini içeren çok sayıda magnetik sisteme uygulanmıştır [48, 54, 55, 57]. Diğer taraftan ortalama alan yaklaşımında kendi korrelasyonları dahil bunun gibi bütün korrelasyonlar ihmal edilmektedir. Bu yaklaşım kullanılarak bal peteği örgüsü için (1.35) eşitliğinde $\delta = 3$ yazılarak ortalama mıknatıslanma ifadesi,

$$\langle S_i \rangle = \left[\text{Cosh}(JV) + \langle S_i^z \rangle \text{Sinh}(JV) \right]^3 F(x)|_{x=0} = \left[\text{Cosh}[JV]^3 + \dots \right] F(x)|_{x=0}, \quad (1.39)$$

şeklinde yazılır, Eşitlik (1.39)'da diferansiyel operatör tekniği uygulanırsa,

$$\begin{aligned} \langle S_i \rangle &= \left[1/8 (e^{-JV} + e^{JV})^3 + \dots \right] F(x)|_{x=0} \\ &= \left[1/8 (e^{-3JV} + 3e^{-JV} + 3e^{JV} + e^{3JV}) + \dots \right] F(x)|_{x=0} \\ &= \frac{1}{8} e^{-3JV} F(x)|_{x=0} + \frac{3}{8} e^{-JV} F(x)|_{x=0} + \frac{3}{8} e^{JV} F(x)|_{x=0} + \dots \\ &= \frac{1}{8} F(-3J)|_{x=0} + \frac{3}{8} F(-J)|_{x=0} + \frac{3}{8} F(J)|_{x=0} + \dots \end{aligned} \quad (1.40)$$

elde edilir ve mıknatıslanmanın genelleştirilmiş ifadesi aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$M = a_0 + a_1 m + a_2 m^2 + a_3 m^3. \quad (1.41)$$

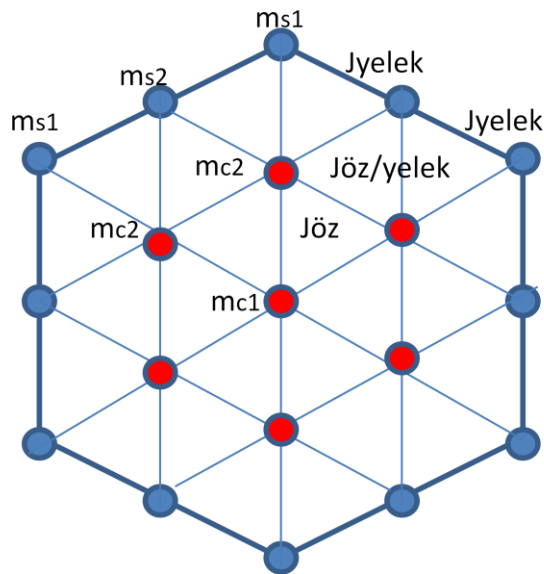
Etkin-alan teorisi kullanılarak spin-1/2 Ising sistemlerinin mıknatıslanmasına benzer işlemler yapılarak, spin-1, spin-3/2 ve spin-2 gibi yüksek spin değerli Ising sistemlerinin mıknatıslanmalarında kolaylıkla elde edilir.

1.2.2. Silindirik Öz/Yelek Spin-1/2 Ising Nanoteli

Silindirik öz/yelek Ising nanotel sisteminin miknatıslanması, etkin-alan teorisi kullanılarak (EFT) ilk defa Kaneyoshi [18-20] tarafından tanımlandığı için, öz/yelek Ising nanotel sistemlerinin etkin-alan teorisi ile tanımlanmasında Kaneyoshi yaklaşımını kullanacağız. Silindirik öz/yelek Ising nanotel sistemi şematik olarak Şekil 1.2.'de gösterilmiştir. Öz/yelek Ising nanotel sisteminin özü; merkezinde bir magnetik atom ve merkezi çevreleyen magnetik atomların oluşturduğu bir öz yüzeyinden oluşur. Yelek ise, nanotelin özünü çevreleyen magnetik atomların oluşturduğu dış yüzeydir. Silindirik öz/yelek spin-1/2 Ising nanotel sisteminin Hamiltonyeni,

$$\mathcal{H} = -J_{\text{Yelek}} \sum_{\langle ij \rangle} S_i^z S_j^z - J_{\text{Öz}} \sum_{\langle mn \rangle} S_m^z S_n^z - J_{\text{Öz/Yelek}} \sum_{\langle im \rangle} S_i^z S_m^z - H \left(\sum_i S_i^z + \sum_m S_m^z \right), \quad (1.42)$$

ile verilir. Burada, J_{Yelek} ve $J_{\text{Öz}}$ sırasıyla, yelekteki ve özdeki magnetik atomların en yakın komşu etkileşim parametresini, $J_{\text{Yelek/Öz}}$ ise, biri yelekte diğeri özde bulunan iki magnetik atom arasındaki etkileşim parametresidir. S terimleri Ising nanotel sisteminin yelek ve özüne yerleştirilen magnetik atomların spin değerlerini temsil eder örneğin, spin-1/2 Ising nanoteli için $S = \pm 1$ olur. $\langle \dots \rangle$ terimleri, toplamın yelek, öz ve öz/yelek etkileşmelerinin bütün komşu çiftler üzerinden alınacağını gösterir.



Şekil 1.2. Silindirik öz/yelek Ising nanotel sisteminin şematik gösterimi[18].

H ise dış magnetik alanı gösterir. Yelek etkileşim parametresi, yüzeyin nanotel sisteminin fiziksel özelliklerine etkisini belirlemek için $J_{\text{Yelek}}=(1+\Delta_s) J_{\text{Öz}}$ şeklinde ifade edilir. Burada, Δ_s öz/yelek çiftlenim katsayısıdır. Etkin-alan teorisi kullanılarak, Şekil 1.2.'de gösterilen silindirik öz/yelek spin-1/2 Ising nanotel sisteminin mıknatıslanmaları aşağıdaki gibi tanımlanır [18].

$$\begin{aligned} m_{s1} &= [m_{s1}(A)]^2 [m_{s2}(A)]^2 [m_{c2}(B)] F_s(x) \Big|_{x=0}, \\ m_{s2} &= [m_{s2}(A)]^2 [m_{s1}(A)]^2 [m_{c2}(B)]^2 F_s(x) \Big|_{x=0}, \\ m_{c2} &= [m_{c2}(C)]^4 [m_{c1}(C)] [m_{s1}(B)] [m_{s2}(B)]^2 F_c(x) \Big|_{x=0}, \\ m_{c1} &= [m_{c1}(C)]^2 [m_{c2}(C)]^6 F_c(x) \Big|_{x=0}. \end{aligned} \quad (1.43)$$

Burada, m_{s1} ve m_{s2} terimleri nanotel sisteminin yelek mıknatıslanmalarını, m_{c1} ve m_{c2} terimleri öz mıknatıslanmalarını gösterir. A, B ve C terimleri sırasıyla, $A=J_{\text{Yelek}} \nabla$, $B=J_{\text{Öz}} \nabla$ ve $C=J_{\text{Öz/Yelek}} \nabla$ şeklinde tanımlanır. ∇ ise $\nabla=\partial/\partial x$ şeklinde differansiyel operatör olarak tanımlanır. Spin-1/2 Ising sistemleri için $m_{ij}(x)$ ve $F(x)$ fonksiyonları aşağıdaki gibi tanımlanır [53].

$$\begin{aligned} m_{ij}(X) &= \text{Cosh}(X) + 2m_{ij} \text{Sinh}(X), \\ F_s[x] &= F_c[x] = \text{Tanh}[\beta(x+H)]. \end{aligned} \quad (1.44)$$

Eşitlik (1.43)'de, m_{s1} mıknatıslanmasının, m_{s1} (alt ve üst tabakalardan) ile iki, m_{s2} ile iki, m_{c2} ile bir, komşuluğu olduğundan bu mıknatıslanma ifadelerinin üsleri sırayla 2, 2, 1'dir. m_{s2} ise m_{s1} ile iki, m_{s2} (alt ve üst tabakalardan) ile iki, m_{c2} ile iki, komşuluğu olduğundan bu mıknatıslanma ifadelerinin üsleri sırayla 2, 2, 2'dir. m_{c2} ise, m_{c2} (alt ve üst tabakalardan ve sağ-sol komşularından) ile dört, m_{s1} ile bir, m_{c1} ile bir ve m_{s2} ile iki komşuluğu olduğundan bu mıknatıslanma ifadelerinin üsleri sırayla 4, 1, 1, 2'dir. m_{c1} ise, m_{c1} (alt ve üst tabakalardan) ile iki ve m_{c2} ile 6 komşusu olduğundan, bu mıknatıslanma ifadelerinin üsleri sırayla 2, 6'dır. Yani her bir mıknatıslanmayı yazarken onun aynı cinsten komşularının sayısı o mıknatıslanmanın üssü olarak yazılır. Farklı spin değerleri için Şekil 1.2.'de temsil edilen Ising nanotel sisteminin komşuluk sayıları değişmeyeceğinden yeleğinin bir kenarındaki atom sayısı $S=3$ olan bir nanotel sisteminde mıknatıslanmaların komşu sayıları bütün spin değerleri için aynıdır.

1.2.3. Boyuna Silindirik Öz/Yelek Spin-1 Ising Nanoteli

Öz ve yeleği spin-1 magnetik atomlarından oluşan Şekil 1.2.'de gösterilen boyuna silindirik öz/yelek Ising nanotel sisteminin Hamiltonyeni aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$\mathcal{H} = -J_{\text{Yelek}} \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - J_{\text{Öz}} \sum_{\langle mn \rangle} S_m S_n - J_{\text{Öz/Yelek}} \sum_{\langle im \rangle} S_i S_m - D_{\text{Yelek}} \sum_i S_i^2 - D_{\text{Öz}} \sum_m S_m^2 - H \left(\sum_i S_i + \sum_m S_m \right). \quad (1.45)$$

Burada, silindirik öz/yelek spin-1/2 Ising nanotel sisteminden farklı olarak D_{Yelek} ve $D_{\text{Öz}}$ terimleri sırasıyla, nanotel sisteminin yelek ve özüne ait boyuna kristal alanını gösterir. S terimleri $S = \pm 1$ ve 0 değerlerini alır. Boyuna silindirik öz/yelek spin-1 Ising nanotelinin mıknatıslanmaları ve quadrupol momentleri aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$\begin{aligned} m_{s1} &= [m_{s1}(A)]^2 [m_{s2}(A)]^2 [m_{c2}(B)] F_s(x) \Big|_{x=0}, \\ m_{s2} &= [m_{s2}(A)]^2 [m_{s1}(A)]^2 [m_{c2}(B)]^2 F_s(x) \Big|_{x=0}, \\ m_{c2} &= [m_{c2}(C)]^4 [m_{c1}(C)] [m_{s1}(B)] [m_{s2}(B)]^2 F_c(x) \Big|_{x=0}, \\ m_{c1} &= [m_{c1}(C)]^2 [m_{c2}(C)]^6 F_c(x) \Big|_{x=0}, \\ q_{s1} &= [m_{s1}(A)]^2 [m_{s2}(A)]^2 [m_{c2}(B)] G_s(x) \Big|_{x=0}, \\ q_{s2} &= [m_{s2}(A)]^2 [m_{s1}(A)]^2 [m_{c2}(B)]^2 G_s(x) \Big|_{x=0}, \\ q_{c2} &= [m_{c2}(C)]^4 [m_{c1}(C)] [m_{s1}(B)] [m_{s2}(B)]^2 G_c(x) \Big|_{x=0}, \\ q_{c1} &= [m_{c1}(C)]^2 [m_{c2}(C)]^6 G_c(x) \Big|_{x=0}. \end{aligned} \quad (1.46)$$

Burada, A , B , ve C ifadeleri spin-1/2 ile aynı olup, $m_{ij}(x)$, $F(x)$ ve $G(x)$ fonksiyonları boyuna spin-1 Ising sistemleri için aşağıdaki gibi tanımlanır [53, 54].

$$m_{ij}(X) = 1 + m_{ij} \sinh(X) + q_{ij} (\cosh(X) - 1), \quad (1.47)$$

$$\begin{aligned} F_s[x] &= \frac{2 \sinh[\beta(x+h)]}{2 \cosh[\beta(x+h)] + \exp[-\beta D_s]}, \\ F_c[x] &= \frac{2 \sinh[\beta(x+h)]}{2 \cosh[\beta(x+h)] + \exp[-\beta D_c]}, \\ G_s[x] &= \frac{2 \cosh[\beta(x+H)]}{2 \cosh[\beta(x+H)] + \exp[-\beta D_s]}, \\ G_c[x] &= \frac{2 \cosh[\beta(x+H)]}{2 \cosh[\beta(x+H)] + \exp[-\beta D_c]}. \end{aligned} \quad (1.48)$$

1.2.4. Enine Silindirik Öz/Yelek Spin-1 Ising Nanoteli

Öz ve yeleği spin-1 magnetik atomlarından oluşan Şekil 1.2.'de gösterilen enine silindirik öz/yelek Ising nanotel sisteminin Hamiltonyeni aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$\mathcal{H} = -J_{\text{Yelek}} \sum_{\langle ij \rangle} S_i^z S_j^z - J_{\text{Öz}} \sum_{\langle mn \rangle} S_m^z S_n^z - J_{\text{Öz/Yelek}} \sum_{\langle im \rangle} S_i^z S_m^z - \Omega_{\text{Yelek}} \sum_k S_k^x - \Omega_{\text{Öz}} \sum_l S_l^x - H \left(\sum_i S_i^z + \sum_m S_m^z \right). \quad (1.49)$$

Burada, boyuna öz/yelek spin-1 Ising nanotel sisteminden farklı olarak, Ω_{Yelek} ve $\Omega_{\text{Öz}}$ terimleri sırasıyla yelek ve öze ait enine alanları gösterir. $m_{ij}(x)$ fonksiyonu Eşitlik (1.47) ile aynıdır. $F(x)$ ve $G(x)$ fonksiyonları ise enine spin-1 Ising sistemleri için aşağıdaki gibi tanımlanır [54].

$$\begin{aligned} F_s[x] &= \frac{x+H}{\left((x+H)^2 + \Omega_s^2\right)^{1/2}} \frac{2\text{Sinh}[\beta \left((x+H)^2 + \Omega_s^2\right)^{1/2}] }{2\text{Cosh}[\beta \left((x+H)^2 + \Omega_s^2\right)^{1/2}] + 1}, \\ F_c[x] &= \frac{x+H}{\left((x+H)^2 + \Omega_c^2\right)^{1/2}} \frac{2\text{Sinh}[\beta \left((x+H)^2 + \Omega_c^2\right)^{1/2}] }{2\text{Cosh}[\beta \left((x+H)^2 + \Omega_c^2\right)^{1/2}] + 1}, \\ G_s[x] &= \frac{\Omega_s^2 + \left(\Omega_s^2 + 2(x+H)^2\right)}{\left((x+H)^2 + \Omega_s^2\right)} \frac{\text{Cosh}[\beta \left((x+H)^2 + \Omega_s^2\right)^{1/2}] }{2\text{Cosh}[\beta \left((x+H)^2 + \Omega_s^2\right)^{1/2}] + 1}, \\ G_c[x] &= \frac{\Omega_c^2 + \left(\Omega_c^2 + 2(x+H)^2\right)}{\left((x+H)^2 + \Omega_c^2\right)} \frac{\text{Cosh}[\beta \left((x+H)^2 + \Omega_c^2\right)^{1/2}] }{2\text{Cosh}[\beta \left((x+H)^2 + \Omega_c^2\right)^{1/2}] + 1}. \end{aligned} \quad (1.50)$$

1.2.5. Karma Silindirik Öz/Yelek Spin-(1/2, 1) Ising Nanoteli

Özü spin-1/2 ve yeleği spin-1 magnetik atomlarından oluşan Şekil 1.2.'de gösterilen Karma silindirik öz/yelek Ising nanotel sisteminin Hamiltonyeni aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$\mathcal{H} = -J_{\text{Yelek}} \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - J_{\text{Öz}} \sum_{\langle mn \rangle} S_m S_n - J_{\text{Öz/Yelek}} \sum_{\langle im \rangle} S_i S_m - D_{\text{Yelek}} \sum_i S_i^2 - H \left(\sum_i S_i + \sum_m S_m \right). \quad (1.51)$$

Burada, silindirik öz/yelek spin-1/2 ve spin-1 Ising nanotel sisteminden farklı olarak D_{Yelek} terimlerini nanotel sisteminin yelegine ait boyuna kristal alanını gösterir. Öz spin-1/2 magnetik atomlarından oluştuğu için boyuna kristal alanı yoktur. Bu nedenle nanotel sisteminin Hamiltonyeninde spin-1/2 magnetik atomları için boyuna kristal alan terimi eklenmemiştir. S terimleri yelek için $S=\pm 1$ ve 0, öz için $S=\pm 1$ değerlerini alır. Etkin-alan teorisi kullanılarak karma silindirik öz/yelek spin-(1/2, 1) Ising nanotelinin mıknatıslanmaları (m_{s1} , m_{s2} , m_{c1} and m_{c2}) ve quadrupol momentleri ($q_{ij}=m_{ij}^2$, q_{s1} and q_{s2}) aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$\begin{aligned}
m_{s1} &= [m_{s1}(A)]^2 [m_{s2}(A)]^2 [m_{c2}(B/2)] F_s(x) \Big|_{x=0}, \\
m_{s2} &= [m_{s2}(A)]^2 [m_{s1}(A)]^2 [m_{c2}(B/2)]^2 F_s(x) \Big|_{x=0}, \\
m_{c2} &= [m_{c2}(C/2)]^4 [m_{c1}(C/2)] [m_{s1}(B)] [m_{s2}(B)]^2 F_c(x) \Big|_{x=0}, \\
m_{c1} &= [m_{c1}(C/2)]^2 [m_{c2}(C/2)]^6 F_c(x) \Big|_{x=0}, \\
q_{s1} &= [m_{s1}(A)]^2 [m_{s2}(A)]^2 [m_{c2}(B/2)] G_s(x) \Big|_{x=0}, \\
q_{s2} &= [m_{s2}(A)]^2 [m_{s1}(A)]^2 [m_{c2}(B/2)]^2 G_s(x) \Big|_{x=0}.
\end{aligned} \tag{1.52}$$

Burada $m_{ij}(x)$, $F(x)$ ve $G(x)$ fonksiyonları karma spin-(1/2, 1) Ising nanotel sistemi için aşağıdaki gibi tanımlanır [53, 54].

$$\begin{aligned}
m_{sj}(X) &= 1 + m_{sj} \sinh(X) + q_{sj} (\cosh(X) - 1), \\
m_{cj}(X/2) &= \cosh(X/2) + 2m_{cj} \sinh(X/2).
\end{aligned} \tag{1.53}$$

$$\begin{aligned}
F_s[x] &= \frac{2 \sinh[\beta(x+H)]}{2 \cosh[\beta(x+H)] + \exp[-\beta D_s]}, \\
F_c[x] &= \frac{1}{2} \tanh\left[\frac{\beta}{2}(x+H)\right], \\
G_s[x] &= \frac{2 \cosh[\beta(x+H)]}{2 \cosh[\beta(x+H)] + \exp[-\beta D_s]}.
\end{aligned} \tag{1.54}$$

Spin-1/2, spin-1 ve karma spin-(1/2, 1) Ising nanotel sistemleri için elde edilen mıknatıslanma ifadelerine dikkat edilirse, spin değeri değiştiği zaman mıknatıslanma ifadelerinde $F(S)$ ve $F(x)$ fonksiyonları değişmektedir. Elde edilen mıknatıslanma ifadesi kullanılarak nanotel sistemine ait alınganlık, öz ısı ve iç enerji özellikleri kolaylıkla elde edilebilir.

1.2.6. Silindirik Öz/Yelek Ising Nanotelinin Magnetik Özellikleri

Etkin-alan teorisi kullanılarak, silindirik öz/yelek Ising nanotel sisteminin alınganlık, öz ısı ve iç enerji özellikleri, aşağıdaki gibi tanımlanır.

1.2.6.1 Alınganlık

Alınganlık özellikleri (χ_i , $i=s1, s2, c1, c2$) aşağıdaki gibi tanımlanır. Burada χ_{s1} ve χ_{s2} yelek, χ_{c1} ve χ_{c2} öz alınganlıştır.

$$\chi_i = \lim_{H \rightarrow 0} \frac{\partial m_i}{\partial H}. \quad (1.55)$$

$$\begin{aligned} \chi_{s1} &= a_1 \chi_{s1} + a_2 \chi_{s2} + a_3 \chi_{c2} + a_4 \frac{\partial F_s[x]}{\partial H}, \\ \chi_{s2} &= b_1 \chi_{s1} + b_2 \chi_{s2} + b_3 \chi_{c2} + b_4 \frac{\partial F_s[x]}{\partial H}, \\ \chi_{c2} &= c_1 \chi_{s1} + c_2 \chi_{s2} + c_3 \chi_{c2} + c_4 \chi_{c1} + c_5 \frac{\partial F_c[x]}{\partial H}, \\ \chi_{c1} &= d_1 \chi_{c1} + d_2 \chi_{c2} + d_3 \frac{\partial F_c[x]}{\partial H}. \end{aligned} \quad (1.56)$$

1.2.6.2 Öz Isı

Öz ısı özellikleri (C_i , $i=s1, s2, c1, c2$) aşağıdaki gibi tanımlanır. Burada C_{s1} ve C_{s2} yelek, C_{c1} ve C_{c2} öz öz ısıdır.

$$C_i = \frac{\partial U_i}{\partial T}. \quad (1.57)$$

$$\begin{aligned} C_{s1} &= a_1 C_{s1} + a_2 C_{s2} + a_3 C_{c2} + a_4 \frac{\partial F_s[x]}{\partial T}, \\ C_{s2} &= b_1 C_{s1} + b_2 C_{s2} + b_3 C_{c2} + b_4 \frac{\partial F_s[x]}{\partial T}, \\ C_{c2} &= c_1 C_{s1} + c_2 C_{s2} + c_3 C_{c2} + c_4 C_{c1} + c_5 \frac{\partial F_c[x]}{\partial T}, \\ C_{c1} &= d_1 C_{c1} + d_2 C_{c2} + d_3 \frac{\partial F_c[x]}{\partial T}. \end{aligned} \quad (1.58)$$

1.2.6.3 İç Enerji

İç enerji özellikleri (U_i , $i=s1, s2, c1, c2$) aşağıdaki gibi tanımlanır. Burada U_{s1} ve U_{s2} yelek, U_{c1} ve U_{c2} öz iç enerjisidir.

$$U_i = -\frac{\partial m_i}{\partial V}. \quad (1.59)$$

$$\begin{aligned} U_{s1} &= a_1 U_{s1} + a_2 U_{s2} + a_3 U_{c2} + \frac{\partial m_{s1}}{\partial V} F_s[x], \\ U_{s2} &= b_1 U_{s1} + b_2 U_{s2} + b_3 U_{c2} + \frac{\partial m_{s2}}{\partial V} F_s[x], \\ U_{c2} &= c_1 U_{s1} + c_2 U_{s2} + c_3 U_{c2} + c_4 U_{c1} + \frac{\partial m_{c2}}{\partial V} F_c[x], \\ U_{c1} &= d_1 U_{c1} + d_2 U_{c2} + \frac{\partial m_{c1}}{\partial V} F_c[x]. \end{aligned} \quad (1.60)$$

Son olarak nanotel sistemlerinin toplam yelek, öz ve nanotel sisteminin mıknatıslanma, alınganlık, öz ısı ve iç enerjileri sırasıyla aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$\begin{aligned} x_{Yelek} &= \frac{1}{12} (6x_{s1} + 6x_{s2}), \\ x_{Öz} &= \frac{1}{7} (6x_{c2} + x_{c1}), \\ x_T &= \frac{1}{19} (6(x_{s1} + x_{s2}) + 6x_{c2} + x_{c1}). \end{aligned} \quad (1.61)$$

Burada x değişkeni yerine öz ve yelekten oluşan Ising nanotelinin hangi magnetik özelliği hesaplanmak isteniyorsa, o magnetik özelliğin simgesi yazılarak, öz, yelek ve nanotel sistemine ait magnetik özellikler nümerik olarak elde edilir. Örneğin, nanotel sisteminin mıknatıslanması için M , alınganlığı için χ , öz ısı için C ve iç enerjisi için U yazılır.

Eşitlik (1.61)'de yelek, öz ve nanotel sisteminin toplam magnetik özellikleri hesaplanırken, yelekte altı tane m_{s1} ve m_{s2} , özde altı tane m_{c2} olduğundan bu yelek ve öze ait magnetik özellikler altı ile çarpılırlar. Ayrıca nanotel sisteminin merkezinde bir tane m_{c1} olduğundan, merkeze ait olan magnetik özellikler herhangi bir katsayı ile çarpılmazlar. Yelekte toplam 12, özde 7 ve nanotel sisteminde 19 atom olduğundan dolayı bu ifadeler bu sayılara bölünürler.

