



**T.C.
ERCIYES ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI**

**SİLİNDİRİK SPİN-3/2 ISING NANOTÜP SİSTEMİNİN DENGEDE
VE DENGEDE OLMAYAN MANYETİK ÖZELLİKLERİ**

**Hazırlayan
Yusuf KOCAKAPLAN**

**Danışman
Prof. Dr. Mustafa KESKİN**

Doktora Tezi

**Eylül 2014
KAYSERİ**

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

SİLİNDİRİK SPİN-3/2 ISING NANOTÜP SİSTEMİNİN
DENGEDE VE DENGEDE OLMAYAN MANYETİK
ÖZELLİKLERİ
(Doktora Tezi)

Tezi Hazırlayan
Yusuf KOCAKAPLAN

Danışman
Prof. Dr. Mustafa KESKİN

Bu çalışma, Erciyes Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Birimi tarafından
FDK-2013-4397 kodlu proje ile desteklenmiştir.

Eylül 2014
KAYSERİ

BİLİMSEL ETİĞE UYGUNLUK

Bu çalışmadaki tüm bilgilerin, akademik ve etik kurallara uygun bir şekilde elde edildiğini beyan ederim. Aynı zamanda bu kural ve davranışların gerektirdiği gibi, bu çalışmanın özünde olmayan tüm materyal ve sonuçları tam olarak aktardığımı ve referans gösterdiğimi belirtirim.

Yusuf KOCAKAPLAN

İmza: 

“Silindirik spin-3/2 Ising nanotüp sisteminin dengede ve dengede olmayan manyetik özellikleri” adlı Doktora tezi, Erciyes Üniversitesi Lisansüstü Tez Önerisi ve Tez Yazma Yönergesi’ne uygun olarak hazırlanmıştır.

Tezi Hazırlayan


Yusuf KOCAKAPLAN

İmza

Danışman


Prof. Dr. Mustafa KESKİN

İmza



Fizik ABD Başkanı

Prof. Dr. Ayhan Güldeste

İmza

Prof. Dr. Mustafa KESKİN danışmanlığında **Yusuf KOCAKAPLAN** tarafından hazırlanan “**Silindirik spin-3/2 Ising nanotüp sisteminin dengede ve dengede olmayan manyetik özellikleri**” adlı bu çalışma, jürimiz tarafından Erciyes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında **Doktora Tezi** olarak kabul edilmiştir.

11/09/2014

JÜRİ:

Danışman : Prof. Dr. Mustafa KESKİN
 Üye : Prof. Dr. Sedat ÖZSOY
 Üye : Prof. Dr. Kâzım KEŞLİOĞLU
 Üye : Doç. Dr. Bayram DEVİREN
 Üye : Doç. Dr. Gökhan KOÇAK

M. Keskin

S. Özsoy

K. Keşlioğlu

B. Deviren

G. Koçak

ONAY:

Bu tezin kabulü Enstitü Yönetim Kurulunun 16/09/2014 tarih ve 2014/42-03 sayılı kararı ile onaylanmıştır.

K. Keşlioğlu

 16 / 09 / 2014

Prof. Dr. Kâzım KEŞLİOĞLU

Enstitü Müdürü

ÖNSÖZ / TEŞEKKÜR

Tez çalışmamın tamamlanmasında değerli fikir ve tecrübeleri ile bana destek sağlayan ve yardımlarını esirgemeyen saygıdeğer hocam Prof. Dr. Mustafa KESKİN'e canı gönülden teşekkür ederim. Tez izleme komitesi üyeleri değerli hocalarım Prof. Dr. Sedat ÖZSOY ve Prof. Dr. Kâzım KEŞLİOĞLU'na ve jüri üyeleri Doç. Dr. Bayram DEVİREN ve Doç. Dr. Gökhan KOÇAK'a içtenlikle teşekkür eder ve saygılarımı sunarım.

Ayrıca tez çalışmam boyunca birçok konuda yardımlarını gördüğüm çalışma grubu arkadaşlarımdan Arş. Gör. Dr. Mehmet ERTAŞ ve Arş Gör. Ersin KANTAR'a, ve çok yakın dostum Arş. Gör. Ulvi KANBUR'a değerli yorum ve tartışmalarından dolayı teşekkürlerimi sunarım.