2. BÖLÜM

NÜMERİK BULGULAR

Etkin-alan teorisi ile tanımlanan silindirik öz/yelek spin-1/2, enine spin-1, boyuna spin-1 ve karma spin-(1/2, 1) Ising nanotel sistemlerinin magnetik özellikleri için elde edilen nümerik sonuçlar aşağıda verilmiştir.

2.1. Silindirik Öz/Yelek Spin-1/2 Ising Nanoteli

Silindirik öz/yelek spin-1/2 Ising nanotel sisteminin mıknatıslanması, histerezis davranışları, zorlayıcı alan ve kalıcı mıknatıslanma özellikleri ferromagnetik ($r>1$) ve antiferromagnetik ($r<1$) durum için incelendi. Öncelikle mıknatıslanma grafikleri elde edildi ve sistemin kritik sıcaklığı (T_c) belirlendi. Histerezis davranışları kritik sıcaklığın altında, yakınında ve üstündeki indirgenmiş sıcaklıklar için elde edildi. Histerezis eğrileri kullanılarak zorlayıcı alan ve kalıcı mıknatıslanma özellikleri elde edildi. Sistemin ferromagnetik ve antiferromagnetik durumlarını belirleyen öz/yelek çiftlenim parametresi (r) aşağıdaki gibi tanımlanır. Eğer $r>0$ ise sistem ferromagnetiktir, $r<0$ ise sistem antiferromagnetiktir.

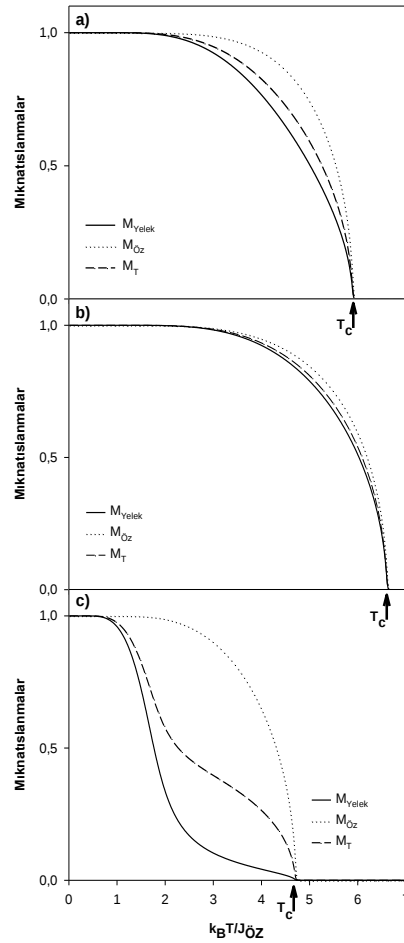
$$r=J_{\text{Öz/yelek}}/J_{\text{Öz}} \quad (2.1)$$

2.1.1. Ferromagnetik Durum

Ferromagnetik silindirik öz/yelek spin-1/2 Ising nanotel sisteminin mıknatıslanmasının sıcaklığa ve dış magnetik alana karşı davranışları farklı r ve Δ_s değerleri için incelendi. Öz, yelek ve nanotel sisteminin histerezis eğrileri kullanılarak öz, yelek ve nanotel sistemine ait zorlayıcı alan ve kalıcı mıknatıslanma özellikleri elde edildi. Elde edilen mıknatıslanma özellikleri ve histerezis özellikleri (zorlayıcı alan ve kalıcı mıknatıslanma) aşağıda ayrıntılı bir şekilde verilmektedir.

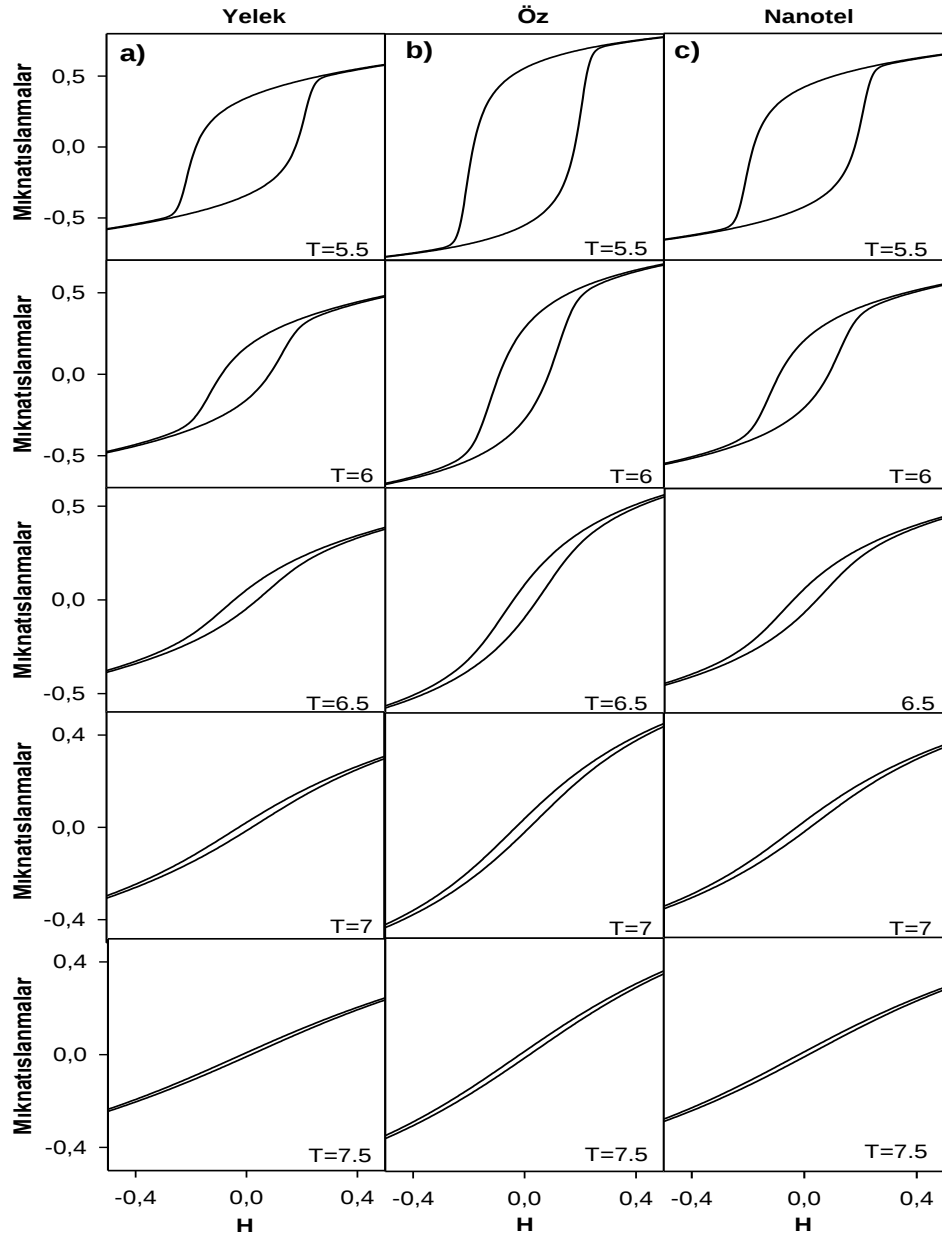
2.1.1.1. Mıknatıslanma ve Histerezis Özellikleri

Ferromagnetik silindirik öz/yelek Ising nanotelinin öz $M_{\text{Öz}}$, yelek M_{Yelek} ve toplam M_T mıknatıslanmaları indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak ($T=k_B T_A/J_{\text{Öz}}$) farklı $r>0$ ve Δ_s değerleri için Şekil 2.1.'de gösterilmiştir. Şekil 2.1.(a) $r=1$ ve $\Delta_s=0$ değerleri için elde edildi. Sıcaklığın sıfır olduğu durumda öz, yelek ve nanotel mıknatıslanmaları ($M_{\text{Öz}}=M_{\text{Yelek}}=M_T=1$) birbirlerine eşittir. Sistemin bütün mıknatıslamaları sıcaklık arttıkça azalır ve kritik sıcaklık ($T_c=5.922$) noktasında ikinci-dereceden faz geçişi yaparak ferromagnetik fazdan paramagnetik faza geçer. Şekil 2.1.(b) $r=1$ ve $\Delta_s=0.5$ için elde edildi. Sistemin mıknatıslanmaları artan Δ_s değeri için birbirlerine yaklaşmakta ve kritik sıcaklık noktası artmaktadır ($T_c=6.637$). Şekil 2.1.(c) $r=0.1$ ve $\Delta_s=-0.5$ için $T_c=4.756$ 'dır. Mıknatıslanmalar negatif Δ_s değerleri için birbirlerinden ayrılmaktadır. Yelek mıknatıslanması öz ve nanotelin mıknatıslanmasından daha hızlı azalır.



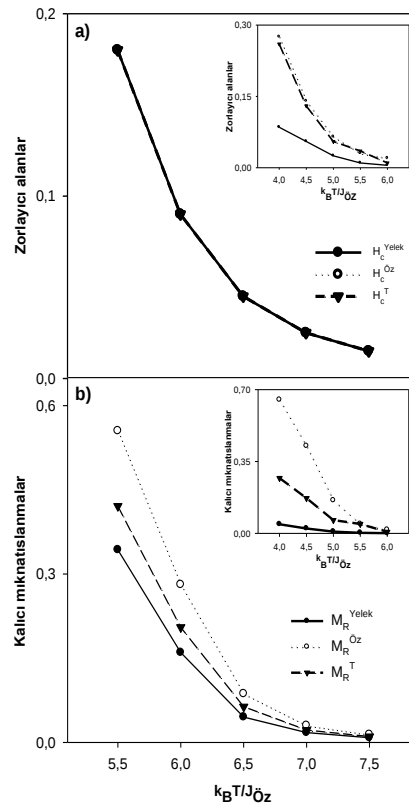
Şekil 2.1. Ferromagnetik silindirik öz/yelek spin-1/2 Ising nanotel sisteminin mıknatıslanmalarının sıcaklık bağımlılığı.

Şekil 2.2.'de, $r=1$ ve $\Delta_s=0$ değerleri için elde edilen yelek (a) öz (b), ve nanotel (c) sistemine ait mıknatıslanmaların, kritik sıcaklığın altında, yakınında ve üstündeki sıcaklıklarda ($T_c=5.922$, $T=5.5$, 6.0 , 6.5 , 7.0 ve 7.5) dış magnetik alana karşı davranışları gösterilmektedir. Öz, yelek ve nanotel sisteminin histerezis çevriminin alanları sıcaklık arttıkça azalır ve kritik sıcaklıktan daha yüksek sıcaklıklarda kaybolurlar. Histerezis davranışları, farklı r ve Δ_s değerleri için sadece histerezis çevriminin alanlarının şekillerinde değişim meydana gelir.



Şekil 2.2. Ferromagnetik silindirik öz/yelek spin-1/2 Ising nanotel sisteminin mıknatıslanmalarının dış magnetik alan bağımlılığı.

Şekil 2.3. ferromagnetik ($r>0$) nanotel sisteminin kritik sıcaklığının altında, yakınında ve üstündeki farklı sıcaklıklar için ve farklı r ve Δ_s değerleri için hesaplanan histerezis eğrileri kullanılarak elde edilen öz, yelek ve nanotel sistemine ait zorlayıcı alan ve kalıcı mıknatıslanma özelliklerini göstermektedir. Şekil 2.3.(a)'da, nanotel sistemin $r=1$ ve $\Delta_s=0$ değerleri için hesaplanan zorlayıcı alanları gösterilmektedir. Öz, yelek ve nanotel sisteminin zorlayıcı alanları $r=1$ ve $\Delta_s=0$ değerleri için üst üste binerler ve birbirleriyle çakışırlar. Sıcaklık arttıkça sisteminin zorlayıcı alanlarının azaldıkları görülmektedir. Şekil 2.3.(a)'nın içindeki ek şekillerde ise $r=0.1$ ve $\Delta_s=-0.5$ değerleri için elde edilen zorlayıcı alan eğrileri gösterilmektedir. Nanotel sisteminin zorlayıcı alanlarının r azaldıkça birbirlerinden ayrıldıkları görülmektedir. Şekil 2.3(b)'de, $r=1$ ve $\Delta_s=0$ değerleri için hesaplanan histerezis eğrileri kullanılarak elde edilen kalıcı mıknatıslanmalar gösterilmektedir. Kalıcı mıknatıslanmaların sıcaklık arttıkça azaldığı görülmektedir. Şekil 2.3(b)'nin içindeki ek şekillerde ise, $r=0.1$ ve $\Delta_s=-0.5$ değerleri için elde edilen kalıcı mıknatıslanmalar gösterilmektedir. Kalıcı mıknatıslanmalar r 'nin azalmasıyla birbirlerinden uzaklaşır ve sıcaklık arttıkça daha erken sıfıra gider.



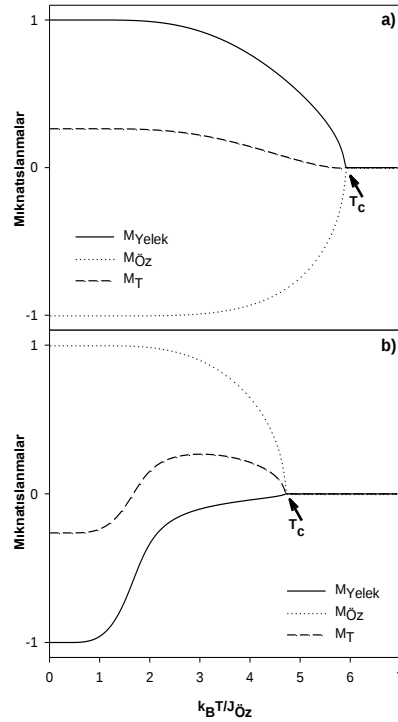
Şekil 2.3. Ferromagnetik silindirik öz/yelek spin-1/2 Ising nanotel sisteminin zorlayıcı alan ve kalıcı mıknatıslanmalarının sıcaklık bağımlılığı.

2.1.2. Antiferromagnetik Durum

Antiferromagnetik silindirik öz/yelek spin-1/2 Ising nanotel sisteminin mıknatıslanmasının sıcaklığa bağlı davranışları, histerezis özellikleri (zorlayıcı alan ve kalıcı mıknatıslanma) negatif r ve Δ_s değerleri için etkin alan teorisi kullanılarak incelendi. Elde edilen nümerik sonuçlar aşağıda ayrıntılı olarak verilmektedir.

2.1.2.1. Mıknatıslanma ve Histerezis Özellikleri

Antiferromagnetik silindirik öz/yelek Ising nanotelinin öz $M_{\text{Öz}}$, yelek M_{Yelek} ve toplam M_T mıknatıslanmalarının sıcaklığa bağlılığı farklı $r < 0$ ve Δ_s değerleri için Şekil 2.4.' de gösterildi. Şekil 2.4.(a) $r = -1$ ve $\Delta_s = 0$ değerleri için elde edildi. Sıcaklığın sıfır olduğu durumda öz, yelek ve nanotel mıknatıslanmaları ferromagnetik durumdan farklı olarak sırasıyla $M_{\text{Öz}} = -1$, $M_{\text{Yelek}} = 1$ ve $M_T = 0.263$ değerlerini alırlar. Yelek ve nanotel mıknatıslanması sıcaklık arttıkça azalırken, öz mıknatıslanması sıcaklık arttıkça artmaktadır.

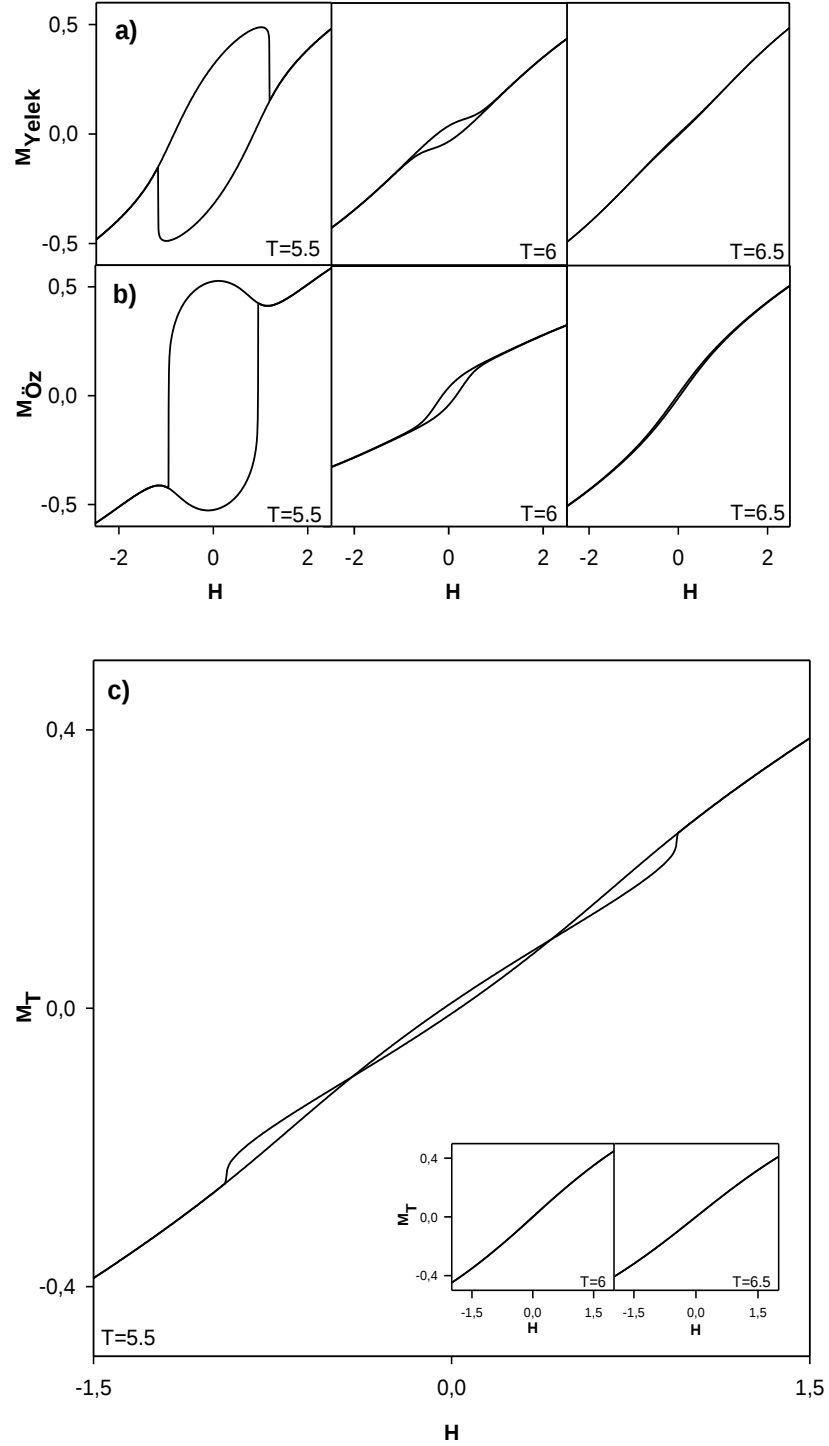


Şekil 2.4. Antiferromagnetik silindirik öz/yelek spin-1/2 Ising nanotel sisteminin mıknatıslanmalarının sıcaklık bağımlılığı.

Sistem mıknatıslanmaları kritik sıcaklık ($T_c=5.922$) noktasında ikinci-dereceden faz geçişi yaparak antiferromagnetik fazdan paramagnetik faza geçer. Şekil 2.4.(b) 'de nanotel sisteminin öz/yelek etkileşim paramatresinin $r=-0.1$ değeri ve $\Delta_s=-0.5$ değeri için hesaplanan öz, yelek ve nanotel sistemine ait mıknatıslanmaların sıcaklıkğa karşı davranışları gösterilmektedir. Sıcaklığın sıfır olduğu durumda öz, yelek ve nanotel sistemine ait mıknatıslanmalar sırasıyla $M_{\text{Öz}}=-1$, $M_{\text{Yelek}}=1$ ve $M_T=-0.263$ değerini almaktadır. Antiferromagnetik durumda, r 'nin artan değerleri için yelek mıknatıslanması sıcaklık arttıkça hızlı bir şekilde artarken, öz mıknatıslanması monoton bir şekilde azalmaktadır. Nanotel sisteminin mıknatıslanması ise sıcaklık arttıkça önce artmakta ve kritik sıcaklığın altındaki belirli bir telafi sıcaklığı noktasında sıfır olmaktadır. Telafi sıcaklığından sonra geniş bir maksimum yaparak kritik sıcaklık noktasında ($T_c=5.922$) ikinci-dereceden faz geçişi yapmakta ve antiferromagnetik fazdan paramagnetik faza geçmektedir.

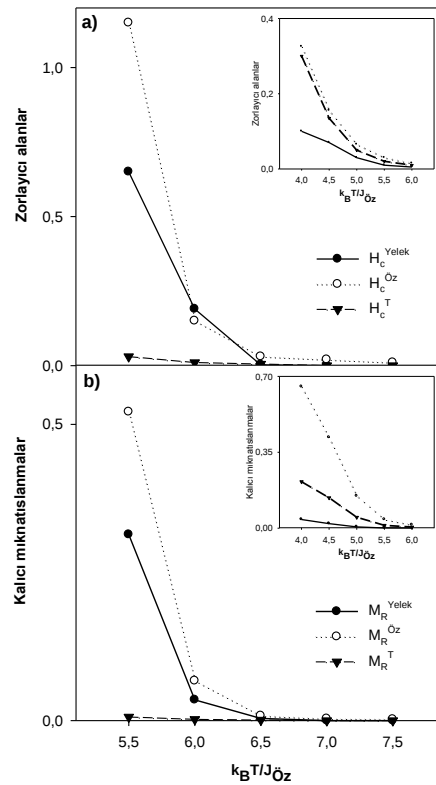
Şekil 2.5.'de nanotel sisteminin öz/yelek etkileşim paramatresinin, $r=-1$ değeri ve $\Delta_s=0$ değeri için elde edilen yelek (a), öz (b), ve nanotel (c) sistemine ait mıknatıslanmaların, kritik sıcaklığın ($T_c=5.922$) altında, yakınında ve üstündeki sıcaklıklarda ($T=5.5, 6.0$ ve 6.5) dış magnetik alana karşı davranışları gösterilmektedir. Şekil 2.5.(a)'da nanotel sisteminin yeleğine ait mıknatıslanmanın dış magnetik alana karşı davranışları gösterilmektedir. Yeleğin histerezis çevriminin şekli, ferromagnetik durumdaki yelek çevriminden şekil bakımından farklılık gösterir. Yelek çevriminin alanları ferromagnetik durumdakinden daha düşük sıcaklıklarda kaybolurlar. Şekil 2.5.(b)'de nanotel sisteminin özüne ait mıknatıslanmanın dış magnetik alana karşı davranışları gösterilmektedir. Özün histerezis çevriminin şekilleri ferromagnetik nanotel sisteminin özüne ait histerezis çevriminin şeklinden farklıdır ve histerezis çevrimlerinin alanları ferromagnetik durumdaki histerezis çevrimlerinin alanlarından daha düşük sıcaklıklarda kaybolurlar. Şekil 2.5.(c)'de nanotel sisteminin mıknatıslanmasının dış magnetik alana karşı davranışları gösterilmektedir. Antiferromagnetik nanotel sisteminin histerezis çevrimleri, kritik sıcaklığın altındaki sıcaklıklarda ferromagnetik durumdaki histerezis çevrimlerinden çok farklı bir davranış sergilerler. Ferromagnetik durumda nanotel sisteminin histerezis çevrimleri kritik sıcaklığın altındaki sıcaklıklarda tek bir kapalı alana sahipken, antiferromagnetik durumda histerezis çevrimleri birbirinden ayrık üçlü çevrim alanlarına sahiptir. Bununla birlikte, antiferromagnetik

nanotel sisteminin histerezis çevriminin alanları ferromagnetik durumdan daha düşük sıcaklıklarda kaybolurlar. Şekil 2.5.(c) içindeki ek şekillerde ise, nanotelin histerezis çevrimleri $T=6$ ve 6.5 sıcaklık noktalarında lineer bir doğru oluşturmaktadır.



Şekil 2.5. Antiferromagnetik silindirik öz/yelek spin-1/2 Ising nanotel sisteminin mıknatıslanmalarının dış magnetik alan bağımlılığı.

Şekil 2.6. farklı sıcaklıklarda ve farklı $r < 0$ ve Δ_s değerleri için hesaplanan histerezis eğrileri kullanılarak elde edilen öz, yelek ve nanotel sistemine ait zorlayıcı alan ve kalıcı mıknatıslanma özelliklerini göstermektedir. Şekil 2.6.(a)'da, sistemin $r=-1$ ve $\Delta_s=0$ değerleri için hesaplanan zorlayıcı alanları verilmektedir. Ferromagnetik durumdan ($r=1$ ve $\Delta_s=0$) farklı olarak, antiferromagnetik sistemin zorlayıcı alanları birbirinden ayrık davranış sergilemektedir ve sıcaklık arttıkça ferromagnetik duruma kıyasla daha erken sıfır değerine ulaşmaktadır. Şekil 2.6.(a) içindeki ek şekiller'de ise, $r=-0.1$ ve $\Delta_s=-0.5$ değerleri için hesaplanan zorlayıcı alanları gösterilmektedir. Sistemin zorlayıcı alanlarının r değerinin azalmasıyla azaldığı görülmektedir. Şekil 2.6.(b)'de, sistemin $r=-1$ ve $\Delta_s=0$ değerleri için hesaplanan kalıcı mıknatıslanmaları verildi. Sistemin kalıcı mıknatıslanmalarının sıcaklık arttıkça, ferromagnetik durumdan daha erken sıfır olduğu görülmektedir. Şekil 2.6.(b) içindeki ek şekillerde ise $r=-0.1$ ve $\Delta_s=-0.5$ değerleri için hesaplanan kalıcı mıknatıslanmalar verildi. Zorlayıcı alanlara benzer şekilde antiferromagnetik nanotel sistemin kalıcı mıknatıslanmaları r değeri azaldıkça azalmaktadır.



Şekil 2.6. Antiferromagnetik silindirik öz/yelek spin-1/2 Ising nanotel sisteminin zorlayıcı alan ve kalıcı mıknatıslanmalarının sıcaklık bağımlılığı.

2.2. Boyuna Silindirik Öz/Yelek Spin-1 Ising Nanoteli

Boyuna silindirik öz/yelek spin-1 Ising nanotelinin mıknatıslanma ve alınganlık özelliklerinin sıcaklığa, dış magnetik alana, öz/yelek etkileşimine ve boyuna kristal alana karşı davranışları ferromagnetik ($r>0$) ve antiferromagnetik ($r<0$) durum için incelendi. Elde edilen teorik sonuçlar aşağıda ayrıntılı olarak verilmektedir.

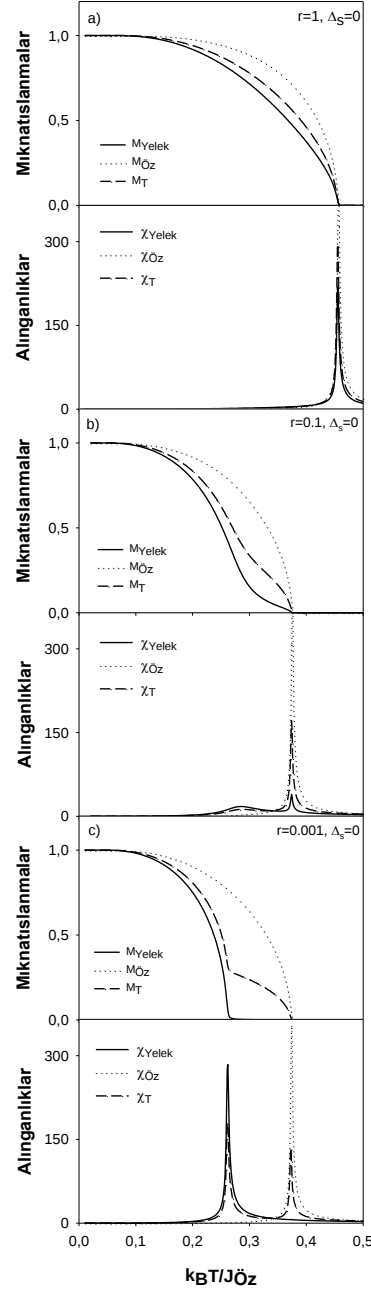
2.2.1. Ferromagnetik Durum

Ferromagnetik boyuna silindirik öz/yelek spin-1 Ising nanotel sisteminin mıknatıslanma ve alınganlık özelliklerinin sıcaklığa karşı davranışları farklı $r>0$ (öz/yelek etkileşim parametresi) ve D (boyuna kristal alan) değerleri için incelendi. Sistemin faz geçiş türleri ve kritik sıcaklık noktaları belirlendi.

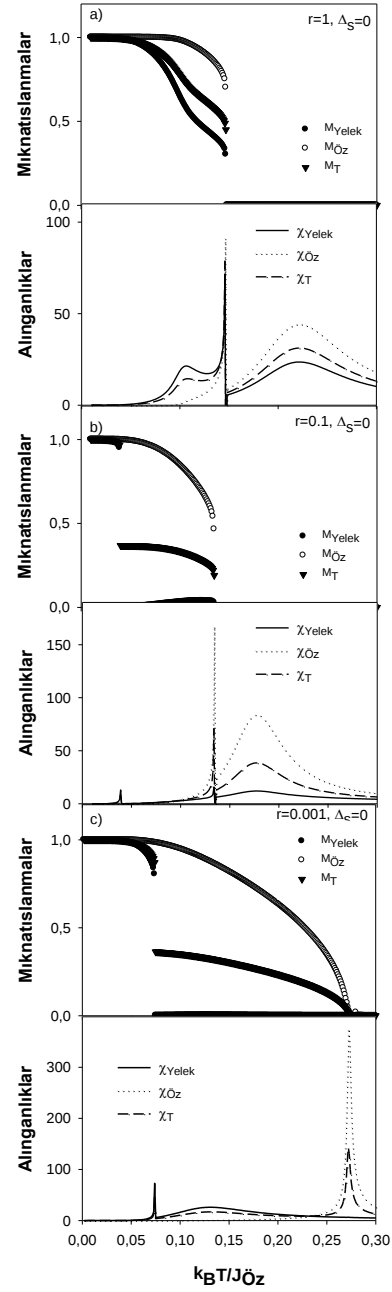
2.2.1.1. Mıknatıslanma ve Alınganlık

Ferromagnetik boyuna silindirik öz/yelek spin-1 Ising nanotelinin $D_{\text{Yelek}}=D_{\text{Öz}}=0$ değerleri için hesaplanan öz, yelek ve nanotel sistemine ait mıknatıslanma ve alınganlık özelliklerinin sıcaklığa karşı davranışları Şekil 2.7.'de gösterilmiştir. Şekil 2.7.(a)'da, $r=1$ ve $\Delta_s=0$ değerleri için sistemin mıknatıslanma ve alınganlık davranışları gösterilmektedir. Öz, yelek ve nanotel sistemine ait mıknatıslanmalar sıcaklık arttıkça azalır ve kritik sıcaklık noktasında ($T_c=0.455$) ikinci-dereceden faz geçişi yaparak ferromagnetik fazdan paramagnetik faza geçerler. Nanotel sisteminin alınganlıkları kritik sıcaklık noktasında belirgin bir pik verirler. Kritik sıcaklığın üstündeki sıcaklıklarda ise sıcaklık arttıkça monoton bir şekilde azalır. Şekil 2.7.(b)'de, $r=0.1$ ve $\Delta_s=0$ değerleri için sistemin mıknatıslanma ve alınganlık davranışları gösterilmektedir. Sıcaklık arttıkça yeleğe ait mıknatıslanma öz mıknatıslanmasına göre daha hızlı azalır. Nanotel mıknatıslanması kritik sıcaklıktan önce bir dalgalanma davranışı göstermektedir. Yelek ve nanotel alınganlıkları ise, mıknatıslanmalardaki dalgalanmalara karşılık geniş bir maksimum verirler ve kritik sıcaklık noktasında (0.375) belirgin bir pik yaparlar. Şekil 2.7.(c)'de, $r=0.001$ ve $\Delta_s=0$ değerleri için sistemin mıknatıslanma ve alınganlık davranışları gösterilmektedir. öz ve yelek mıknatıslanmaları ve alınganlıkları öz ve yelek arasındaki zayıf etkileşmelerde

($r=0.001$) birbirinden ayrık davranış sergilemektedirler. Yelek mıknatıslanmasının ferromagnetik fazdan paramagnetik faza geçişi ve alınganlık piki $T_c^{\text{Yelek}}=0.262$ 'de, öz mıknatıslanmasının faz geçiş sıcaklığı ve alınganlık piki $T_c^{\text{Öz}}=0.372$ 'de olmaktadır.



Şekil 2.7. Ferromagnetik boyuna silindirik öz/yelek spin-1 Ising nanotel sisteminin mıknatıslanmalarının sıcaklık bağımlılığı.



Şekil 2.8. Ferromagnetik boyuna silindirik öz/yelek spin-1 Ising nanotel sisteminin mıknatıslanmalarının sıcaklık ve boyuna kristal alan bağımlılığı.

Şekil 2.8.'de, ferromagnetik boyuna silindirik öz ve yelekten oluşan spin-1 Ising nanotelinin, boyuna kristal alanın farklı ($D_{\text{Yelek}}=D_{\text{Öz}}=-0.332$, $D_{\text{Yelek}}=D_{\text{Öz}}=-0.269$ ve $D_{\text{Yelek}}=D_{\text{Öz}}=-0.204$) değerleri için nümerik olarak hesaplanan öz, yelek ve nanotel sistemine ait mıknatıslanma ve alınganlık özelliklerinin sıcaklığa karşı davranışlarını gösterilmektedir. Şekil 2.8.(a)'da, $r=1$, $\Delta_s=0$ ve $D_{\text{Yelek}}=D_{\text{Öz}}=-0.332$ değerleri için boyuna spin-1 Ising nanotel sistemin mıknatıslanma ve alınganlık davranışları gösterilmektedir. Öz, yelek ve nanotel sisteminin mıknatıslanmaları $T_t=0.146$ geçiş sıcaklığı noktasında birinci-dereceden faz geçişi yaparak ferromagnetik fazdan paramagnetik faza geçerler. Yelek ve nanotel sisteminin mıknatıslanmaları geçiş sıcaklığından önce bir dalgalanma yapmaktadır. Buna karşılık yelek ve nanotel alınganlıkları geçiş sıcaklığından önce geniş bir maksimum verirler ve T_t sıcaklık noktasında belirgin bir pik yaparlar. Boyuna spin-1 Ising nanotel sisteminin alınganlıkları, ikinci-dereceden geçiş durumundan farklı olarak, geçiş sıcaklığının üstündeki sıcaklıklarda ($T>T_t$) geniş bir maksimum yaparak sıcaklık arttıkça azalır. Şekil 2.8.(b)'de $r=0.1$, $\Delta_s=0$ ve $D_{\text{Yelek}}=D_{\text{Öz}}=-0.269$ değerleri için boyuna spin-1 Ising nanotel sisteminin mıknatıslanma ve alınganlık davranışları gösterilmektedir. Yelek ve nanotel mıknatıslanmaları iki ayrı geçiş sıcaklığında ($T_{t1}=0.04$ ve $T_{t2}=0.134$) birinci-dereceden faz geçişi yaparken öz mıknatıslanmaları T_{t2} geçiş sıcaklığı noktasında bir adet birinci-dereceden faz geçişi yapmaktadır. Yelek ve nanotel alınganlıkları $T_{t1}=0.04$ ve $T_{t2}=0.134$ sıcaklık noktasında iki belirgin pik yaparken, öz alınganlığı ise T_{t2} sıcaklık noktasında bir adet belirgin pik yapmaktadır. Şekil 2.8.(c)'de, $r=0.001$, $\Delta_s=0$ ve $D_{\text{Yelek}}=D_{\text{Öz}}=-0.204$ değerleri için boyuna spin-1 Ising nanotel sisteminin mıknatıslanma ve alınganlık davranışları gösterilmektedir. Öz ve yelek arasındaki zayıf etkileşimde ($r=0.001$), boyuna spin-1 Ising nanotel sisteminin öz mıknatıslanması ikinci-dereceden faz geçişi yaparken, yelek mıknatıslanması birinci-dereceden faz geçişi yapmaktadır. Nanotel sistemi ise, önce öz mıknatıslanmasına bağlı olarak $T_t=0.075$ sıcaklık noktasında birinci-dereceden faz geçişi yaparken, sonra yelek mıknatıslanmasına bağlı olarak $T_c=0.277$ sıcaklık noktasında ikinci dereceden faz geçişi yapmaktadır.

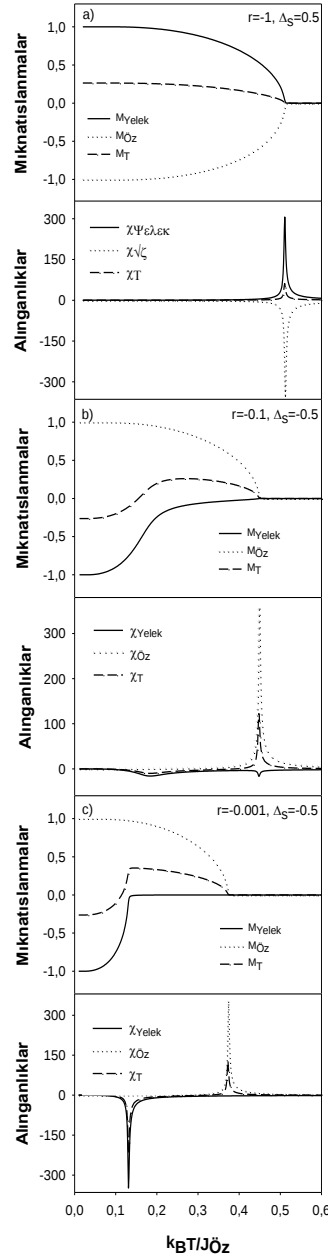
2.2.2. Antiferromagnetik Durum

Antiferromagnetik boyuna silindirik öz/yelek spin-1 Ising nanotel sisteminin mıknatıslanma ve alınganlık özelliklerinin sıcaklığa karşı davranışları farklı $r < 0$ (öz/yelek etkileşim parametresi) ve D (boyuna kristal alan) değerleri için incelendi. Sistemin geçiş türleri ve kritik sıcaklık noktaları belirlendi.

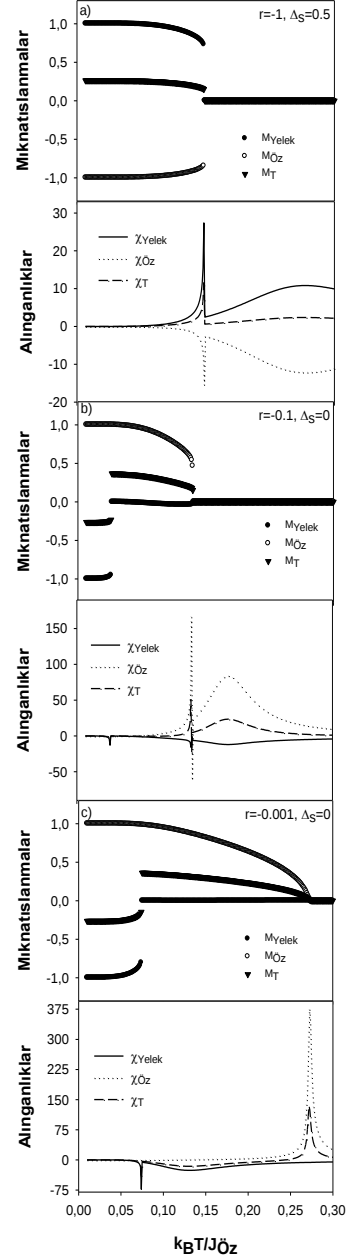
2.2.2.1. Mıknatıslanma ve Alınganlık

Antiferromagnetik boyuna silindirik öz/yelek spin-1 Ising nanotelinin $D_{\text{Yelek}}=D_{\text{Öz}}=0$ değerleri için hesaplan öz, yelek ve nanotel sistemine ait mıknatıslanma ve alınganlık özelliklerinin sıcaklığa karşı davranışları Şekil 2.9.'da gösterildi. Şekil 2.9.(a)'da, $r=-1$ ve $\Delta_s=0.5$ değerleri için sistemin mıknatıslanma ve alınganlık davranışları gösterilmektedir. Yelek ve nanotel mıknatıslanmaları sıcaklık arttıkça azalırken, öz mıknatıslanması sıcaklık arttıkça artarak kritik sıcaklık noktasında ($T_c=0.511$) ikinci-dereceden faz geçişi yaparak antiferromagnetik fazdan paramagnetik faza geçerler. Yelek ve nanotel alınganlıkları kritik sıcaklık noktasında pozitif yönde belirgin bir pik yaparken, öz alınganlığı kritik sıcaklık noktasında negatif yönde belirgin bir pik yapar. Şekil 2.9.(b)'de, $r=-0.1$ ve $\Delta_s=-0.5$ değerleri için sistemin mıknatıslanma ve alınganlık davranışları gösterilmektedir. Sıcaklık arttıkça, öz mıknatıslanması azalırken, yelek mıknatıslanması hızlı bir şekilde artar. Nanotel mıknatıslanması ise sıcaklık arttıkça artar ve telafi sıcaklık noktasında sıfır olur. Telafi sıcaklığı ve kritik sıcaklık noktası arasında geniş bir maksimum yaparak kritik sıcaklık noktasında ($T=0.375$) antiferromagnetik fazdan paramagnetik faza geçer. Öz alınganlığı kritik sıcaklık noktasında belirgin bir pik yaparken, yelek ve nanotel alınganlıkları kritik sıcaklık noktasından önce geniş bir maksimum yaparlar ve kritik sıcaklık noktasında öz alınganlık pikinden daha küçük bir pik yaparlar. Şekil 2.9(c)'de, $r=-0.001$ ve $\Delta_s=-0.5$ değerleri için sistemin mıknatıslanma ve alınganlık davranışları gösterilmektedir. Öz ve yelek arasındaki zayıf etkileşmelerde ($r=0.001$), yelek mıknatıslanması $T_c^{\text{Yelek}}=0.131$ ve öz mıknatıslanması $T_c^{\text{Öz}}=0.372$ kritik sıcaklık noktasında antiferromagnetik fazdan paramagnetik faza geçerler. Öz ve yelek alınganlıkları kendilerine ait T_c 'de pik yaparken, nanotel alınganlığı biri öze ait kritik sıcaklık noktasında, diğeri ise yeleğe ait sıcaklık noktasında olmak üzere iki adet birbirinden ayrık belirgin pik yaparlar.

Şekil 2.10. antiferromagnetik boyuna silindirik öz/yelek spin-1 Ising nanotelinin $D_{\text{Yelek}}=D_{\text{Öz}}=-0.332$, $D_{\text{Yelek}}=D_{\text{Öz}}=-0.269$ ve $D_{\text{Yelek}}=D_{\text{Öz}}=-0.204$ değerleri için hesaplanan mıknatıslanma ve alınganlık özelliklerinin sıcaklığa karşı davranışlarını göstermektedir.



Şekil 2.9. Antiferromagnetik boyuna silindirik öz/yelek spin-1 Ising nanotel sisteminin mıknatıslanmalarının sıcaklık bağımlılığı.



Şekil 2.10. Antiferromagnetik boyuna silindirik öz/yelek spin-1 Ising nanotel sisteminin mıknatıslanmalarının sıcaklık ve boyuna kristal alan bağımlılığı.

Şekil 2.10.(a), (b) ve (c)'de antiferromagnetik durum için hesaplanan öz, yelek ve nanotel sisteminin mıknatıslanma ve alınganlık özellikleri, ferromagnetik durum için hesaplanan mıknatıslanma (faz geçiş türü ve kritik geçiş sıcaklık noktaları) ve alınganlık özellikleri (kritik geçiş noktalarındaki maksimum ve pik özellikleri) ile benzer özellik sergilerler. Fakat temel farklar; Şekil 2.10.(a)'da, öz mıknatıslanması ve alınganlık piki negatif yöndedir. Şekil 2.10.(b) ve (c)'de, yelek ait alınganlık maksimumu ve alınganlık piki negatif yöndedir.

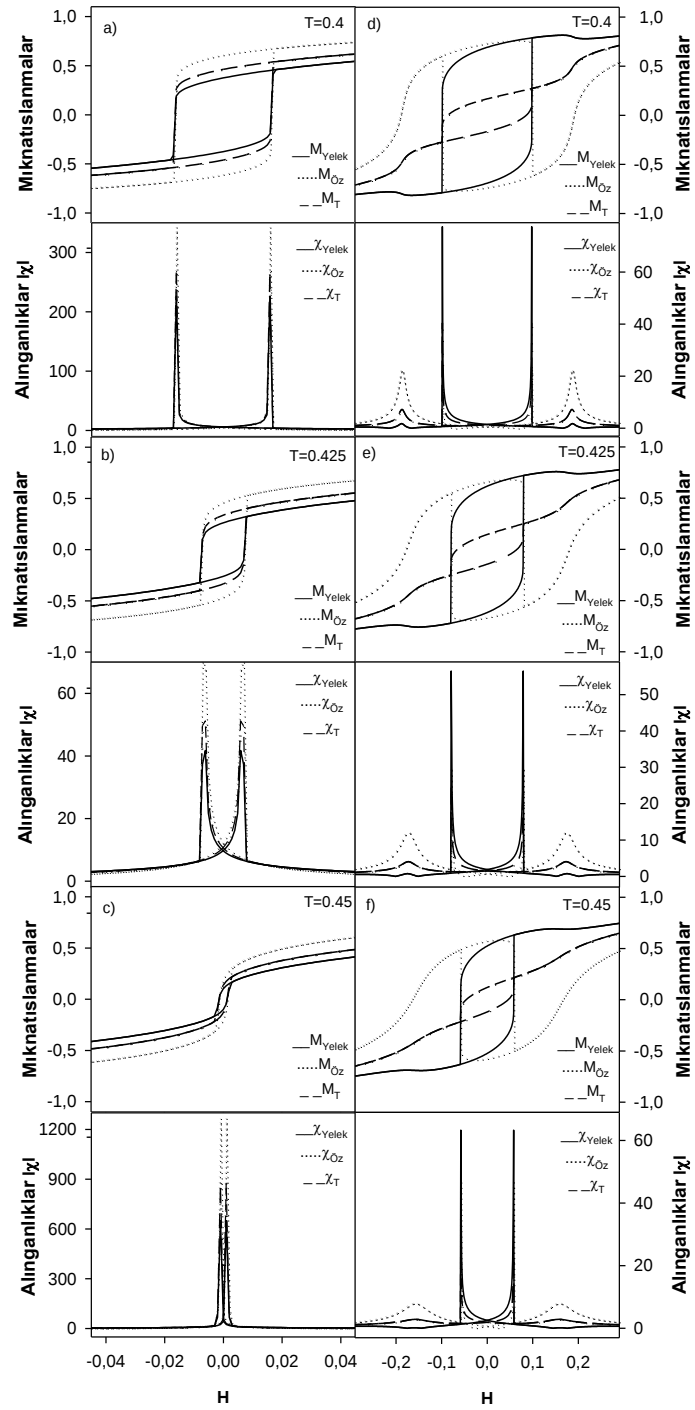
2.2.3. Magnetik Tersinme Olayları

Boyuna silindirik öz/yelek spin-1 Ising nanotelinin mıknatıslanma ve alınganlık özelliklerinin ferromagnetik ($r=1$ ve $\Delta_s=0$) ve antiferromagnetik ($r=-1$ ve $\Delta_s=0.5$) durumda dış magnetik alana karşı davranışları farklı sıcaklıklarda incelendi. Elde edilen teorik sonuçlar aşağıda ayrıntılı olarak verilmektedir.

2.2.3.1. Histerezis Eğrileri ile Alınganlık İlişkisi

Şekil 2.11. boyuna silindirik öz/yelek spin-1 Ising nanotelinin $r=1$ ve $\Delta_s=0$ değerleri için farklı sıcaklıklarda hesaplanan mıknatıslanma ve alınganlık özelliklerinin dış magnetik alana karşı davranışlarını göstermektedir. Şekil 2.11.(a)'da, mıknatıslanma ve alınganlık özelliklerinin $T=0.4$ sıcaklık noktasında magnetik alana karşı davranışları gösterilmektedir. Öz, yelek ve nanotel sisteminin zorlayıcı alan noktası $H_c=\pm 0.016$ 'dır. Bu noktada öz, yelek ve nanotel sisteminin alınganlıkları belirgin bir pik yapmaktadır. Bu nedenle, alınganlıkların dış magnetik alana karşı yaptıkları pik noktaları zorlayıcı alan noktaları belirlemektedir. Şekil 2.11.(b) ve (c)'de, mıknatıslanma ve alınganlık özelliklerinin sırasıyla $T=0.425$ ve $T=0.45$ sıcaklık noktasında magnetik alana karşı davranışları gösterilmektedir. Şekil 2.11(a)'ya benzer şekilde alınganlıklar sırasıyla $H_c=\pm 0.007$ ve $H_c=\pm 0.001$ zorlayıcı alan noktalarında belirgin bir pik yapmaktadırlar. Bununla birlikte, iki belirgin alınganlık piki arasındaki uzaklık histerezis alanlarının sıcaklık arttıkça azaldığı gibi azalmaktadır. Şekil 2.11.(d), (e) ve (f)'de, boyuna silindirik öz/yelek spin-1 Ising nanotelinin $r=-1$ ve $\Delta_s=0.5$ değerleri için sırasıyla $T=0.4$, $T=0.425$ ve $T=0.45$ sıcaklık noktasında magnetik alana karşı davranışları gösterilmektedir. Sistemin zorlayıcı alan noktaları sıcaklık artışına göre sırasıyla

$H_c = \pm 0.098$, $H_c = \pm 0.079$ ve $H_c = \pm 0.059$ 'dur. Çevrimlerde, $H > H_{c+}$ ve $H < H_{c-}$ olduğunda magnetik tersinme olayları meydana gelmekte ve bu tersinmelere karşılık öz, yelek ve nanotel sistemine ait alınganlıklar geniş bir maksimum yapmaktadırlar.