Tez çalışması süresince FDK-2013-4397 kodlu proje kapsamında sağladığı destekten dolayı Erciyes Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Birimine teşekkür ederim.

Hayatım boyunca her şartta maddi ve manevi yardımlarını esirgemeyen bu günlere gelmemde en büyük rolü olan her şeyden çok sevdiğim canım aileme minnet ve şükranlarımı canı gönülden sunarım. Ayrıca çalışmalarım boyunca beni hep anlayışla karşılayan ve daima destek veren canım eşime teşekkürlerimi sunarım. Son olarak biricik kızıma teşekkürlerimi sunarım.

Yusuf KOCAKAPLAN

Eylül 2014

SİLİNDİRİK SPİN-3/2 ISING NANOTÜP SİSTEMİNİN DENGEDEN VE DENGEDEN OLMAYAN MANYETİK ÖZELLİKLERİ

Yusuf KOCAKAPLAN

Erciyes Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü

Doktora Tezi, Eylül 2014

Danışman: Prof. Dr. Mustafa KESKİN

ÖZET

Silindirik spin-3/2 Ising nanotüp sisteminin denge ve dengeden olmayan (dinamik) durumlar için termodinamik ve manyetik özellikleri kapsamlı bir şekilde incelendi. Denge durumunda, korelasyonlu Etkin-Alan Teorisi (EFT) kullanılarak sistemin mıknatıslanma, iç enerji, ısı sığası, alınganlık, entropi, serbest enerji, histerezis ilmeği, faz diyagramı ve telafi (compensation) davranışları gibi termodinamik ve manyetik özellikleri incelendi. Hamiltonyen parametrelerine bağlı olarak ikili veya üçlü histerezis ilmekleri gibi bazı karakteristik histerezis davranışları bulundu. Sistem parametrelerinin uygun değerlerinde Q-, R-, P-, N- ve S-tipi telafi davranışları gözlemlendi. Denge durumu için elde edilen faz diyagramlarında birinci-, ikinci-dereceden faz geçişleri ve izole kritik nokta (CP) elde edildi. Dengeden olmayan durumda, Glauber tipi stokastik dinamik temelli korelasyonlu Etkin-Alan Teorisi (DEFT) kullanılarak, silindirik nanotüp ve kare örgü sistemleri için spin-3/2 Ising modelinin dinamik davranışları incelendi. İlk önce DEFT dinamik denklemleri elde edildi. Elde edilen bu dinamik denklemler Adams-Moulton ve Romberg integrasyon metotlarıyla çözüldü. Sistemlerdeki fazları bulmak için ortalama düzen parametrelerinin zamanla değişimleri incelendi. Dinamik faz geçişlerinin doğasını (birinci- ve ikinci-derece) karakterize etmek ve dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıklarını elde etmek için dinamik düzen parametrelerinin davranışı indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak incelendi. Dinamik faz diyagramları farklı düzlemlerde sunuldu. Dinamik faz diyagramları, sistem parametrelerine bağlı olarak, dinamik sıfır sıcaklığı (Z), çoklu (A), tetra kritik (M), kritik son (E), üçlü kritik (TP) ve kuadropol nokta (QP) gibi dinamik kritik noktalara sahiptir ve aynı zamanda re-entrant davranış sergilemektedir.

Anahtar Kelimeler: Silindirik spin-3/2 Ising nanotüp; Etkin-alan teorisi (EFT); Glauber-tipi stokastik dinamik; Termodinamik ve manyetik özellikler; Dinamik faz geçişleri; Dinamik faz diyagramları.