Şekil 2.11. Ferromagnetik (a-c) ve antiferromagnetik (d-f) boyuna silindirik öz/yelek spin-1 Ising nanotel sisteminin magnetik tersinme olayları.

2.3. Enine Silindirik Öz/Yelek Spin-1 Ising Nanoteli

Enine silindirik öz/yelek spin-1 Ising nanotel sisteminin termal özellikleri (mıknatıslanma, öz ısı, iç enerji ve alınganlık) sıcaklık ve dış magnetik alan bağımlılığı ferromagnetik ve antiferromagnetik durumlar için incelendi. Ayrıca, öz/yelek etkileşim parametresinin ve enine kristal alanın termal özelliklere etkisi ayrıntılı olarak incelendi. Elde edilen teorik sonuçlar aşağıda ayrıntılı olarak verilmektedir.

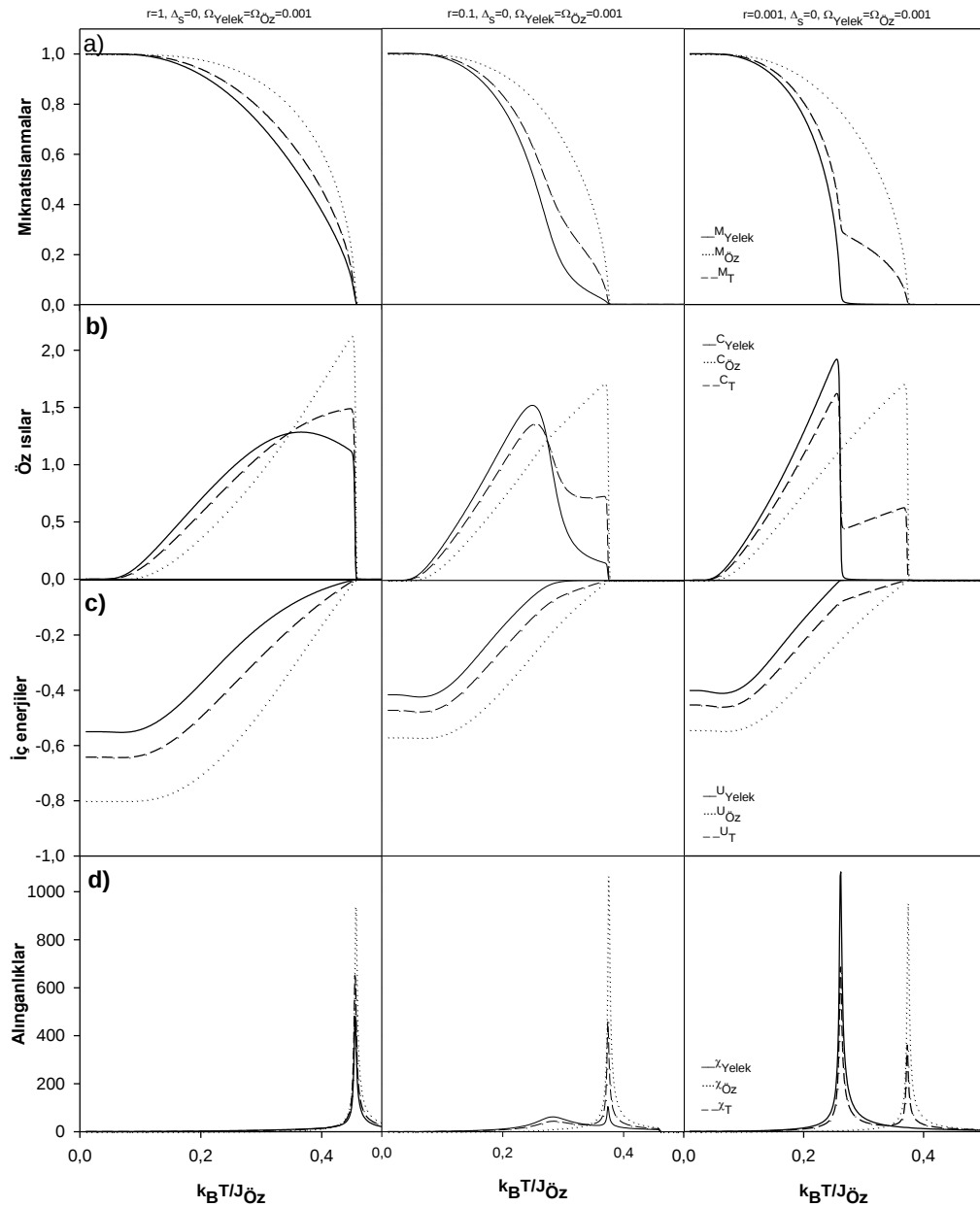
2.3.1. Ferromagnetik Durum

Enine silindirik öz/yelek spin-1 Ising nanotel sisteminin termal özelliklerinin (mıknatıslanma, öz ısı, iç enerji ve alınganlık) sıcaklık ve dış magnetik alan bağımlılığı farklı öz/yelek etkileşim parametresi ve enine kristal alan değerleri için ferromagnetik ($r>0$) durum için incelendi. Sistemin faz geçiş türleri ve kritik sıcaklık noktaları belirlendi. Farklı sabit sıcaklıklarda sistemin termal özelliklerinin dış magnetik alana karşı davranışları incelendi.

2.3.1.1. Termal Özelliklerin Sıcaklığa Bağımlılığı

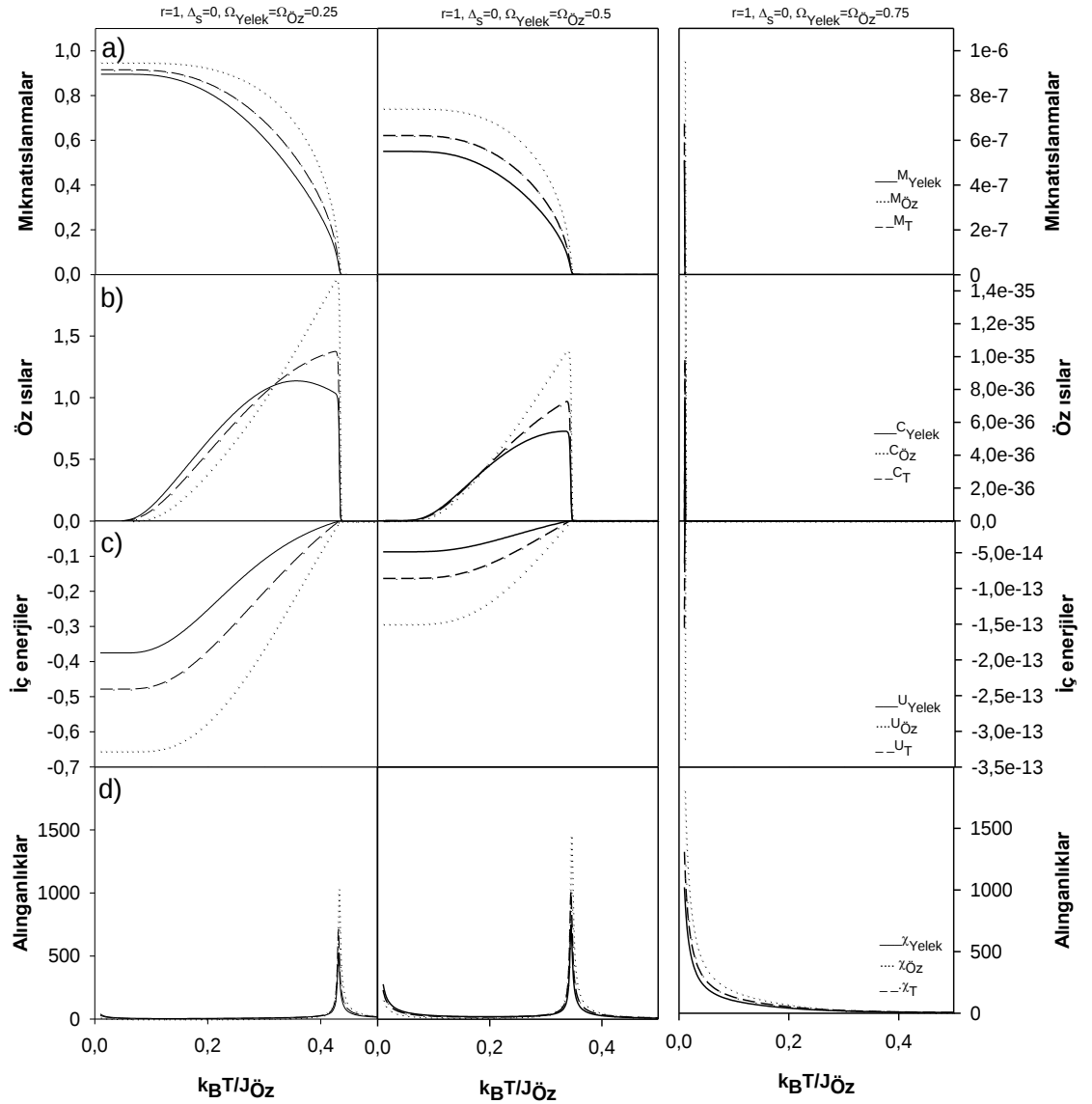
Termal özelliklerin sıcaklık ve öz/yelek parametresine bağımlılığı $r=1, 0.1, 0.001$, $\Delta_s=0$ ve $\Omega_{\text{Yelek}}=\Omega_{\text{Öz}}=0.001$ değerleri için Şekil 2.12.'de gösterildi. Şekil 2.12.(a) öz, yelek ve nanotel sisteminin mıknatıslanmalarının sıcaklık ve öz/yelek parametresine bağımlılığını göstermektedir. Nanotel sistemi ikinci-dereceden faz geçişi yaparak ferromagnetik fazdan paramagnetik faza geçer. Kritik sıcaklık noktaları $r=1$ ve 0.1 değerleri için sırasıyla, $T_c=0.461$ ve 0.379 'dur. $r=0.001$ (zayıf etkileşme) değeri için ise sistemin öz ve yeleği birbirinden ayrık davranış sergiler ve nanotel sisteminin özü $T_c^{\text{Öz}}=0.262$, yeleği $T_c^{\text{Yelek}}=0.378$ kritik sıcaklık noktasında faz geçişi yapar. Şekil 2.12.(b)'de nanotel sisteminin öz ısıları kritik sıcaklık noktalarına kadar sıcaklık arttıkça artar ve kritik sıcaklık noktasında belirgin bir pik yaparlar. $T>T_c$ 'de, sistemin öz ısıları sıfır olmaktadır. Öz ve yelek arasındaki etkileşim azaldıkça öz ve yeleğe ait öz ısı özellikleri birbirinden ayrık davranmakta ve yelek öz ısı özün öz ısısından daha erken sıfır olmaktadır. Şekil 2.12.(c)'de sistemin iç enerjileri gösterilmektedir. İç enerjiler sıcaklık arttıkça artar ve kritik sıcaklık noktasında sıfır olur. Zayıf etkileşmeler

($r=0.001$) için yeleğin iç enerjisi özün iç enerjisinden daha erken sıfır olmaktadır. Şekil 2.12.(d)'de nanotel sisteminin alınganlık özellikleri gösterilmektedir. Sistemin alınganlıkları $r=1$ için kritik sıcaklık noktasında belirgin bir pik yapar. $r=0.1$ için yelek ve nanotel sisteminin alınganlığı $T < T_c$ 'de, geniş bir maksimuma sahip olur. $r=0.001$ ise öz ve yelek alınganlığı kendilerine ait kritik sıcaklık noktalarında belirgin bir pik yapar. Nanotel sistemi ise bir öze diğeri yeleğe ait kritik sıcaklık noktalarında iki ayrı pik yapar.



Şekil 2.12. Ferromagnetik enine silindirik öz/yelek spin-1 Ising nanotel sisteminin termal özelliklerinin sıcaklık bağımlılığı.

Şekil 2.13.'de enine kristal alanın, nanotel sisteminin termal özellikleri üzerine etkisi gösterilmektedir. Şekil 2.13.(a)'da mıknatıslanmalar enine kristal alan arttıkça azalmaktadır. Sistem $\Omega_{\text{Yelek}}=\Omega_{\text{Öz}}=0.75$ değeri için tamamen paramagnetik davranış sergilemektedir. Şekil 2.13.(b)'de öz ısıların maksimumları enine kristal alan arttıkça azalır ve sıfır olur. Şekil 2.13.(c)'de sistemin iç enerjileri, mıknatıslanma ve öz ısı özelliklerinin tersine, enine kristal alan arttıkça artar ve sıfır olur. Şekil 2.13.(d)'de enine kristal alan arttıkça öz, yelek ve nanotel sisteminin ferromagnetik fazına ait alınganlık pikleri kaybolmakta ve $\Omega_{\text{Yelek}}=\Omega_{\text{Öz}}=0.75$ değeri için sadece paramagnetik faza ait alınganlık eğrisi gözlenmektedir.

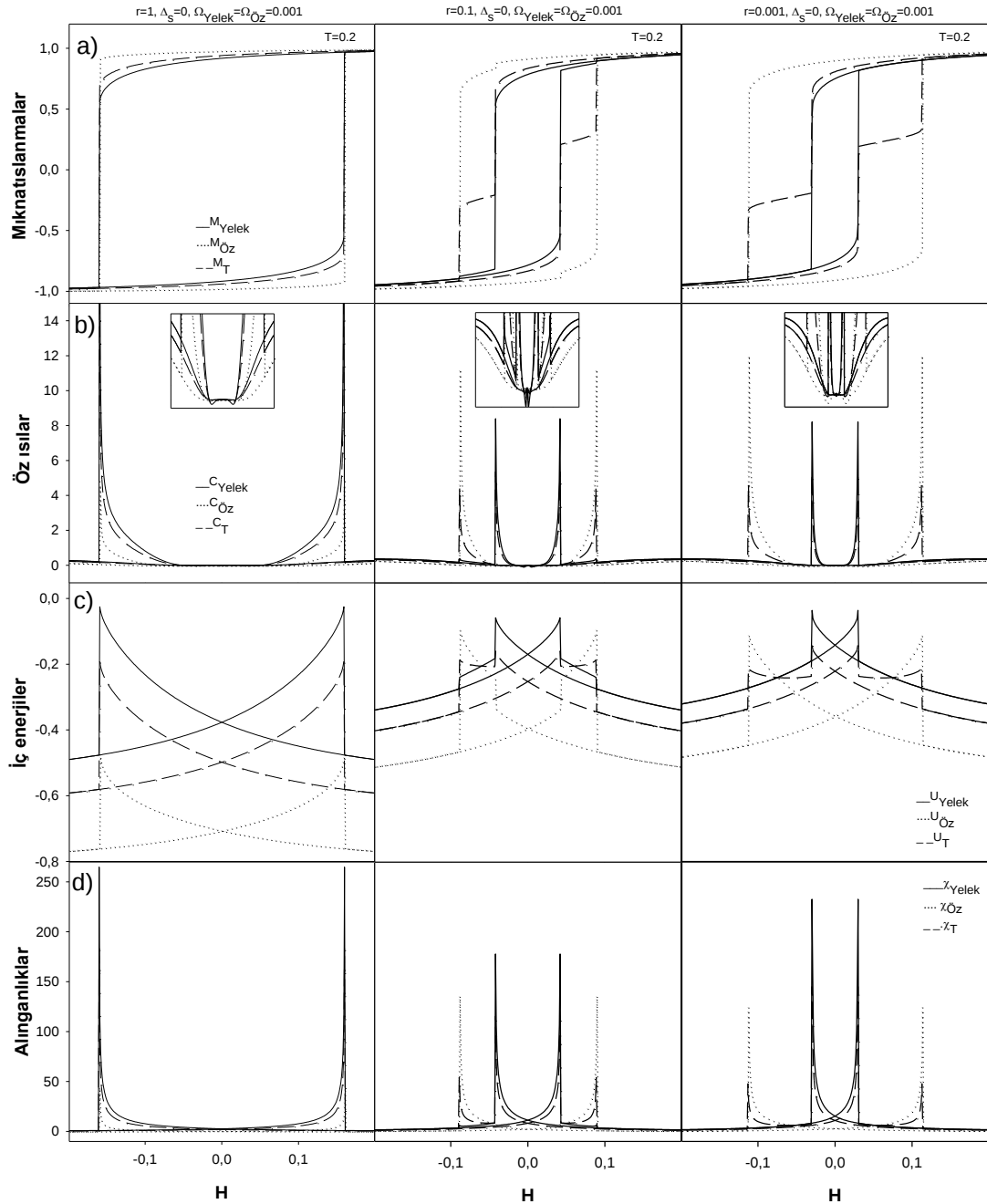


Şekil 2.13. Ferromagnetik enine silindirik öz/yelek spin-1 Ising nanotel sisteminin termal özelliklerinin sıcaklık ve enine kristal alan bağımlılığı.

2.3.1.2. Termal Özelliklerin Dış Magnetik Alana Bağımlılığı

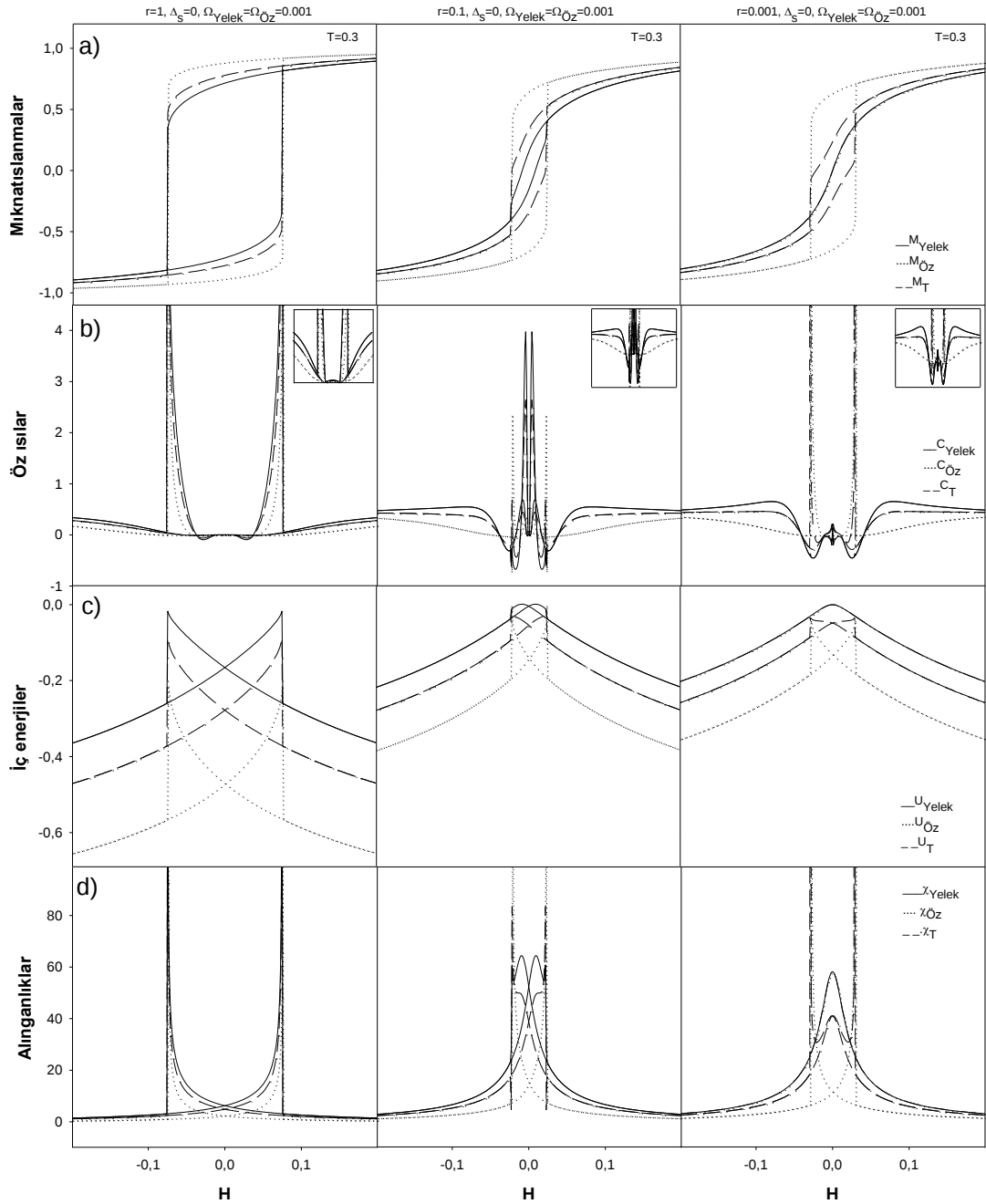
Enine silindirik öz/yelek spin-1 Ising nanotel sisteminin termal özelliklerinin (mıknatıslanma, öz ısı, iç enerji ve alınganlık) dış magnetik alan ve öz/yelek etkileşim parametresine bağımlılığı $r=1, 0.1, 0.001$, $\Delta_s=0$ ve $\Omega_{Yelek}=\Omega_{Öz}=0.001$ değerleri için farklı sabit sıcaklıklarda ($T=0.2, 0.3$ ve 0.4) incelendi. Nanotel sisteminin zorlayıcı alan noktaları belirlendi. Şekil 2.14.(a)'da öz, yelek ve nanotel sistemine ait mıknatıslanmaların $T=0.2$ sıcaklık noktasında farklı öz/yelek etkileşim parametresi değerleri ($r=1, 0.1, 0.001$) için dış magnetik alana karşı davranışları gösterilmektedir. Sistemin güçlü öz/yelek etkileşim parametresi ($r=1$) için zorlayıcı alan noktası $H_c=0.16$ 'dır. Zayıf öz/yelek etkileşim parametresi ($r=0.1$ ve 0.001) için sistemin öz ve yeleği birbirinden farklı zorlayıcı alan noktalarına sahip olmaktadır. Öz/yelek etkileşim parametresinin $r=0.1$ değeri için öz ve yeleğin zorlayıcı alan noktaları sırasıyla, $H_c^{\text{Öz}}=0.089$ ve $H_c^{\text{Yelek}}=0.042$ 'dir. Öz/yelek etkileşim parametresinin $r=0.001$ değeri için öz ve yeleğin zorlayıcı alan noktaları sırasıyla, $H_c^{\text{Öz}}=0.113$ ve $H_c^{\text{Yelek}}=0.003$ 'tür. Şekil 2.14.(b)'de, nanotel sisteminin öz ısılarının dış magnetik alana karşı davranışları gösterilmektedir. Güçlü öz/yelek etkileşim parametresi ($r=1$) için sistemin öz ısıları zorlayıcı alan noktalarında belirgin simetrik bir pik yaparlar. Zayıf öz/yelek etkileşim parametresi ($r=0.1$ ve 0.001) için sistemin öz ve yeleğine ait öz ısıları kendilerine ait zorlayıcı alan noktalarında birbirinden ayırık belirgin bir pik yaparlar. Nanotel sisteminin öz ısı ise, öz ve yeleğe ait zorlayıcı alan noktalarında iki adet birbirinden ayırık belirgin piklere sahip olur. Şekil 2.14.(b)'deki küçük ek şekillere dikkat edilirse nanotel sisteminin öz ısıları dış magnetik alana karşı “gül deseni” yapısı oluştururlar. Şekil 2.14.(c)'de, nanotel sisteminin iç enerjilerinin dış magnetik alana karşı davranışları gösterilmektedir. Nanotel sisteminin iç enerjileri güçlü öz/yelek etkileşim parametresi ($r=1$) için sistemin zorlayıcı alan noktasında belirgin bir pik yaparlar. H_{c+} ve H_{c-} zorlayıcı alan noktalarından sonra monoton bir şekilde azalır. Zayıf öz/yelek etkileşim parametresi ($r=0.1$ ve 0.001) için sistemin öz ve yeleği birbirinden farklı zorlayıcı alan noktalarına sahip olmasından dolayı, öz ve yeleğe ait iç enerji özellikleri kendilerine ait zorlayıcı alan noktalarında belirgin ayırık bir pik yaparlar. Nanotel sisteminin iç enerjisi ise biri öze diğeri yeleğe ait zorlayıcı alan noktasında olmak üzere iki birbirinden ayırık belirgin pike sahip olmaktadır. Şekil 2.14.(d)'de, nanotel sisteminin alınganlıklarının dış magnetik alana karşı davranışları gösterilmektedir. Nanotel

sisteminin alınganlık özellikleri, $r=1$ için H_c noktalarının belirgin bir pik yapmaktadırlar. $r=0.1$ ve 0.001 için sistemin öz ve yeleği kendilerine ait H_c noktalarında birbirinden ayrık bir pike sahip olmaktadır. Nanotel sisteminin alınganlığı ise, öz ve yeleğe ait H_c noktalarında birbirinden ayrık iki adet piklere sahiptir. Alınganlık özellikleri H_{c+} ve H_{c-} noktalarından sonra monoton bir şekilde azalmaktadırlar.



Şekil 2.14. $T=0.2$ 'de ferromagnetik enine silindirik öz/yelek spin-1 Ising nanotel sisteminin termal özelliklerinin dış magnetik alan bağımlılığı.

Şekil 2.15.'de, nanotel sisteminin termal özelliklerinin $T=0.3$ sıcaklık noktasında dış magnetik alana karşı davranışları gösterilmektedir. Sistemin güçlü öz/yelek etkileşim parametresi ($r=1$) için zorlayıcı alan noktası $H_c=0.075$ 'dir. Öz/yelek etkileşim parametresinin $r=0.1$ değeri için öz ve yeleğin zorlayıcı alan noktaları sırasıyla, $H_c^{\text{Öz}}=0.009$ ve $H_c^{\text{Yelek}}=0.022$ 'dir.

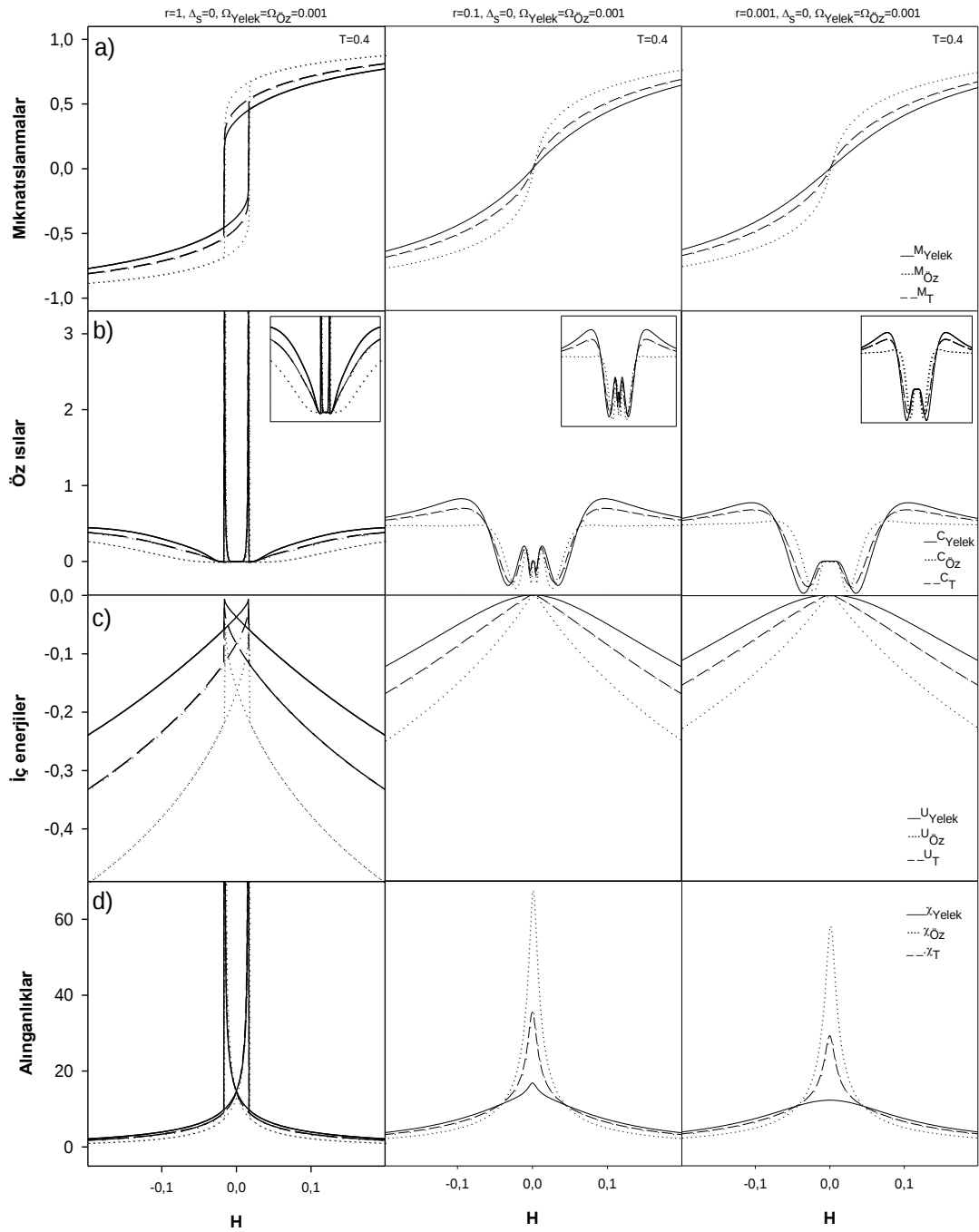


Şekil 2.15. $T=0.3$ 'de ferromagnetik enine silindirik öz/yelek spin-1 Ising nanotel sisteminin termal özelliklerinin dış magnetik alan bağımlılığı.

Öz/yelek etkileşim parametresinin $r=0.001$ değeri için sistem birbirinden farklı üç ayrık zorlayıcı alan noktalarına sahip olmaktadır. Öz, yelek ve nanotel sisteminin birbirlerinden ayrık zorlayıcı alan noktaları sırasıyla $H_c^{\text{Öz}}=0.03$, $H_c^{\text{Yelek}}=0.0$ ve $H_c^N=0.021$ 'dir. Enine silindirik öz/yelek spin-1 Ising nanotel sistemi güçlü öz/yelek etkileşim parametresi ($r=1$) için bir zorlayıcı alan noktasına ($H_c^{\text{Öz}}=H_c^{\text{Yelek}}=H_c^N$) sahip olmaktadır. Zayıf öz/yelek etkileşim parametresi ($r=0.1$ ve 0.001) için ise birbirinden farklı iki ($H_c^{\text{Öz}} \neq H_c^{\text{Yelek}}$) veya üç ($H_c^{\text{Öz}} \neq H_c^{\text{Yelek}} \neq H_c^N$) farklı zorlayıcı alan noktasına sahip olmaktadır. Buradan, nanotel sisteminin zorlayıcı alanları güçlü öz/yelek etkileşim parametresi ($r=1$) için tekli zorlayıcı alan davranışı sergiler. Zayıf öz/yelek etkileşim parametresi ($r=0.1$ ve 0.001) için ise ikili veya üçlü zorlayıcı alan davranışı sergilemektedir. Şekil 2.15.(b)'de, $T=0.3$ sıcaklık noktasında nanotel sisteminin öz ısılarının dış magnetik alana karşı davranışı gösterilmektedir. Güçlü öz/yelek etkileşim parametresi ($r=1$) için sistemin öz ısıları zorlayıcı alan noktalarında belirgin bir pik yaparken zayıf öz/yelek etkileşim parametresi ($r=0.001$) için, yeleğe ait histerezis çevriminin $T=0.3$ sıcaklık noktasında kaybolmasından dolayı ($H_c^{\text{Yelek}}=0.0$) yeleğe ait öz ısı pikide kaybolmaktadır. Öz ve nanotel sisteminin öz ısıları ise kendilerine ait zorlayıcı alan noktalarında belirgin bir pik yapmaktadırlar. Şekil 2.15.(c)'de, öz ve nanotel sisteminin iç enerjisi güçlü ($r=1$) ve zayıf ($r=0.1$ ve 0.001) öz/yelek etkileşim parametresi için zorlayıcı alan noktalarında belirgin bir pike sahip olurken, yeleğin iç enerjisi zayıf ($r=0.1$) öz/yelek etkileşim parametresi için H_c^{Yelek} zorlayıcı alan noktasında geniş iki maksimuma sahip olmaktadır. Bununla birlikte, yeleğin iç enerjisi zayıf ($r=0.001$) öz/yelek etkileşim parametresi için $H_c^{\text{Yelek}}=0.0$ civarında bir tek geniş maksimuma sahip olmaktadır. Şekil 2.15.(d)'de, öz ısı ve iç enerji özelliklerine benzer şekilde, nanotel sisteminin alınganlık özellikleri güçlü öz/yelek etkileşim parametresi ($r=1$) için zorlayıcı alan noktalarında belirgin bir pik yapmaktadırlar. Zayıf öz/yelek etkileşim parametresi ($r=0.1$ ve 0.001) için ise öz ve yelek alınganlıkları belirgin bir pik yaparken, yelek alınganlığı $r=0.1$ için iki maksimuma ve $r=0.001$ için $H_c^{\text{Yelek}}=0.0$ civarında bir tek geniş maksimuma sahip olmaktadır. Bu nedenle, nanotel sistemi de $H_c^{\text{Yelek}}=0.0$ civarında ek bir maksimuma sahip olmaktadır.

Şekil 2.16.'da, nanotel sisteminin termal özelliklerinin $T=0.4$ sıcaklık noktasında dış magnetik alana karşı davranışları gösterilmektedir. Sistemin güçlü öz/yelek etkileşim parametresi ($r=1$) için zorlayıcı alan noktası $H_c=0.016$ 'dır. Öz ve yeleğin zorlayıcı alan

noktaları $r=0.1$ ve 0.001 değeri için $H_c^{\text{Öz}}=H_c^{\text{Yelek}}=H_c^N=0.0$ 'dır. $T=0.4$ 'de nanotel sisteminin histerezis çevrimlerinin alanlarının kaybolmasından dolayı nanotel sisteminin öz ısı pikleri kaybolmaktadır ve iç enerjiler $H_c=0.0$ civarında geniş maksimumlara sahip olmaktadır. Nanotel sisteminin alınganlık pikleri ise $H_c=0.0$ civarında üst üste binerek tek bir maksimuma sahip olmaktadır.



Şekil 2.16. $T=0.4$ 'de ferromagnetik enine silindirik öz/yelek spin-1 Ising nanotel sisteminin termal özelliklerinin dış magnetik alan bağımlılığı.

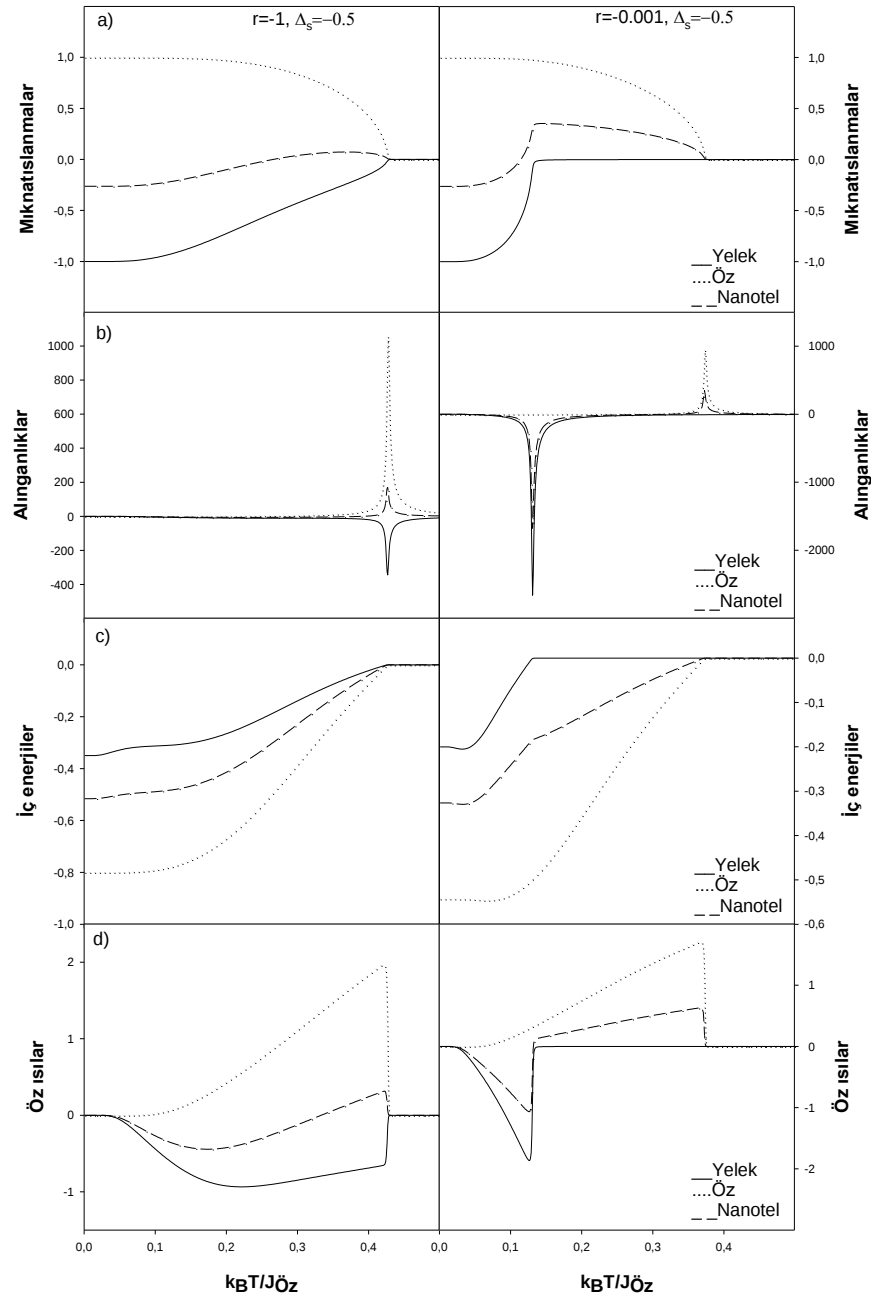
2.3.2. Antiferromagnetik Durum

Enine silindirik öz/yelek spin-1 Ising nanotel sisteminin termal özelliklerinin (mıknatıslanma, öz ısı, iç enerji ve alınganlık) sıcaklık ve dış magnetik alan bağımlılığı farklı öz/yelek ve enine kristal alan değerleri için antiferromagnetik ($r < 0$) durum için incelendi. Sistemin faz geçiş türleri ve kritik sıcaklık noktaları belirlendi. Farklı sabit sıcaklıklarda termal özelliklerin dış magnetik alana karşı davranışları incelendi.

2.3.2.1. Termal Özelliklerin Sıcaklığa Bağımlılığı

Termal özelliklerin sıcaklık ve öz/yelek parametresine bağımlılığı $r = -1, -0.001, \Delta_s = -0.5$ ve $\Omega_{\text{Yelek}} = \Omega_{\text{Öz}} = 0.001$ değerleri için Şekil 2.17.'de gösterilmektedir. Şekil 2.17.(a) öz, yelek ve nanotel sisteminin mıknatıslanmalarının sıcaklık ve öz/yelek parametresine bağımlılığını göstermektedir. Nanotel sistemi ikinci-dereceden faz geçişi yaparak antiferromagnetik fazdan paramagnetik faza geçer. Kritik sıcaklık noktası güçlü öz/yelek etkileşim parametresi ($r = 1$) için, $T_c = 0.427$ 'dur. Zayıf öz/yelek etkileşim parametresi ($r = 0.001$) için, antiferromagnetik nanotel sisteminin öz ve yeleği birbirinden farklı sıcaklık noktalarında faz geçişi yapar. Öz ve yeleğe ait kritik sıcaklık noktası sırasıyla, $T_c^{\text{Öz}} = 0.373$, yeleği $T_c^{\text{Yelek}} = 0.131$ 'dir. Öz mıknatıslanması sıcaklık arttıkça monoton bir şekilde azalır ve kritik sıcaklık noktasında sıfır olur. Yelek mıknatıslanması sıcaklık arttıkça artar ve kritik sıcaklığı noktasında sıfır olur. Nanotel sisteminin mıknatıslanması önce sıcaklık arttıkça artar ve telafi sıcaklık noktasında sıfır olur. Telafi sıcaklığından sonra geniş bir maksimum yaparak kritik sıcaklık noktasında sıfır olur. Şekil 2.17.(b)'de öz, yelek ve nanotel sisteminin alınganlık özelliklerinin sıcaklığa karşı davranışı gösterilmektedir. Güçlü öz/yelek etkileşim parametresi ($r = 1$) için öz ve yelek alınganlıkları kritik sıcaklık noktasında birbirine zıt yönde bir pik yapar ve kritik sıcaklık noktasından sonra monoton bir şekilde sıfıra gider. Nanotel sisteminin alınganlığı kritik sıcaklık noktasında, öz ve yelek alınganlığına göre daha küçük bir pik yapmaktadır. Zayıf öz/yelek etkileşim parametresi ($r = 0.001$) için ise öz ve yelek alınganlıkları kendilerine ait kritik sıcaklık noktasında belirgin bir pik yaparlar. Nanotel sisteminin alınganlığı ise biri özün diğeri yeleğin kritik sıcaklık noktasında olmak üzere iki adet pik yapmaktadır. Şekil 2.17.(c)'de, nanotel sisteminin iç enerjilerinin sıcaklığa karşı davranışı gösterilmektedir. Öz, yelek ve nanotel sisteminin iç enerjileri $r = 1$ için

sıcaklık arttıkça monoton bir şekilde artmakta ve kritik sıcaklık noktasında sıfır olmaktadır. Yeleğin iç enerjisi $r=0.001$ için özün iç enerjisinden daha erken sıfır olmaktadır. Nanotel sisteminin iç enerjisi ise yeleğin kritik sıcaklık noktasında bir dalgalanma yapmakta ve özün kritik sıcaklık noktasında sıfır olmaktadır. Şekil 2.17.(d)'de, nanotel sisteminin öz ısısı mıknatıslanma gibi bir telafi sıcaklık noktasına sahiptir.



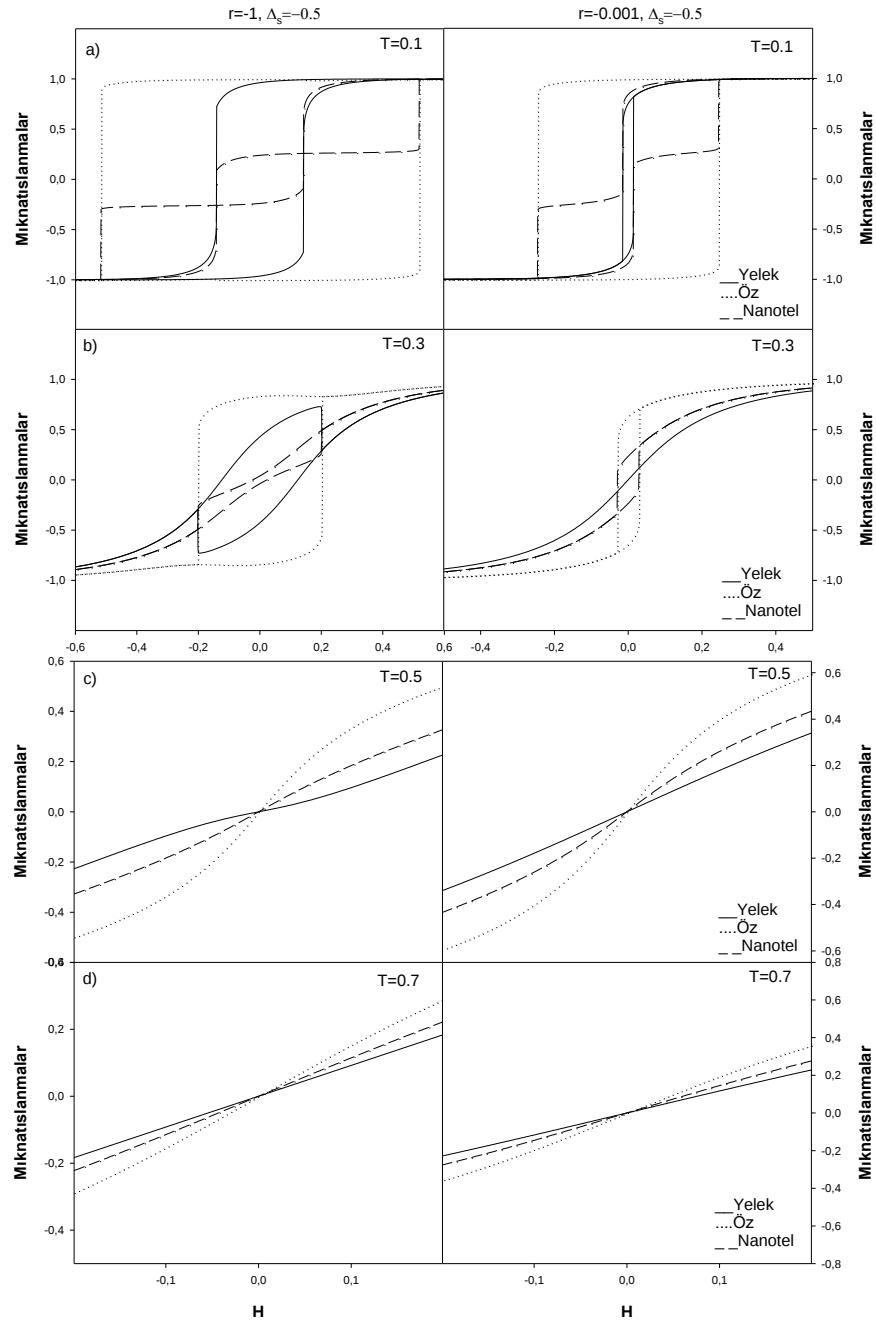
Şekil 2.17. Antiferromagnetik enine silindirik öz/yelek spin-1 Ising nanotel sisteminin termal özelliklerinin sıcaklık bağımlılığı.

2.3.2.2. Termal Özelliklerin Dış Magnetik Alana Bağımlılığı

Enine silindirik öz/yelek spin-1 Ising nanotel sisteminin termal özelliklerinin (mıknatıslanma, öz ısı, iç enerji ve alınganlık) dış magnetik alan ve öz/yelek etkileşim parametresine bağımlılığı $r=-1$, -0.001 , $\Delta_s=-0.5$ ve $\Omega_{Yelek}=\Omega_{Öz}=0.001$ değerleri için farklı sabit sıcaklıklarda ($T=0.1, 0.3, 0.5$ ve 0.7) incelendi. Nanotel sisteminin zorlayıcı alan noktaları belirlendi. Şekil 2.18.(a)'da, öz, yelek ve nanotel sistemine ait mıknatıslanmaların $T=0.1, 0.3, 0.5$ ve 0.7 sıcaklık noktalarında farklı öz/yelek etkileşim parametresi değerleri ($r=-1$ ve -0.001) için dış magnetik alana karşı davranışları gösterilmektedir. Güçlü öz/yelek etkileşim parametresi ($r=-1$) için $T=0.1, 0.3, 0.5$ ve 0.7 sıcaklık noktalarında özün zorlayıcı alan noktaları sırasıyla, $H_c^{Öz}=0.517, 0.202, 0.0$ ve 0.0 'dır. Yelek zorlayıcı alan noktaları $T=0.1$ için $H_c^{Yelek}=0.142$, $T=0.3$ için yelek iki farklı zorlayıcı alan noktasına sahip olmakta olup bunlar, $H_{c1}^{Yelek}=0.123$ ve $H_{c2}^{Yelek}=0.202$ 'dir. Şekil 2.18.(c) ve (d)'de, $T=0.5$ ve 0.7 için yelek zorlayıcı alan noktaları $H_{c1}^{Yelek}=0.0$ 'dır. Nanotel sisteminin zorlayıcı alan noktaları $T=0.1$ için $H_{c1}^N=0.142$ ve $H_{c2}^N=0.517$, $T=0.3$ için $H_{c1}^N=0.023$ ve $H_{c2}^N=0.202$ 'dir. $T=0.5$ ve 0.7 için $H_c^N=0.0$ 'dır. Zayıf öz/yelek etkileşim parametresi ($r=-0.001$) için $T=0.1, 0.3, 0.5$ ve 0.7 sıcaklık noktalarında özün zorlayıcı alan noktaları sırasıyla, $H_c^{Öz}=0.245, 0.03, 0.0$ ve 0.0 'dır. Yelek zorlayıcı alan noktaları $T=0.1$ için $H_c^{Yelek}=0.015$, $T=0.3, 0.5$ ve 0.7 için yelek zorlayıcı alan noktaları $H_c^{Yelek}=0.0$ 'dır. Nanotel sisteminin zorlayıcı alan noktaları $T=0.1$ için $H_{c1}^N=0.015$ ve $H_{c2}^N=0.245$, $T=0.3$ için $H_c^N=0.03$ 'dir. $T=0.5$ ve 0.7 için $H_c^N=0.0$ 'dır. Şekil 2.18.(a)'da, nanotel sisteminin histerezis çevrimi güçlü öz/yelek etkileşim parametresi ($r=-1$) için üçlü histerezis davranışı, öz/yelek etkileşim parametresi ($r=-0.001$) için ise ikili histerezis davranışı sergilemektedir. Histerezis çevrimlerinin alanları sıcaklık arttıkça kaybolmaktadır. Zorlayıcı alan noktaları sıcaklık arttıkça azalmakta ve $T>T_c$ sıcaklık noktalarında sıfır olmaktadır. Ayrıca, paramagnetik bölgede ($T>>T_c$) histerezis çevrimleri doğrusal düz bir çizgi oluşturmaktadır.

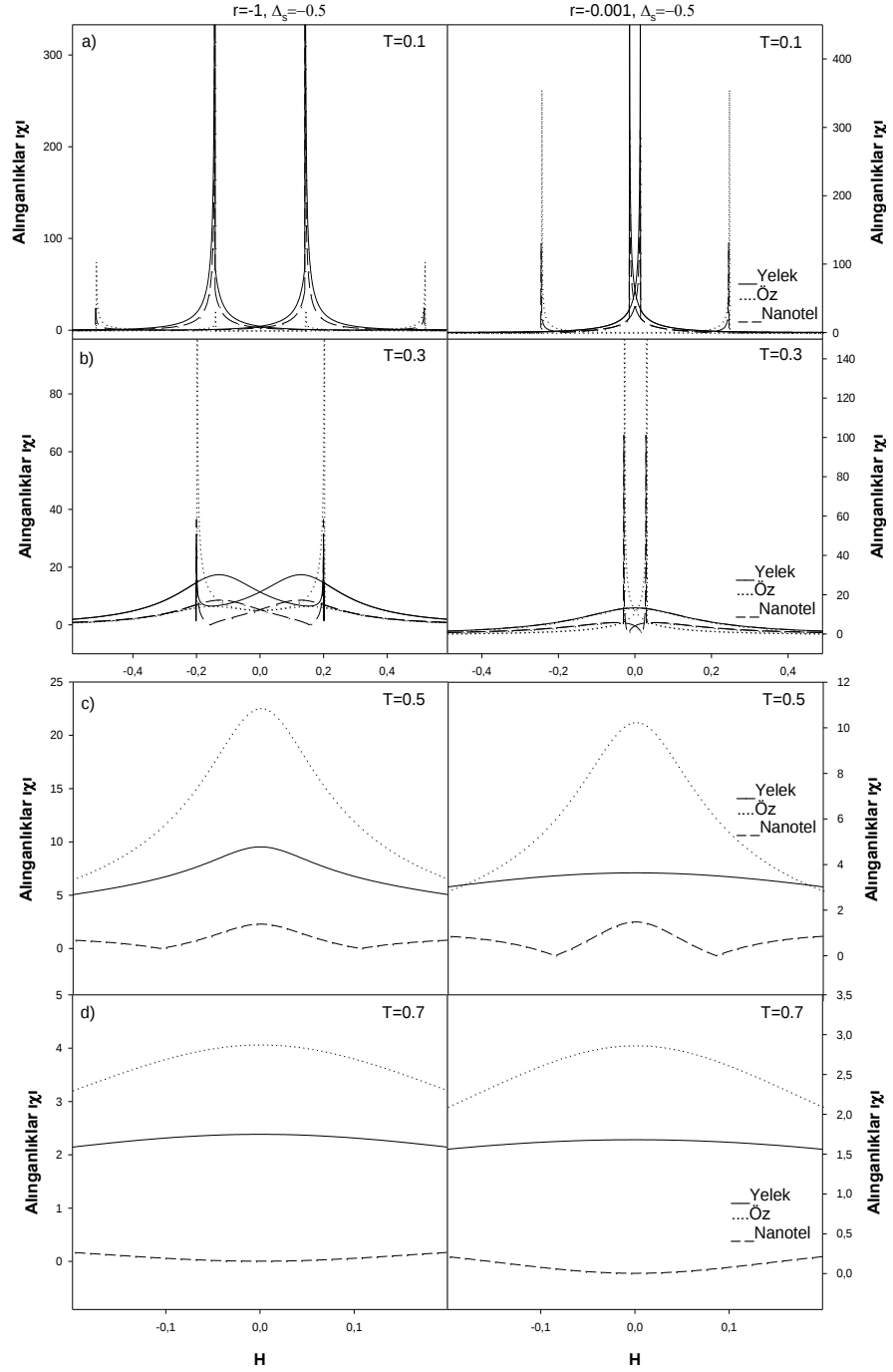
Şekil 2.19.'da öz, yelek ve nanotel sisteminin alınganlık özelliklerinin güçlü ($r=-1$) ve zayıf ($r=-0.001$) öz/yelek etkileşim parametresi için farklı sabit sıcaklık noktalarında dış magnetik alana karşı davranışları gösterilmektedir. Şekil 2.19.(a)'da, $T=0.1$ sıcaklık noktası için nanotel sisteminin öz ve yeleğinin alınganlığı kendilerine ait zorlayıcı alan noktasında belirgin bir pik yapar. Nanotel sistemi ise biri özün diğeri yeleğin zorlayıcı

alan noktasında olmak üzere iki adet belirgin pik yapar. Şekil 2.19.(b)'de $T=0.3$ sıcaklık noktasında, yelek ve nanotel sisteminin alınganlığı $r=-1$ için H_{c2}^{Yelek} zorlayıcı alan noktasında bir pik ve H_{c1}^{Yelek} zorlayıcı alan noktasında geniş bir maksimum yapar. Özün alınganlığı ise $H_c^{\text{Öz}}$ noktasında pik yapar. Öz ve nanotel sisteminin alınganlığı $r=-0.001$ için zorlayıcı alan noktalarında belirgin bir yapar. Yelek alınganlığı ise, çevrimin kaybolmasından dolayı $H_c^{\text{Yelek}}=0.0$ civarında geniş bir maksimuma sahip olmaktadır.



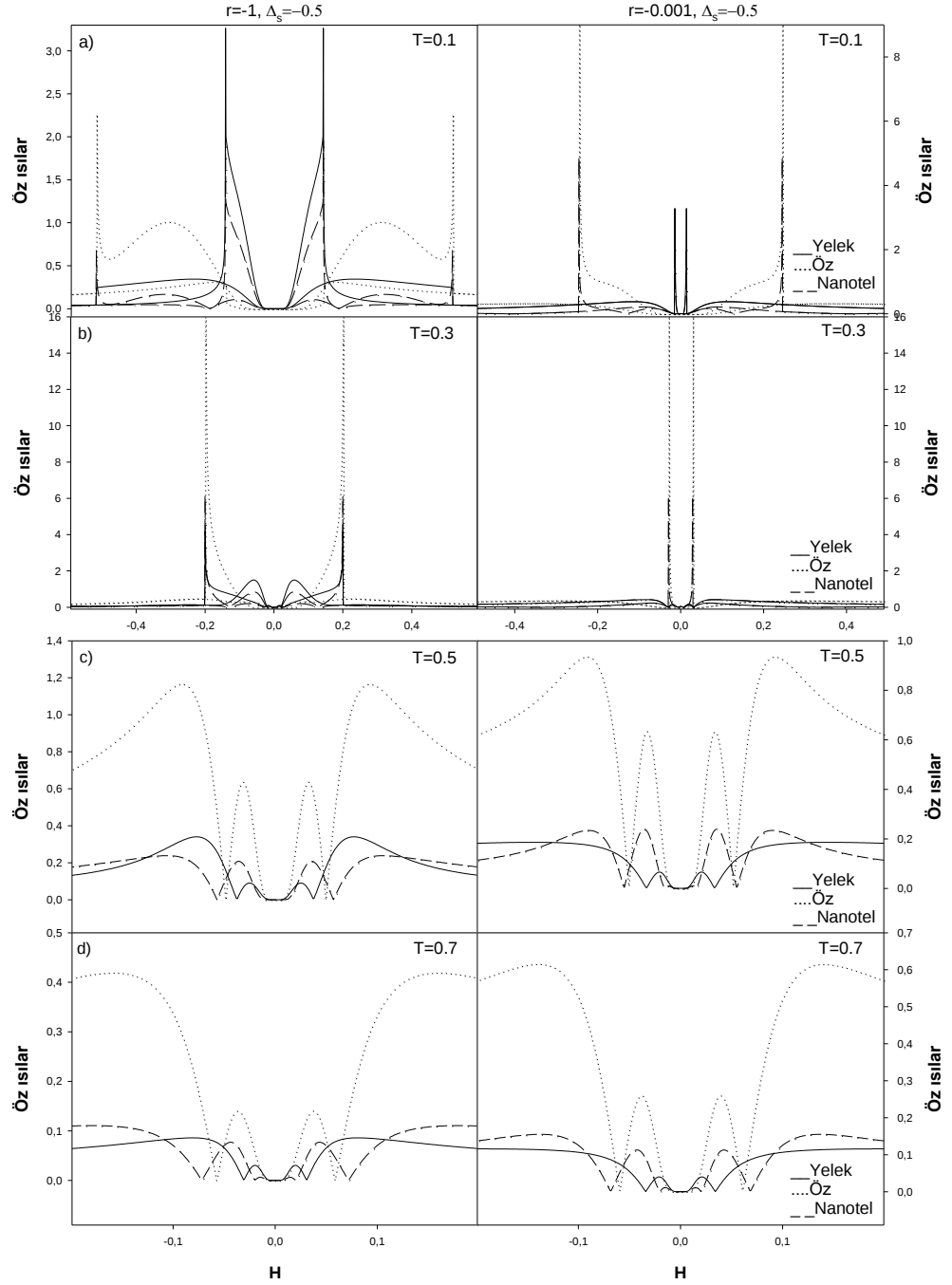
Şekil 2.18. Farklı sıcaklıklarda antiferromagnetik enine silindirik öz/yelek spin-1 Ising nanotel sisteminin mıknatıslanmalarının dış magnetik alan bağımlılığı.

Şekil 2.19.(c) ve (d)'de, $T=0.5$ ve 0.7 sıcaklık noktalarında öz yelek ve nanotel sisteminin histerezis çevriminin alanının kaybolmasından dolayı, nanotel sisteminin alınganlıkları $H_c=0.0$ noktası civarında geniş bir maksimum yapmaktadır. Alınganlık maksimumları sıcaklık arttıkça doğrusal bir davranış sergilemekte ve çok yüksek sıcaklıklarda sıfır olmaktadır (Şekil 2.23.(b)).



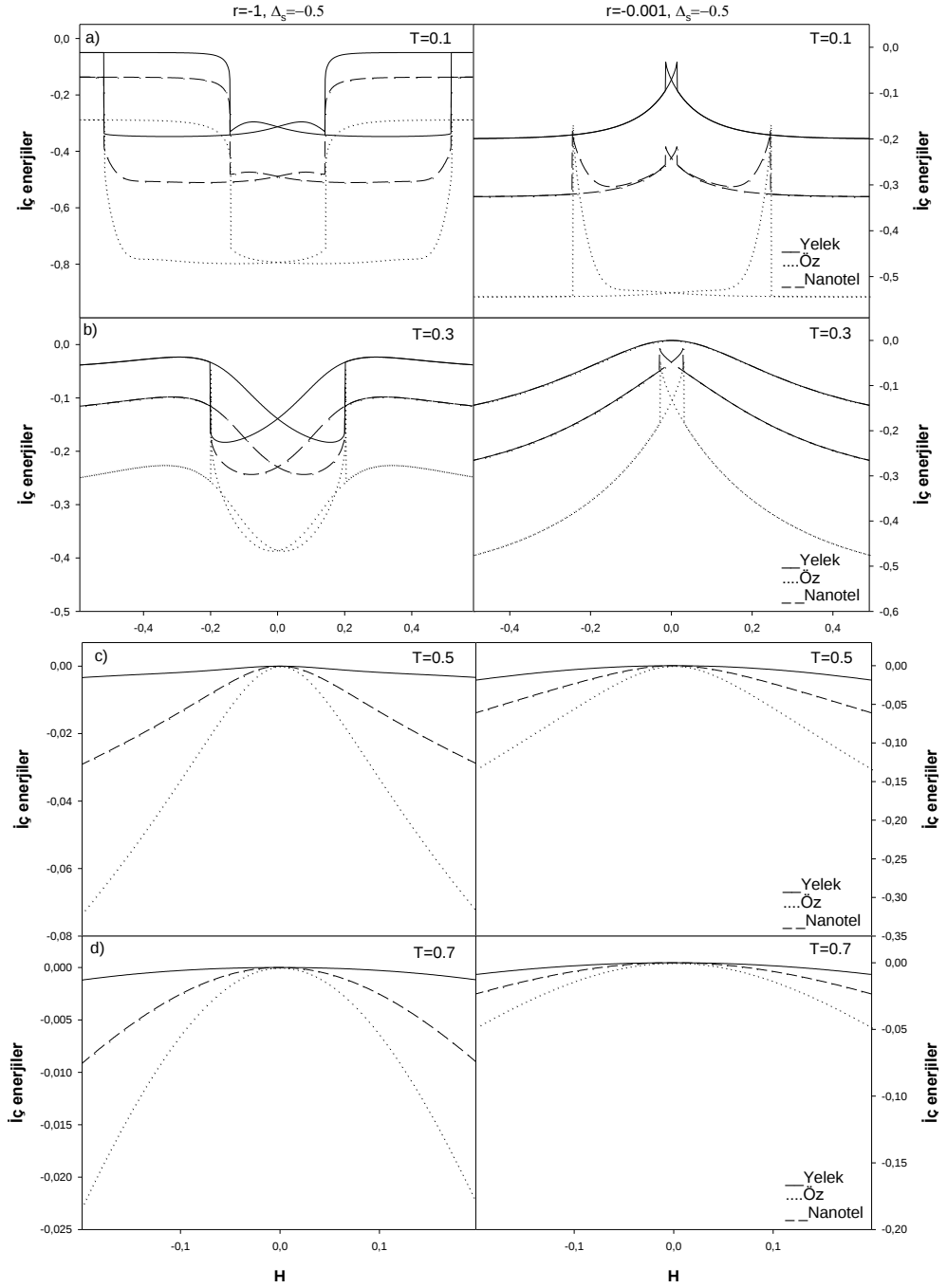
Şekil 2.19. Farklı sıcaklıklarda antiferromagnetik enine silindirik öz/yelek spin-1 Ising nanotel sisteminin alınganlıklarının dış magnetik alan bağımlılığı.

Şekil 2.20.'de öz, yelek ve nanotel sisteminin öz ısılarının dış magnetik alana karşı davranışları gösterilmektedir. Öz, yelek ve nanotel sistemine ait öz ısı özellikleri, alınganlık özelliklerine benzer şekilde kendilerine ait zorlayıcı alan noktalarında belirgin bir pik yaparlar. Pikler arası uzaklık, histerezis alanları gibi sıcaklık arttıkça azalmaktadır.



Şekil 2.20. Farklı sıcaklıklarda antiferromagnetik enine silindirik öz/yelek spin-1 Ising nanotel sisteminin öz ısılarının dış magnetik alan bağımlılığı.

Şekil 2.21.'de, öz, yelek ve nanotel sisteminin iç enerjilerinin dış magnetik alana karşı davranışları gösterilmektedir. Şekil 2.21.(a) ve (b)'de, iç enerjiler $T=0.1$ ve 0.3 sıcaklık noktalarında H_c 'de pik yaparlar. Şekil 2.21.(c) ve (d)'de, $T=0.5$ ve 0.7 sıcaklık noktalarında ise iç enerjiler kuyu davranışı sergilerler. Sıcaklık arttıkça iç enerji kuyularının derinlikleri azalır ve sıfır olur.



Şekil 2.21. Farklı sıcaklıklarda antiferromagnetik enine silindirik öz/yelek spin-1 Ising nanotel sisteminin iç enerjilerinin dış magnetik alan bağımlılığı.

2.4. Boyuna Silindirik Öz/Yelek Karma Spin-(1/2, 1) Ising Nanoteli

Boyuna silindirik öz/yelek karma spin-(1/2, 1) Ising nanotel sisteminin termal özelliklerinin (mıknatıslanma, öz ısı, iç enerji ve alınganlık) sıcaklık ve dış magnetik alana bağımlılığı ferromagnetik ve antiferromagnetik durumlar için incelendi. Elde edilen teorik sonuçlar aşağıda ayrıntılı olarak verilmektedir.

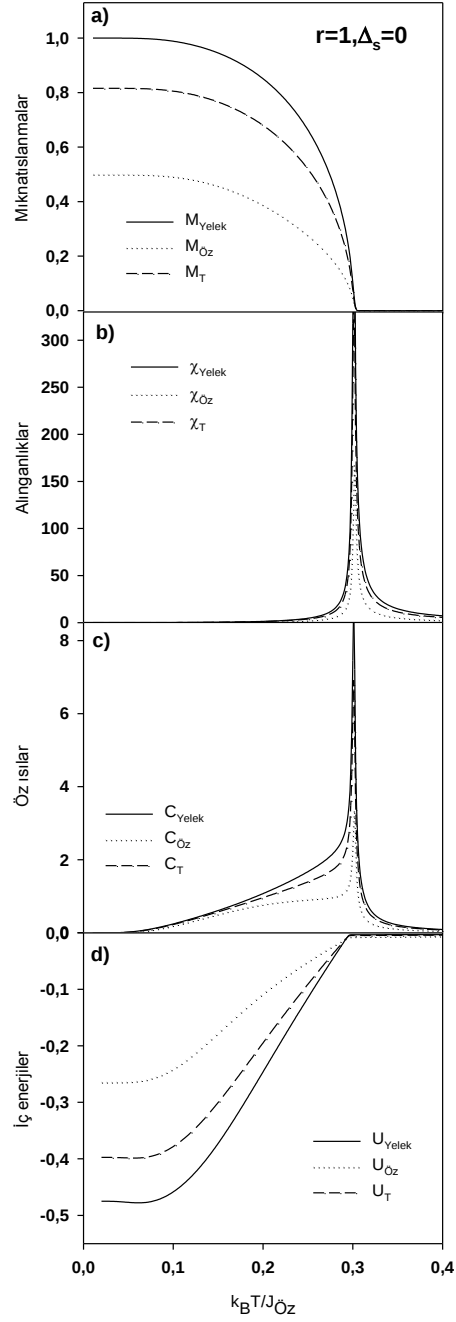
2.4.1. Ferromagnetik Durum

Boyuna silindirik öz/yelek karma spin-(1/2, 1) Ising nanotel sisteminin termal özelliklerinin (mıknatıslanma, öz ısı, iç enerji ve alınganlık) sıcaklık ve dış magnetik alana karşı davranışları ferromagnetik ($r>0$) durum için incelendi. Sistemin faz geçiş türleri ve kritik sıcaklık noktaları belirlendi. Kritik sıcaklık noktasının altındaki ve yakınlarındaki farklı sabit sıcaklık noktalarında öz, yelek ve nanotel sistemine ait termal özelliklerin dış magnetik alana karşı davranışları incelendi.

2.4.1.1. Termal Özelliklerin Sıcaklığa Bağımlılığı

Boyuna silindirik öz/yelek karma spin-(1/2, 1) Ising nanotel sisteminin termal özelliklerinin (mıknatıslanma, öz ısı, iç enerji ve alınganlık) sıcaklık bağımlılığı $r=1$, $\Delta_s=0$ ve $D_{Yelek}=0.0$ değerleri için Şekil 2.22.'de gösterilmektedir. Şekil 2.22.(a)'da öz, yelek ve nanotel sisteminin mıknatıslanmaları, ikinci-dereceden faz geçişi yaparak $T_c=0.301$ kritik sıcaklık noktasında ferromagnetik fazdan paramagnetik ($M_{\text{Öz}}=M_{Yelek}=M_T=0.0$) faza geçmektedir. $T=0$ sıcaklık noktasında öz, yelek ve nanotel sisteminin mıknatıslanmaları sırasıyla $M_{\text{Öz}}=0.5$, $M_{Yelek}=1.0$ ve $M_T=0.815$ 'dir. Şekil 2.22.(b)'de öz, yelek ve nanotel sisteminin alınganlık özelliklerinin sıcaklığa bağımlılığını gösterilmektedir. Nanotel sisteminin alınganlıkları $T_c=0.301$ kritik sıcaklık noktasında belirgin bir pik yapmakta ve sıcaklık arttıkça monoton bir şekilde azalarak sıfır olmaktadır. Şekil 2.22.(c)'de öz, yelek ve nanotel sisteminin öz ısı özelliklerinin sıcaklığa bağımlılığını gösterilmektedir. Nanotel sisteminin öz ısıları, sıcaklık arttıkça hemen hemen lineer bir şekilde artarak $T_c=0.301$ kritik sıcaklık noktasında belirgin bir pik yapar ve kritik sıcaklık noktasından daha yüksek sıcaklık noktalarında ($T>T_c$) monoton bir şekilde nanotel sisteminin alınganlık özelliklerinden daha hızlı bir şekilde

azalarak sıfır olmaktadır. Şekil 2.22.(d)'de öz, yelek ve nanotel sisteminin iç enerji özelliklerinin sıcaklığa bağımlılığı gösterilmektedir. $T=0$ sıcaklık noktasında öz, yelek ve nanotel sisteminin iç enerjileri sırasıyla $U_{\text{Öz}}=-0.475$, $U_{\text{Yelek}}=-0.264$ ve $U_{\text{T}}=-0.397$ 'dir. Buradan, nanotel sisteminin yeleğine ait iç enerji derinliği öze ait iç enerji derinliğinden daha büyüktür.

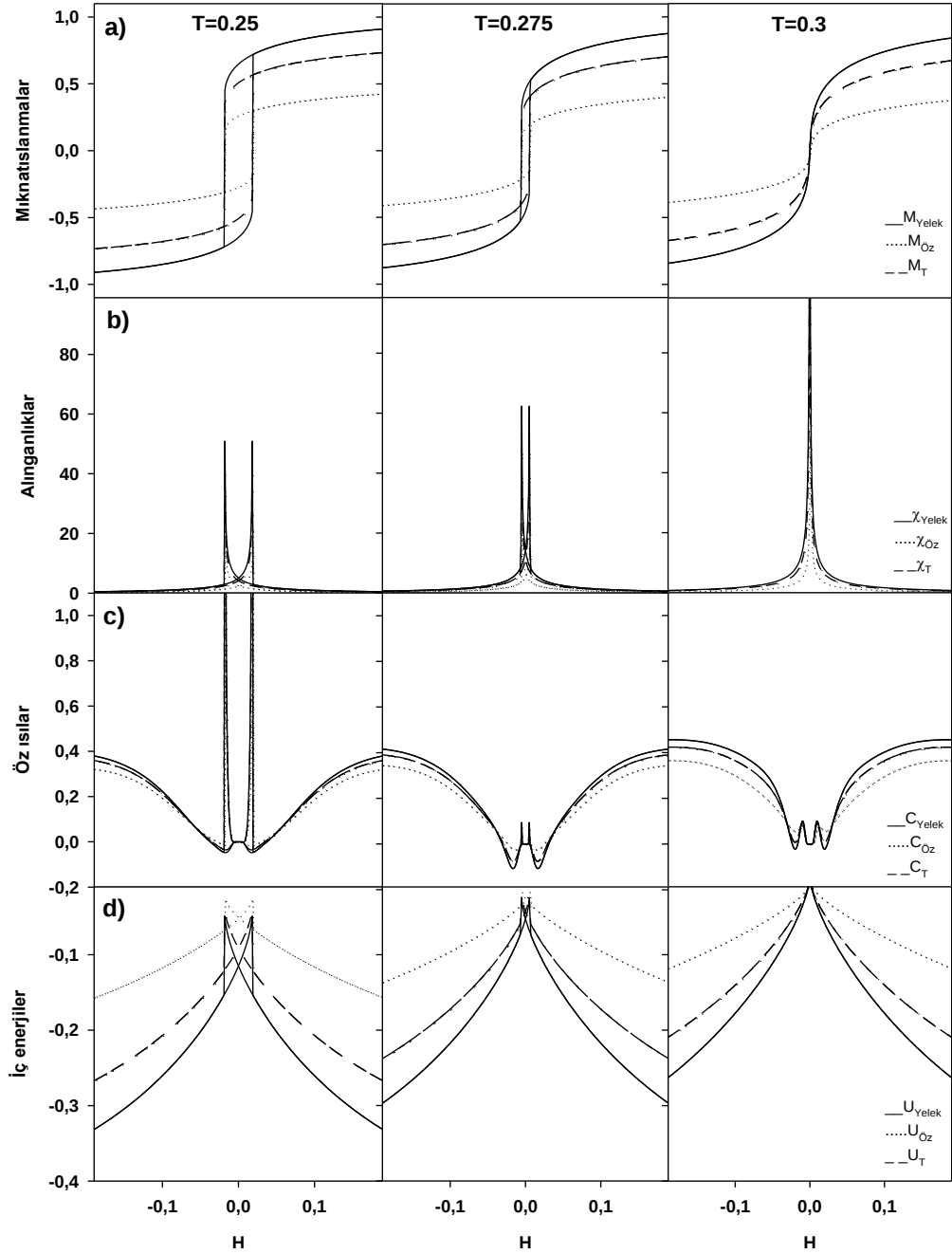


Şekil 2.22. Ferromagnetik boyuna silindirik öz/yelek karma spin-(1/2, 1) Ising nanotel sisteminin termal özelliklerinin sıcaklık bağımlılığı.

2.4.1.2. Termal Özelliklerin Dış Magnetik Alana Bağımlılığı

Boyuna silindirik öz/yelek karma spin-(1/2, 1) Ising nanotel sisteminin termal özelliklerinin (mıknatıslanma, öz ısı, iç enerji ve alınganlık) dış magnetik alan bağımlılığı öz/yelek etkileşim parametresinin $r=1$, $\Delta_s=0.0$ ve $D_{Yelek}=0.0$ değerleri için farklı sabit sıcaklıklarda ($T=0.25, 0.275$ ve 0.3) incelendi. Nanotel sisteminin zorlayıcı alan noktaları belirlendi. Şekil 2.23.(a)'da öz, yelek ve nanotel sistemine ait mıknatıslanmaların $T=0.25, 0.275$ ve 0.3 sıcaklık noktalarında dış magnetik alana karşı davranışları gösterilmektedir. $T=0.25, 0.275$ ve 0.3 sıcaklık noktalarında nanotel sisteminin zorlayıcı alan noktaları sırasıyla $H_c=0.018, 0.005$ ve 0.0 'dır. Şekil 2.23.(b)'de nanotel sisteminin alınganlıklarının dış magnetik alana karşı davranışları gösterilmektedir. Öz, yelek ve nanotel sisteminin alınganlıkları H_c zorlayıcı alan noktalarında belirgin bir pik yaparlar. $T=0.3$ sıcaklık noktasında histerezis alanlarının kaybolmasından dolayı sistemin alınganlık pikleri dış magnetik alana karşı üst üste binerek $H_c=0.0$ zorlayıcı alan noktasında sadece bir tane belirgin pik oluştururlar. Şekil 2.23.(c)'de nanotel sisteminin öz ısılarının dış magnetik alana karşı davranışları gösterilmektedir. Öz, yelek ve nanotel sisteminin öz ısıları $T=0.25$ ve 0.275 sıcaklık noktalarında H_c zorlayıcı alan noktalarında belirgin bir pik yaparlar. $T=0.3$ sıcaklık noktasında öz ısı pikleri kaybolmakta ve küçük bir maksimuma sahip olmaktadır. Bununla birlikte öz ısı özellikleri $H_c=0.0$ zorlayıcı alan noktası civarında sıfır olmaktadır. Şekil 2.23.(d)'de nanotel sisteminin iç enerjilerinin dış magnetik alana karşı davranışları gösterilmektedir. Öz, yelek ve nanotel sisteminin iç enerjileri H_c zorlayıcı alan noktalarında belirgin bir pik yaparlar. $T=0.3$ sıcaklık noktasında histerezis alanlarının kaybolmasından dolayı sistemin iç enerji pikleri dış magnetik alana karşı kaybolurlar ve sistemin iç enerji özellikleri $H_c=0.0$ zorlayıcı alan noktasında bir maksimum oluştururlar. Diğer taraftan, boyuna silindirik öz/yelek karma spin-(1/2, 1) Ising nanotel sisteminin öz, yelek ve nanotel sistemine ait zorlayıcı alan noktaları sıcaklık arttıkça azalmakta ve kritik sıcaklık noktasından yüksek sıcaklıklarda ($T \geq T_c$) sıfır olmaktadır. Boyuna silindirik öz/yelek karma spin-(1/2, 1) Ising nanotel sisteminin öz, yelek ve nanotel sistemine ait kalıcı mıknatıslanmalarda sıcaklık arttıkça azalır ve kritik sıcaklık noktasından yüksek sıcaklıklarda sıfır olur. Bununla birlikte öz, yelek ve nanotel sisteminine ait histerezis çevrimlerinin alanları sıcaklık arttıkça azalmakta ve kritik sıcaklık noktasından yüksek sıcaklıklarda sıfır olmaktadır. Öz, yelek ve nanotel

sistemine ait alınganlık, öz ısı ve iç enerji özelliklerinin dış magnetik alana karşı zorlayıcı alan noktalarında sahip oldukları simetrik pikler, histerezis çevrimlerinin alanları gibi çevrim-benzeri bir bant yapısı oluştururlar. Bu bant yapıları nanotel sisteminin histerezis çevrimlerinin alanlarına benzer şekilde sıcaklık arttıkça azalmakta ve kritik sıcaklık noktasından yüksek sıcaklıklarda sıfır olmaktadır.



Şekil 2.23. Ferromagnetik boyuna silindirik öz/yelek karma spin-(1/2, 1) Ising nanotel sisteminin termal özelliklerinin dış magnetik alan bağımlılığı.

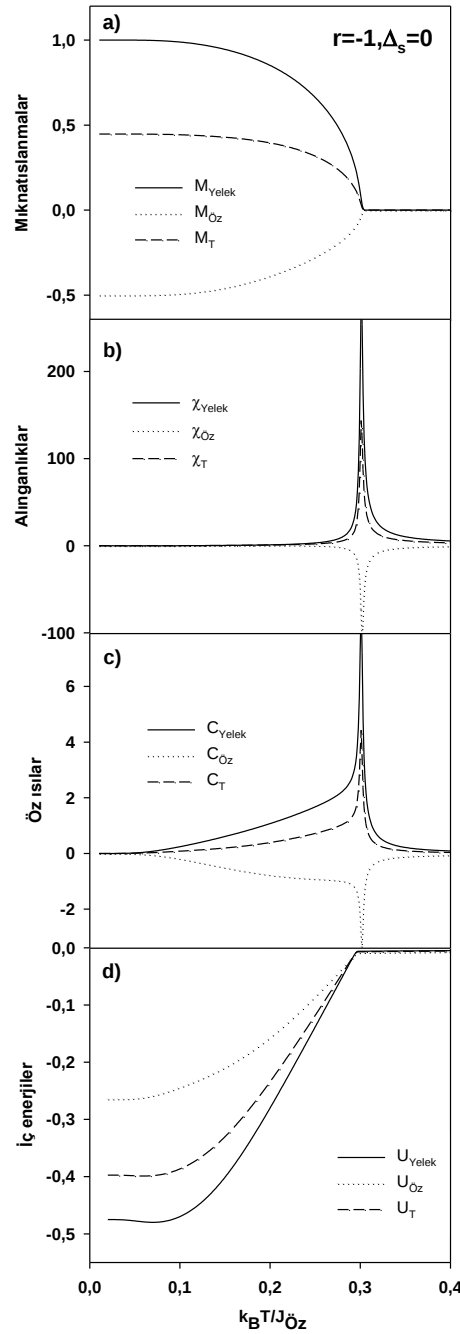
2.4.2. Antiferromagnetik Durum

Boyuna silindirik öz/yelek karma spin-(1/2, 1) Ising nanotel sisteminin termal özelliklerinin (mıknatıslanma, öz ısı, iç enerji ve alınganlık) sıcaklık ve dış magnetik alana karşı davranışları antiferromagnetik ($r < 0$) durum için incelendi. Sistemin faz geçiş türleri ve kritik sıcaklık noktaları belirlendi. Kritik sıcaklık noktasının altındaki ve yakınlarındaki farklı sabit sıcaklık noktalarında öz, yelek ve nanotel sistemine ait termal özelliklerin dış magnetik alana karşı davranışları incelendi.

2.4.2.1. Termal Özelliklerin Sıcaklığa Bağımlılığı

Boyuna silindirik öz/yelek karma spin-(1/2, 1) Ising nanotel sisteminin termal özelliklerinin (mıknatıslanma, öz ısı, iç enerji ve alınganlık) sıcaklığa bağımlılığı $r = -1$, $\Delta_s = 0$ ve $D_{Yelek} = 0.0$ değerleri için Şekil 2.24.'da gösterilmektedir. Şekil 2.24.(a)'da öz, yelek ve nanotel sisteminin mıknatıslanmalarının sıcaklığa bağımlılığı gösterilmektedir. Boyuna silindirik öz/yelek karma spin-(1/2, 1) Ising nanotel sistemi ikinci-dereceden faz geçişi yaparak $T_c = 0.301$ kritik sıcaklık noktasında antiferromagnetik fazdan paramagnetik ($M_{Öz} = M_{Yelek} = M_T = 0.0$) faza geçer. $T = 0$ sıcaklık noktasında öz, yelek ve nanotel sisteminin mıknatıslanmaları sırasıyla $M_{Öz} = -0.5$, $M_{Yelek} = 1.0$ ve $M_T = 0.447$ 'dir. Buradan, antiferromagnetik boyuna silindirik öz/yelek karma spin-(1/2, 1) Ising nanotel sisteminin mıknatıslanması, ferromagnetik boyuna silindirik öz/yelek karma spin-(1/2, 1) Ising nanotel sisteminin mıknatıslanmasından daha küçük olmaktadır ($M_T^{AF} < M_T^F$). Şekil 2.24.(b)'de öz, yelek ve nanotel sisteminin alınganlıklarının sıcaklığa bağımlılığı gösterilmektedir. Boyuna silindirik öz/yelek karma spin-(1/2, 1) Ising nanotel sisteminin alınganlıkları ferromagnetik duruma benzer davranış sergiler, ancak özün ve yeleğin alınganlığı birbirine zıt yönlerde kritik sıcaklık noktasında ($T_c = 0.301$) belirgin bir pik yaparlar. Şekil 2.24.(c)'de öz, yelek ve nanotel sisteminin öz ısılarının sıcaklığa bağımlılığı gösterilmektedir. Boyuna silindirik öz/yelek karma spin-(1/2, 1) Ising nanotel sisteminin öz ısıları alınganlık özelliklerine benzer şekilde ferromagnetik durumdan farklı olarak özün ve yeleğin öz ısıları birbirlerine zıt yönlerde kritik sıcaklık noktasında ($T_c = 0.301$) belirgin bir pik yaparlar. Şekil 2.24.(d)'de öz, yelek ve nanotel sisteminin iç enerjilerin sıcaklığa bağımlılığı gösterilmektedir. Boyuna silindirik öz/yelek karma spin-(1/2, 1) Ising nanotel sisteminin iç enerjileri ferromagnetik durum

ile aynı davranışları sergilemektedir. $T=0$ sıcaklık noktasında öz, yelek ve nanotel sisteminin iç enerjileri sırasıyla $U_{\text{Öz}}=-0.475$, $U_{\text{Yelek}}=-0.264$ ve $U_{\text{T}}=-0.397$ 'dir. Buradan, nanotel sisteminin iç enerjisi öz/yelek etkileşim parametresinin işaretinden bağımsızdır. Bununla birlikte öz, yelek ve nanotel sistemine ait iç enerji özellikleri sıcaklık arttıkça artarak kritik sıcaklık noktasında ($T_c=0.301$) sıfır olmaktadır.

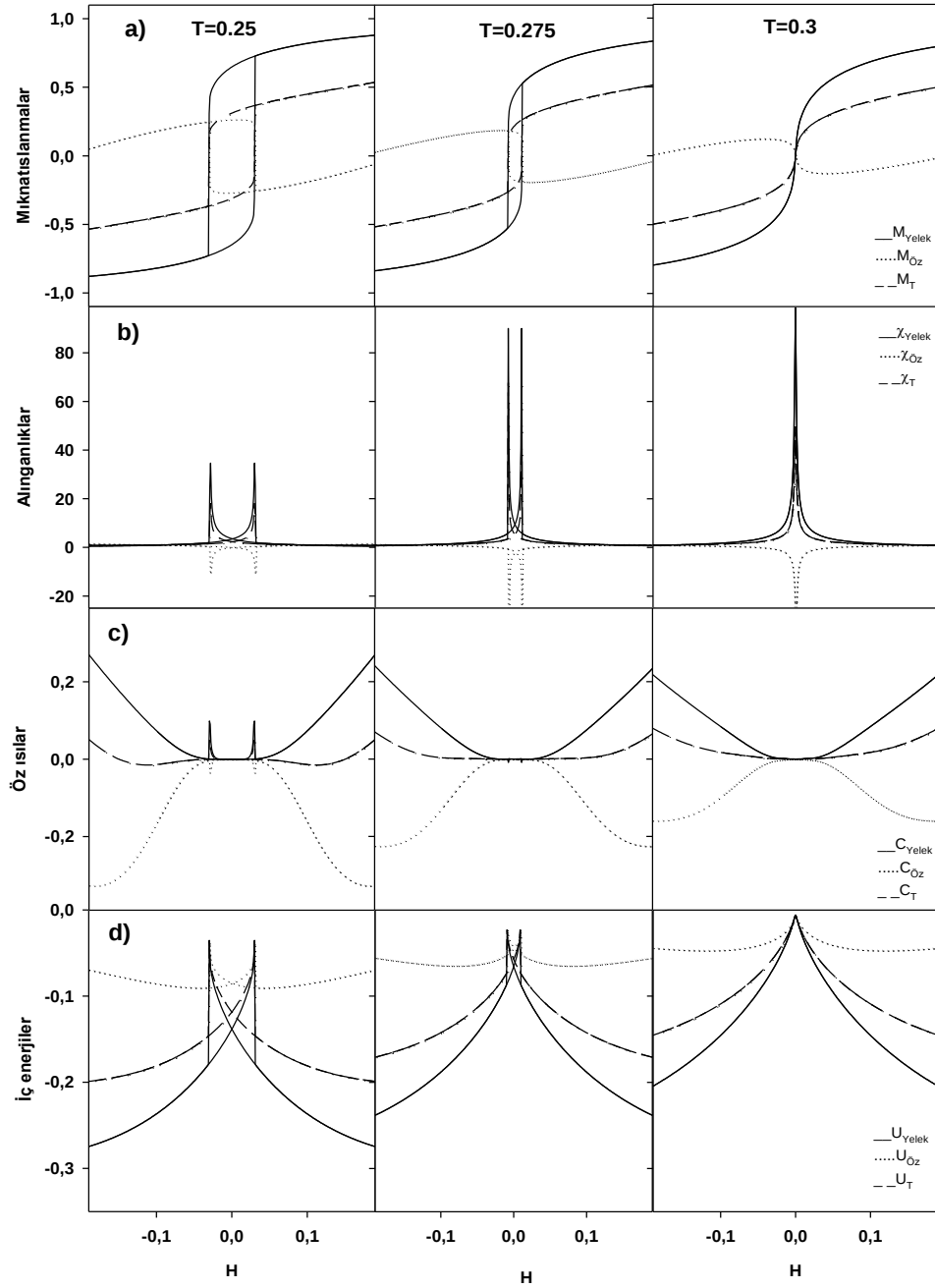


Şekil 2.24. Antiferromagnetik boyuna silindirik öz/yelek karma spin-(1/2, 1) Ising nanotel sisteminin termal özelliklerinin sıcaklık bağımlılığı.

2.4.2.2. Termal Özelliklerin Dış Magnetik Alana Bağımlılığı

Boyuna silindirik öz/yelek karma spin-(1/2, 1) Ising nanotel sisteminin termal özelliklerinin (mıknatıslanma, öz ısı, iç enerji ve alınganlık) dış magnetik alan bağımlılığı öz/yelek etkileşim parametresinin $r=-1$, $\Delta_s=0.0$ ve $D_{Yelek}=0.0$ değerleri için farklı sabit sıcaklıklarda ($T=0.25, 0.275$ ve 0.3) incelendi. Nanotel sisteminin zorlayıcı alan noktaları belirlendi. Şekil 2.25.(a)'da öz, yelek ve nanotel sistemine ait mıknatıslanmaların $T=0.25, 0.275$ ve 0.3 sıcaklık noktalarında dış magnetik alana karşı davranışları gösterilmektedir. $T=0.25, 0.275$ ve 0.3 sıcaklık noktalarında nanotel sisteminin zorlayıcı alan noktaları sırasıyla $H_c=0.031, 0.01$ ve 0.0 'dır. Buradan, antiferromagnetik zorlayıcı alan noktaları ferromagnetik durumdakinin hemen hemen iki katıdır ($H_c^{AF}=2H_c^F$). Şekil 2.25.(b)'de nanotel sisteminin alınganlıklarının dış magnetik alana karşı davranışları gösterilmektedir. Öz, yelek ve nanotel sisteminin alınganlıkları H_c zorlayıcı alan noktalarında belirgin bir pik yaparlar. $T=0.3$ sıcaklık noktasında histerezis alanlarının kaybolmasından dolayı sistemin alınganlık pikleri dış magnetik alana karşı üst üste binerek $H_c=0.0$ zorlayıcı alan noktasında sadece bir tane belirgin pik oluştururlar. Ferromagnetik durumdan farklı olarak özün alınganlık piki negatif yöndedir. Şekil 2.25.(c)'de nanotel sisteminin öz ısılarının dış magnetik alana karşı davranışları gösterilmektedir. Öz, yelek ve nanotel sisteminin öz ısıları $T=0.25$ ve 0.275 sıcaklık noktalarında H_c zorlayıcı alan noktalarında belirgin bir pik yaparken $T=0.3$ sıcaklık noktasında öz ısı pikleri kaybolmakta ve $H_c=0.0$ zorlayıcı alan noktası civarında sıfır olmaktadır. Ferromagnetik durumdan farklı olarak özün öz ısı piki negatif yöndedir. Şekil 2.25.(d)'de nanotel sisteminin iç enerjilerinin dış magnetik alana karşı davranışları gösterilmektedir. Öz, yelek ve nanotel sisteminin iç enerjileri H_c zorlayıcı alan noktalarında belirgin bir pik yaparlar. $T=0.3$ sıcaklık noktasında histerezis alanlarının kaybolmasından dolayı sistemin iç enerji pikleri dış magnetik alana karşı kaybolurlar ve sistemin iç enerji özellikleri $H_c=0.0$ zorlayıcı alan noktasında bir maksimum oluştururlar. Diğer taraftan öz, yelek ve nanotel sisteminine ait zorlayıcı alan noktaları sıcaklık arttıkça azalmakta ve kritik sıcaklık noktasından yüksek sıcaklıklarda ($T \geq T_c$) sıfır olmaktadır. Öz, yelek ve nanotel sisteminine ait kalıcı mıknatıslanmalarda nanotel sisteminin zorlayıcı alan noktalarının sıcaklık arttıkça azalmasına benzer şekilde sıcaklık arttıkça azalır ve kritik sıcaklık noktasından yüksek sıcaklıklarda ($T \geq T_c$) sıfır olur. Bununla birlikte öz, yelek ve nanotel sisteminine ait histerezis çevrimlerinin

alanları sıcaklık arttıkça azalmakta ve yüksek sıcaklıklarda sıfır olmaktadır. Ferromagnetik duruma benzer şekilde alingalık, öz ısı ve iç enerji özelliklerinin dış magnetik alana karşı zorlayıcı alan noktalarındaki simetrik pikleri, histerezis çevrimleri gibi çevrim-benzeri bir bant yapısı oluştururlar. Bu bantların alanları sıcaklık arttıkça azalmakta ve yüksek sıcaklıklarda sıfır olmaktadır.



Şekil 2.25. Antiferromagnetik boyuna silindirik öz/yelek karma spin-(1/2, 1) Ising nanotelinin termal özelliklerinin dış magnetik alan bağımlılığı

3. BÖLÜM

TARTIŞMA ve SONUÇ

Sonuç olarak, öz ve yelekten oluşan gerçek nanotel sistemlerinin magnetik özellikleri spin-1/2, spin-1 ve karma spin-(1/2, 1) Ising spin sistemleri kullanılarak etkin alan teorisiyle (EFT) incelendi.

Öz ve yeleği spin-1/2 Ising parçacıklarından oluşan Ising nanotel sisteminde; hem ferromagnetik hemde antiferromagnetik durumda, öz/yelek etkileşim parametresi (r) azaldıkça nanotel sisteminin kritik sıcaklık noktası (T_c) azalmaktadır. Histerezis çevrimlerinin alanları sıcaklık arttıkça azalmakta ve kritik sıcaklığın üstündeki sıcaklıklarda kaybolmaktadır. Histerezis çevrimlerinin alanlarına benzer şekilde, sistemin zorlayıcı alan ve artık mıknatıslanmaları da sıcaklık arttıkça azalmaktadır. Bununla birlikte ferromagnetik durumdan farklı olarak, antiferromagnetik durumda üçlü histerezis davranışı gözlenmektedir. Histerezis alanları, zorlayıcı alanları ve kalıcı mıknatıslanmalar ferromagnetik durumdakinden daha erken sıfıra gitmektedir. Histerezis özellikleri için elde edilen teorik sonuçlarımız literatürde yapılan diğer teorik [28, 34, 58-63] ve deneysel sonuçlarla çok iyi uyum göstermektedir [41-46, 64-70].

Öz ve yeleği spin-1 Ising parçacıklarından oluşan boyuna Ising nanotel sisteminde; kritik sıcaklık noktalarında nanotel sisteminin alınganlıkları pik yapmaktadır. Güçlü öz/yelek etkileşimi ($r=1$) için nanotel sisteminin öz ve yeleği aynı kritik sıcaklık (T_c) noktasında faz geçişi yapmakta ve nanotel sistemi bu kritik sıcaklık noktasında bir adet alınganlık pikine sahip olmaktadır. Diğer taraftan, zayıf öz/yelek etkileşimi ($r=0.001$) için nanotel sisteminin öz ve yeleği birbirinden farklı kritik sıcaklık noktasına sahip olmaktadır. Bundan dolayı, nanotel sisteminin alınganlığı biri öze ait kritik sıcaklık noktasında, diğeri yeleğe ait kritik sıcaklık noktasında olmak üzere iki adet alınganlık pikine sahip olmaktadır. Boyuna kristal alanın belirli değerlerinde nanotel sisteminin mıknatıslanmaları birinci-dereceden faz geçişi yapmaktadır. Güçlü öz/yelek etkileşimi ($r=1$) için nanotel sistemi bir adet geçiş sıcaklığına (T_t) sahiptir. Zayıf öz/yelek

etkileşimi ($r=0.001$) için nanotel sisteminin özü kritik sıcaklık (T_c) noktasında ikinci dereceden faz geçişi yaparken, nanotel sisteminin yeleği geçiş sıcaklık (T_t) noktasında birinci dereceden faz geçişi yapmaktadır. Nanotel sisteminin alınganlıkları, T_c ve T_t sıcaklık noktalarında pik yapmaktadırlar. Sistemin alınganlıkları $T>T_c$ durumunda monoton bir şekilde azalarak sifıra giderken, $T>T_t$ durumunda geniş bir maksimum yaparak sifıra gitmektedirler. Antiferromagnetik durumda ferromagnetik durumdan farklı olarak; Güçlü öz/yelek etkileşimi ($r=-1$) için öz mıknatıslanması ve alınganlık piki, zayıf öz/yelek etkileşimi ($r=-0.001$) için ise yelek mıknatıslanmaları, alınganlık maksimumu ve piki negatif yöndedir. Diğer taraftan, magnetik tersinme noktaları ile alınganlık pikleri arasında çok yakın bir ilişki olduğu gözlenmiştir; nanotel sisteminin alınganlıkları dış magnetik alana karşı belirgin bir pike sahip olmaktadır, öyleki bu pikler tam olarak sistemin zorlayıcı alan noktalarına karşılık gelmektedir. Yani, nanotel sisteminin alınganlık özelliklerinin dış magnetik alana karşı yapmış olduğu belirgin pikler nanotel sisteminin magnetik tersinme noktalarını belirlemektedir. Literatürde yapılan birçok deneysel ve teorik çalışmalarda, incelenen sistemlerin zorlayıcı alan noktaları histerezis eğrileri kullanılarak belirlenmektedir. Elde ettiğimiz teorik sonuçlardan açık bir şekilde görüldüğü gibi, herhangi bir sistemin zorlayıcı alan noktaları sistemin alınganlık özelliklerinin dış magnetik alana karşı sahip olduğu belirgin piklerin konumlarından kolaylıkla belirlenebilmektedir. Bununla birlikte, alınganlık özelliklerinin dış magnetik alana karşı sahip olduğu pikler bir bant yapısı oluşturmaktadır. Bu bantların alanları histerezis alanları gibi, sıcaklık arttıkça azalmaktadır ve kritik sıcaklık noktasının üzerindeki sıcaklıklarda kaybolmaktadır. Öz ve yeleği spin-1 Ising parçacıklarından oluşan boyuna Ising nanotel sistemin alınganlık özelliklerinin dış magnetik alana karşılık elde ettiğimiz teorik sonuçlar özü Ni , yeleği Fe_3O_4 magnetik atomlarından oluşan nanotel sisteminin deneysel olarak Chong *et al.* tarafından elde edilen alınganlık sonuçlarıyla [71] ve magnetik nanotüp sisteminin Monte Carlo metodu kullanılarak Konstantinova tarafından elde edilen teorik alınganlık sonuçlarıyla çok iyi uyum içerisindedir [27].

Öz ve yeleği spin-1 Ising parçacıklarından oluşan enine Ising nanotel sisteminde; enine kristal alan arttıkça, nanotel sisteminin magnetik özellikleri (mıknatıslanma, alınganlık, öz ısı ve iç enerji) azalmakta ve yüksek enine kristal alan değerleri için sıfır olmaktadır. Bu nedenle, Ising nanotel sisteminin magnetik özellikleri yüksek enine kristal alan

değerlerinde tamamen paramagnetik davranışlar sergilemektedir. Güçlü öz/yelek etkileşimi için ($r=\pm 1$) nanotel sisteminin öz ve yeleğine ait magnetik özellikler aynı kritik sıcaklık noktasında faz geçişi yaparlarken, zayıf öz/yelek etkileşimi için ($r=\pm 0.001$) nanotel sisteminin öz ve yeleğine ait mıknatıslanma ve iç enerji özellikleri birbirlerinden farklı kritik sıcaklık noktalarında faz geçişi yapmakta ve buna bağlı olarak sistemin öz ve yeleğine ait öz ısı ve alınganlık özellikleri, öz ve yeleğin kritik sıcaklık noktalarında belirgin bir pike sahip olmaktadır. Diğer taraftan, güçlü öz/yelek etkileşim için ($r=\pm 1$) nanotel sisteminin öz ve yeleği aynı zorlayıcı alan noktası sahipken, zayıf öz/yelek etkileşim için ($r=\pm 0.001$) nanotel sisteminin öz ve yeleği birbirinden farklı zorlayıcı alan noktasında sahiptir. Buna bağlı olarak, nanotel sistemi biri öze, diğeri yeleğe ait olmak üzere iki adet farklı zorlayıcı alan noktalarına sahiptir. Bununla birlikte, nanotel sistemin tek bir zorlayıcı alan noktasına sahip olduğu ($r=\pm 1$) durumda, sistemin alınganlık, öz ısı ve iç enerji özellikleri dış magnetik alana karşı, sistemin zorlayıcı alan noktalarında iki adet belirgin pike sahip olmaktadır. Öz ve yeleğin farklı zorlayıcı alan noktalarına sahip olduğu durumda ($r=\pm 0.001$) ise, özün alınganlığı, iç enerjisi ve öz ısı özellikleri özün zorlayıcı alan noktasında, yeleğin alınganlığı, iç enerjisi ve öz ısı özellikleri yeleğin zorlayıcı alan noktasında iki adet belirgin pike sahip olmaktadır. Buna bağlı olarak, nanotel sisteminin alınganlığı, iç enerjisi ve alınganlık özellikleri ikisi özün zorlayıcı alan noktasında ve diğeri ikisi yeleğin zorlayıcı alan noktasında olmak üzere dört belirgin pike sahip olmaktadır. Nanotel sisteminin alınganlık, öz ısı ve iç enerjisinin dış magnetik alana karşı sistemin zorlayıcı alan noktalarında sahip oldukları bu pikler bir bant yapısı oluşturmaktadır. Bu bant yapılarının alanları histerezis alanları gibi sıcaklık arttıkça kaybolmaktadır. Kritik sıcaklığın üzerindeki sıcaklık noktalarında histerezis çevrimlerinin alanlarının kaybolmasından dolayı ($H_c=0$), nanotel sisteminin öz ısı pikleri kaybolmaktadır, iç enerji pikleri üst üste binmekte ve yüksek sıcaklıklarda geniş maksimumlara sahip olmaktadır. Nanotel sisteminin alınganlık pikleri ise üst üste binerek $H_c=0$ 'da tek bir pik oluşturmakta ve yüksek sıcaklıklarda geniş maksimumlara sahip olmaktadır.

Özü spin-1/2 ve yeleği spin-1 Ising parçacıklarından oluşan boyuna Ising nanotel sisteminin magnetik özellikleri, öz ve yeleği spin-1 Ising parçacıklarından oluşan boyuna Ising nanotel sistemine benzer davranışlar sergilemekle birlikte temel farklılıkları şu şekilde özetleyebiliriz; nanotel sisteminin özünde yelektekinden düşük

spin dereceli Ising parçacıkları bulunduğunda nanotel sisteminin kritik sıcaklık noktaları, sıfır sıcaklık noktasında mıknatıslanma büyüklüğü, zorlayıcı alan noktaları daha küçük değerlere sahip olmaktadır. Bununla birlikte, kalıcı mıknatıslanmaların büyüklükleri artmaktadır. Zorlayıcı alan noktalarının küçülmesine bağlı olarak, histerezis çevrimlerinin alanları ve magnetik özelliklerinin (alınganlık, öz ısı ve alınganlık) dış magnetik alana karşılık oluşturdukları bant yapılarının alanları azalmaktadır.

Spin-1/2 Ising nanoteli ve boyuna spin-1 Ising nanoteli için elde edilen teorik sonuçlarımız Solid State Communications dergisinde yayınlanmıştır [72, 73].

KAYNAKÇALAR

1. Şarlı, N., 2012. Band structure of the susceptibility, internal energy and specific heat in a mixed core/shell Ising nanotube. **Physica B**, DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.physb.2012.08.046> In Press.
2. Skomski, R., 2003. Nanomagnetism. **Journal of Physics: Condensed Matter**, 15 (20): 841-896.
3. Wegrowe, J. E., Kelly, D., Jaccard, Y., Guittienne, P. and Ansermet, J. P., 1999. Current-induced magnetization reversal in magnetic nanowires. **Europhysics Letters**, 45 (5): 626-632.
4. Fert, A. and Piroux, L., 1999. Magnetic nanowire. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, 200 (1): 338-358.
5. Kurlyandskaya, G. V., Sanchez, M. L., Hernando, B., Prida, V. M., Gorria, P. and Tejedor, M., 2003. Giant-magnetoimpedance-based sensitive element as a model for biosensors. **Applied Physics Letters**, 82 (18): 3053-3055.
6. Bourlinos, A. B., Simopoulos, A., Boukos, N. and Petridis, D., 2001. Magnetic modification of the external surfaces in the MCM-41 porous Silica: Synthesis, characterization, and functionalization. **Journal of Physical Chemistry B**, 105 (31): 7432-7437.
7. Gross, A. F., Diehl, M. R., Beverly, K. C., Richman, E. K. and Tolbert, S. H., 2003. Controlling magnetic coupling between Cobalt nanoparticles through nanoscale confinement in hexagonal mesoporous Silica. **Journal of Physical Chemistry B**, 107 (23): 5475-5482.
8. Berkowitz, A. E., Kodama, R. H., Makhlof, S. A. Parker, F. T., Spada, F. E., McNiff Jr. E. J. and Foner, S., 1999. Anomalous properties of magnetic nanoparticles. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, 196: 591-594.
9. Peng, X. and Logan, P., 2010. Electronic properties of strained Si/Ge core-shell nanowires. **Applied Physics Letters**, 96 (14): 143119.
10. Amato, M., Palumbo, M. and Ossicini, S., 2009. SiGe nanowires: Structural stability, quantum confinement and electronic properties. **Physical Review B**, 80 (23): 235333.
11. Cahangirov, S. and Ciraci, S., 2009. First-principles study of GaAs nanowires. **Physical Review B**, 79 (16): 165118.
12. Berkdemir, C. and Gülseren, O., 2009. First-principles investigation of pentagonal and hexagonal core-shell silicon nanowires with various core compositions. **Physical Review B**, 80 (11): 115334.

13. Xu, X. and Servati, P., 2009. Facet-dependent electronic properties of hexagonal silicon nanowires under progressive hydroxylation and surface reconstruction. **Nano Letters**, 9 (5): 1999-2004.
14. Kibsgaard, J., Tuxen, A., Levisen, M., Laegsgaard, E., Gemming, S., Seifert, G., Lauritsen, J. V. and Besenbacher, F., 2008. Atomic-scale structure of Mo₆S₆ nanowires. **Nano Letters**, 8 (11): 3928-3931.
15. Nolan, M., O'Callaghan, S., Fagas, G., and Greer, J. C., 2007. Silicon nanowire band gap modification. **Nano Letters**, 7 (1): 34-38.
16. Kaneyoshi, T., 2005. Phase diagrams of a nanoparticle described by the transverse Ising model. **Physica Status Solidi B**, 242 (14): 2938-2948.
17. Kaneyoshi, T., 2009. Magnetizations of a nanoparticle described by the transverse Ising model. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, 321 (20): 3430-3435.
18. Kaneyoshi, T., 2010. Magnetizations of a transverse Ising nanowire. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, 322 (21): 3410-3415.
19. Kaneyoshi, T., 2010. Phase diagrams of a transverse Ising nanowire. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, 322 (20): 3014-3018.
20. Kaneyoshi, T., 2011. Magnetic properties of a cylindrical Ising nanowire (or nanotube). **Physica Status Solidi B**, 248 (1): 250-258.
21. Zaim, A., Kerouad, M. and Amraoui, Y. E., 2009. Magnetic properties of a ferrimagnetic core/shell nanocube Ising model: A Monte Carlo simulation study. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, 321 (8): 1077-1083.
22. Zaim, A. and Kerouad, M., 2010. Monte Carlo simulation of the compensation and critical behaviors of a ferrimagnetic core/shell nanoparticle Ising model. **Physica A**, 389 (17): 3435-3442.
23. Liu, S. Y., Soh, A. K. and Hong, L., 2009. Lateral surface induced effects on ultra-thin amorphous Co nanowire. **Journal of Physics D: Applied Physics**, 42 (21): 215002.
24. Wang, B., Chen, X., Chen, G., Wang, G. and Zhao, J., 2004. Electronic and magnetic properties of multishell Co nanowires coated with Cu. **Solid State Communications**, 129 (1): 25-30.
25. Wang, H., Zhou, Y. , Wang, E. and Lin, D. L., 2001. Critical point of magnetic nanostructures in the Ising model. **Chinese Journal of Physics**, 39 (1): 85-89.

26. Wang, H., Zhou, Y., Lin, D. L. and Wang, C., 2002. Phase diagram of Ising nano-particles with cubic structures. **Physica Status Solidi B**, 232 (2): 254-263.
27. Konstantinova, E., 2008. Theoretical simulations of magnetic nanotubes using Monte Carlo method. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, 320 (21): 2721-2729.
28. Iglesias, O. and Labarta, A., 2001. Finite-size and surface effects in maghemite nanoparticles: Monte Carlo simulations. **Physical Review B**, 63 (18): 184416.
29. Michael, Th., Trimper, S. And Wesselinowa, J. M., 2006. Size and doping effects on the coercive field of ferroelectric nanoparticles: A microscopic model. **Physical Review B**, 74 (21): 214113.
30. Scheinfein, M. R., Schmidt, K. E., Heim, K. R. and Hembree, G. G., 1996. Magnetic order in two-dimensional arrays of nanometer-sized superparamagnets. **Physical Review Letters**, 76 (9): 1541-1544.
31. Bakuzis, A. F. and Morais, P. C., 2004. Magnetic nanoparticle systems; an Ising model approximation. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, 272: 1161-1163.
32. Hanafin, R., Archer, T. and Sanvito, S., 2010. Magnetism of wurtzite CoO nanoclusters. **Physical Review B**, 81 (5): 054441.
33. Rego, L. G. C. and Figueiredo, W., 2001. Magnetic properties of nanoparticles in the Bethe-Peierls approximation. **Physical Review B**, 64 (14): 144424.
34. Yalçın, O., Erdem, R. and Övünç, S., 2008. Spin-1 model of noninteracting nanoparticles. **Acta Physica Polonica A**, 114 (4): 835-844.
35. Leite, V. S. and Figueiredo, W., 2005. Spin-glass surface disorder on the magnetic behaviour of antiferromagnetic small particles. **Physica A**, 350 (2): 379-392.
36. Lin, D., Nunes, A. C., Majkrzak, C. F. and Berkowitz, A. E., 1995. Polarized neutron study of the magnetization density distribution within a CoFe₂O₄ colloidal particle II. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, 145 (3): 343-348.
37. Morrish, A. H. and Haneda, K., 1981. Magnetic structure of small NiFe₂O₄ particles. **Journal of Applied Physics**, 52 (3): 2496-2499.
38. Kodama, R. H., Berkowitz, A. E., E. J. McNiff, Jr. and Foner, S., 1996. Surface spin disorder in NiFe₂O₄ nanoparticles. **Physical Review Letters**, 77 (2): 394-397.

39. Tomczak, P. and Ferchmin, A. R., 2006. On the range of interaction from finite size scaling in magnetic Ni nanowires. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, 306 (2): 228-232.
40. Sun, L., Searson, P. C. and Chien, C. L., 2000. Finite-size effects in nickel nanowire arrays. **Physical Review B**, 61 (10): 6463-6466.
41. Winkler, E., Zysler, R. D., Mansilla M. V. and Fiorani, D., 2005. Surface anisotropy effects in NiO nanoparticles. **Physical Review B**, 72 (13): 132409.
42. Pana, O. ,Teodorescu, C. M. and Chauvet, O., Payen, C., Macovei, D., Turcu, R., Soran, M. L., Aldea, N. and Barbu, L., 2007. Structure, morphology and magnetic properties of Fe–Au core-shell nanoparticles. **Surface Science**, 601 (18): 4352-4357.
43. Zhang, E., Tang, Y., Peng, K. Guo, C. and Zhang, Y., 2008. Synthesis and magnetic properties of γ -Fe₂O₃/SiO₂ core/shell nanoparticles under hydrothermal conditions. **Solid State Communications**, 148 (11): 496-500.
44. Imran, M. M. A., 2008. Structural and magnetic properties of electrodeposited Ni nanowires. **Journal of Alloys and Compounds**, 455: 17-20.
45. Cao, H., Huang, G., Xuan, S., Wu, Q., Gu, F. and Li, C., 2008. Synthesis and characterization of carbon-coated iron core/shell nanostructures. **Journal of Alloys and Compounds**, 448: 272-276.
46. Fleaca, C. T., Morjan, I., Alexandrescu, R., Dumitrache, F., Soare, I., Florescu, L. G., F., Normand, L. And Derory, A., 2009. Magnetic properties of core-shell catalyst nanoparticles for carbon nanotube growth. **Applied Surface Science**, 255 (10): 5386-5390.
47. Callen, H. B., 1963. A note on Green functions and the Ising model. **Physics Letters**, 4 (3): 161-166.
48. Honmura, R. and Kaneyoshi, T., 1979. Contribution to the new type of effective field theory of the Ising model. **Journal of Physics C**, 12 (19): 3979-3992.
49. Jiang, W., Wei, G. Z. and Xin, Z. H., 2000. Specific heat of spin transverse Ising model with the crystal field on honeycomb lattice. **Physica Status Solidi B**, 219 (1): 157-161.
50. Richard, L., 1998. Introductory Quantum Mechanics. Addison-Wesley.
51. Kaneyoshi, T., Tucker, J. W. and Jascur, M., 1992. Differential operator technique for higher spin problems. **Physica A**, 186 (3): 495-512.
52. Waerden, B. L. V., 1927. Beweis Einer Baudetschen Vermutung, **Nieuw Archief voor Wiskunde**, 15: 212-216.

53. Tucker, J. M., 1994. Generalized Van der Waerden identities. **Journal of Physics A**, 27 (3): 659-662.
54. Sarmiento, E. F. and Kaneyoshi, T., 1993. Phase diagrams and tricritical behavior of a diluted spin-1 transverse Ising model in a random field. **Physical Review B**, 48 (5): 3232-3239.
55. Honmura, R., Fittipaldi, I. P., Sarmiento, E. F. and Kaneyoshi, T., 1983. Amorphization of a crystalline diluted Ising ferrimagnet. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, 31 (3): 1485-1486.
56. Zernike, F., 1940. The propagation of order in Co-operative phenomena: Part I. the AB Case. **Physica**, 7 (7): 565-585.
57. Kaneyoshi, T., Tamura, I. and Sarmiento, E.F., 1983. Surface magnetic properties of the Ising model with a diluted free surface. **Physical Review B**, 28 (11): 6491-6498.
58. Hu, Y., Liu, Y. and Du, A., 2010. Effect of cooling field strength and ferromagnetic shell shape on exchange bias in nanoparticles with inverted F/AF core/shell morphology. **Physica Status Solidi B**, 247 (4): 972-978.
59. Zhu, Z., Sun, Y., Zhang, Q. and Liu, J. M., 2007. Dynamics and scaling of low-frequency hysteresis loops in nanomagnets. **Physical Review B**, 76 (1): 014439.
60. Mi, B. Z., Wang, H. Y. and Zhou, Y. S., 2010. Theoretical investigations of magnetic properties of ferromagnetic single-walled nanotubes. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, 322 (8): 952-958.
61. Wesselinowa, J. M., 2010. Size and anisotropy effects on magnetic properties of antiferromagnetic nanoparticles. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, 322 (2): 234-237.
62. Jiang, W., Lo, V. C., Bai, B. D. and Yang, J., 2010. Magnetic hysteresis loops in molecular-based magnetic materials $A\text{Fe}^{\text{II}}\text{Fe}^{\text{III}}(\text{C}_2\text{O}_4)_3$. **Physica A**, 389 (11): 2227-2233.
63. Bukharov, A. A., Ovchinnikov, A. S., Baranov, N. V. and Inoue, K., 2010. Magnetic hysteresis and domain wall dynamics in single chain magnets with antiferromagnetic interchain coupling. **Journal of Physics: Condensed Matter**, 22 (43): 436003.
64. Takagaki, Y., Herfort, J., Hilse, M., Geelhaar, L. and Riechert, H., 2011. Swingback in magnetization reversal in MnAs–GaAs coaxial nanowire heterostructures. **Journal of Physics: Condensed Matter**, 23 (12): 126002.

65. Curiale, J., Sanchez, R. D., Troiani, H. E., Leyva, A. G. and Levy, P., 2005. Room-temperature ferromagnetism in $\text{La}_{2/3}\text{Sr}_{1/3}\text{MnO}_3$ nanoparticle assembled nanotubes. **Applied Physics Letters**, 87 (4): 043113.
66. Kamalakar, G., Hwang, D. W. and Hwang, L. P., 2002. Synthesis and characterization of multiwalled carbon nanotubes produced using zeolite Co-beta. **Journal of Materials Chemistry**, 12: 1819-1823.
67. Peng, D. L., Zhao, X., Inoue, S., Ando, Y. and Sumiyama, K., 2005. Magnetic properties of Fe clusters adhering to single-wall carbon nanotubes, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, 292: 143-149.
68. Chen, C. S., Liu, T. G., Chen, X. H., Lin, L. W., Liu, Q. C., Xia, Q. and Ning, Z. W., 2009. Preparation and magnetic property of multi-walled carbon nanotube/ $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ composites. **Transactions of Nonferrous Metals Society of China**, 19 (6): 1567-1571.
69. Garcia, J. A., Bertran, E., Elbaile, L., Cespedes, J.G. and Svalov, A., 2010. Magnetic behaviour of non-contacting Ni nanoparticles encapsulated in vertically aligned carbon nanotubes. **Physica Status Solidi C**, 7 (11): 2679-2682.
70. Sort, J., Dieny, B., Fraune, M., Koenig, C., Lunnebach, F., Beschoten, B. and Güntherodt, G., 2004. Perpendicular exchange bias in antiferromagnetic-ferromagnetic nanostructures. **Applied Physics Letters**, 84 (18): 3696-3698.
71. Chong, Y. T., Görlitz, D., Martens, S., Yau, M. Y. E., Allende, S., Bachmann, J. and Nielsch, K., 2010. Multilayered core/shell nanowires displaying two distinct magnetic switching events. **Advanced Materials**, 22: 2435-2439.
72. Keskin, M., Şarlı, N. and Deviren, B., 2011. Hysteresis behaviors in a cylindrical Ising nanowire, **Solid State Communications**, 151 (5): 1025-1030.
73. Şarlı, N. and Keskin, M., 2012. Two distinct magnetic susceptibility peaks and magnetic reversal events in a cylindrical core/shell spin-1 Ising nanowire, **Solid State Communications**, 152 (14): 354-359.

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı, Soyadı: Numan ŞARLI
Uyruğu: Türkiye (TC)
Doğum Tarihi ve Yeri: 25 Kasım 1982, Kayseri
Medeni Durumu: Bekâr
Tel: 05367038400
email: numansarli82@gmail.com
Yazışma Adresi: Mithatpaşa M. Ziraat C. Güven S. Arı Apt. No:6/1
Kocasinan/KAYSERİ

EĞİTİM

Derece	Kurum	Mezuniyet Tarihi
Yüksek Lisans	KÜ Fen Bilimler Enstitüsü	2008
Lisans	Kafkas Üniversitesi, Kars	2004
Lise	Kayseri YDA Lisesi, Kayseri	1999

YABANCI DİL

İngilizce, Almanca

PROJE DENEYİMİ

PROJE ADI	KURUM	TARİH	GÖREV	PROJE TÜRÜ
Silindirik Nanotellerin Manyetik Özelliklerinin Spin-1 ve Karma Spin (1/2, 1) Ising Sistemleri Kullanılarak Etkin Alan Teorisiyle İncelenmesi	Erciyes Üniversitesi Doktora Tez Projesi	2010–2012	Araştırmacı	Bilimsel Araştırma Projesi

YAYINLAR

SCI, SSCI, AHCI indekslerine giren dergilerde yayınlanan makaleler	3
1-2012, N. Şarlı, Band structure of the susceptibility, internal energy and specific heat in a mixed core/shell Ising nanotube, Physica B DOI: http://dx.doi.org/10.1016/j.physb.2012.08.046 In press.	
2-2012, N. Şarlı, M.Keskin, Two distinct magnetic susceptibility peaks and magnetic reversal events in a cylindrical core/shell spin-1 Ising nanowire, Solid State Communications 152 (14) 354-359.	
3-2011, M. Keskin, N. Şarlı, B. Deviren, Hysteresis behaviors in a cylindrical Ising nanowire, Solid State Communications 151 (5) 1025-1030.	
Diğer dergilerde yayınlanan makaleler	1
1-2012, N. Şarlı, Asgar-Numan paramagnetic equation, temperature, function and circle of the spin-1 core/shell Ising nanowire at high temperature, Balkan Physics Letters, İncelemede.	
Hakemli konferans/sempozyum bildiri kitaplarında yer alan yayınlar	12
1-2012, N. Şarlı, Band structure of the susceptibility, internal energy and specific heat in a mixed core/shell Ising nanotube, 10. Kimyasal Fizik Kongresi Bildiri Özetleri Kitabı, p.115,10-12 Ekim, TOBB Ekonomi ve Teknoloji Üniversitesi, Ankara/Türkiye.	
2-2012, N. Şarlı, Asgar-Numan paramagnetic equation, temperature, function and circle of the spin-1 core/shell Ising nanowire at high temperature, Türk Fizik Derneği 29.Uluslararası Fizik Kongresi Bildiri Özetleri Kitabı, p.229, 05-08 Eylül, Bodrum/Türkiye.	
3-2012, N. Şarlı, Diamagnetic behaviors at above the Asgar-Numan paramagnetic temperature ($T > T_{an}$) versus applied field in a mixed core/shell ising nanotube, Türk Fizik Derneği 29.Uluslararası Fizik Kongresi Bildiri Özetleri Kitabı, p.625, 05-08 Eylül, Bodrum/Türkiye.	
4-2012, N. Şarlı, The introduction of the computer programming for the numerical calculation of the magnetic properties of the nanowire and nanotube system by using effective field theory, Türk Fizik Derneği 29.Uluslararası Fizik Kongresi Bildiri Özetleri Kitabı, p.626, 05-08 Eylül, Bodrum/Türkiye.	
5-2012, N. Şarlı, M.Keskin, Two distinct magnetic susceptibility peaks and magnetic reversal events in a cylindrical core/shell spin-1 Ising nanowire, Türk Fizik Derneği 29.Uluslararası Fizik Kongresi Bildiri Özetleri Kitabı, p.624, 05-08 Eylül, Bodrum /Türkiye.	

6-2012, N. Şarlı, “<i>Asgar-Numan paramagnetic ring structure</i>” in a mixed core/shell Ising nanotube, 8. Nanoscience and Nanotechnology Congress Bildiri Özetleri Kitabı, p. 263, 25-29 Haziran, Hacettepe Üniversitesi, Ankara/Türkiye.
7-2012, N. Şarlı, Y. Polat, M. Batı, “<i>Binary coercive field points</i>” of the mixed core/shell Ising nanotube for the weak interaction between the core and the shell, 8. Nanoscience and Nanotechnology Congress Bildiri Özetleri Kitabı, p. 264, 25-29 Haziran, Hacettepe Üniversitesi, Ankara/Türkiye.
8-2012, N. Şarlı, M. Batı, M. Keskin, A novel symmetry behaviors in the magnetic properties of the mixed core/shell Ising nanowire, 8. Nanoscience and Nanotechnology Congress Bildiri Özetleri Kitabı, p. 282, 25-29 Haziran, Hacettepe Üniversitesi, Ankara/Türkiye.
9-2012, N. Şarlı, “<i>Kaneyoshi-Numan roscase structure</i>” of the specific heat in a ferromagnetic cylindrical core/shell spin-1 Ising nanowire, 19. İstatistiksel Fizik Günleri Konuşma Bildiri ve Özetleri Kitabı, p. 58, 28-30 Haziran, Sabancı Üniversitesi, İstanbul/Türkiye.
10-2012, N. Şarlı, Sinusoidal magnetic hysteresis behaviors of cylindrical core/shell spin-1/2 Ising nanotube, Yoğun Madde Fiziği İzmir Toplantısı Program ve Özet Kitapçığı, p. 16, 6 Nisan, İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü, İzmir/Türkiye.
11-2011, N. Şarlı, M.Keskin, B. Deviren, Hysteresis behaviors in a cylindrical Ising nanowire, 18. İstatistiksel Fizik Günleri Konuşma Bildiri ve Özetleri Kitabı, p. 33, 30 Haziran-2 Temmuz, Sabancı Üniversitesi, İstanbul/Türkiye.
12-2007, R.A.Abdullayev, G.Bilgici, N. Şarlı, “<i>Fotosayı yöntemiyle optik alanların istatistiksel özelliklerinin incelenmesi</i>”, Türk Fizik Derneği 24.Uluslararası Fizik Kongresi Bildiri Özetleri Kitabı, p.663, 28-31 Ağustos, Malatya/Türkiye.