THE EQUILIBRIUM AND NONEQUILIBRIUM MAGNETIC PROPERTIES OF CYLINDRICAL SPIN-3/2 ISING NANOTUBE SYSTEM

Yusuf KOCAKAPLAN

Erciyes University, Graduate School of Natural and Applied Sciences

PhD Thesis, September 2014

Thesis Supervisor: Prof. Dr. Mustafa KESKİN

ABSTRACT

The thermodynamic and magnetic properties of cylindrical spin-3/2 Ising nanotube system are investigated for the equilibrium and non-equilibrium (dynamics) states, in detail. In equilibrium state, by using the effective-field theory (EFT) with correlations, the thermodynamic and magnetic properties of the system, such as magnetization, internal energy, heat capacity, susceptibility, entropy, free energy, hysteresis loop, the phase diagram and compensation behavior have been examined. As depending on the Hamiltonian parameters, some characteristic hysteresis behaviors are found, such as the existence of double and triple hysteresis loops. For the appropriate values of the system parameters, the Q-, R-, P-, N- and S-types of compensation behaviors are observed. In the phase diagrams of equilibrium state, the first-, second-order phase transitions and isolated critical point (CP) are obtained. In non-equilibrium state, by utilizing the Glauber-type stochastic dynamic approach based on the effective-field theory with correlations (DEFT), the dynamic behaviors of spin-3/2 Ising model on the square lattice and cylindrical nanotube systems are investigated. Firstly, the DEFT dynamic equations are obtained. These dynamic equations are solved by Adams-Moulton and Romberg integration methods. The time variations of average order parameters are investigated to find the phases in the systems. The behaviors of the dynamic order parameters as a function of the reduced temperature are studied to characterize the nature (first- and second-order) of the dynamic phase transitions and obtain the dynamic phase transition (DPT) temperatures. The dynamic phase diagrams are presented in different planes. As depending on the system parameters, the dynamic phase diagrams exhibit dynamic zero temperature (Z), multicritical (A), tetracritical (M), critical end (E), triple (TP) and quadruple points (QP) as well as reentrant behavior.

Keywords: Cylindrical spin-3/2 Ising nanotube; Effective-field theory (EFT); Glauber-type stochastic dynamic; Thermodynamic and magnetic properties; Dynamic phase transitions; Dynamic phase diagrams.

İÇİNDEKİLER

SİLİNDİRİK SPİN-3/2 ISING NANOTÜP SİSTEMİNİN DENGEDE VE DENGEDE OLMAYAN MANYETİK ÖZELLİKLERİ

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

1. BÖLÜM

SİLİNDİRİK SPİN-3/2 ISING NANOTÜP SİSTEMİNİN DENGE DURUMUNDAKİ MANYETİK ÖZELLİKLERİ

1.1. Giriş.....	15
1.2. Modelin Tanıtımı ve Formülasyonu	16
1.3. Mıknatıslanmaların ve Alınganlıkların Termal Davranışı ve Faz Geçişleri	28
1.4. Termodinamik Nicelikler.....	33
1.5. Faz Diyagramları	37
1.5.1 (D, T) Düzleminde Faz Diyagramları	38
1.5.2 (Δ_s, T) Düzleminde Faz Diyagramları.....	39
1.5.3 (r, T) Düzleminde Faz Diyagramları	40
1.6. Histerezis İlmekleri	41
1.6.1 Histerezis İlmekleri Üzerinde Sıcaklığın Etkisi.....	41
1.6.2 Histerezis İlmekleri Üzerinde Kristal Alanın Etkisi.....	44

1.7. Telafi (Compensation) Davranışları	46
1.7.1 Öz-Kabuk Arasındaki Etkileşmenin Etkisi.....	47
1.7.2 Kabuk Yüzeyi Etkileşmesinin Etkisi.....	48
1.7.3 Kristal Alanın Etkisi.....	48
1.8. Sonuç ve Özet.....	49

2. BÖLÜM

SPİN-3/2 BLUME-CAPEL MODELİNİN KARE ÖRGÜ ÜZERİNDE DİNAMİK MANYETİK ÖZELLİKLERİ

2.1. Giriş.....	51
2.2. Modelin Tanıtımı ve Formülasyonu	52
2.2.1. Etkin-Alan Dinamik Denklemlerinin Elde Edilmesi	53
2.3. Dinamik Faz Geçiş Noktaları ve Dinamik Faz Diyagramları.....	56
2.3.1. Ortalama Mıknatıslanmanın Zamanla Değişimi.....	56
2.3.2. Dinamik Faz Geçiş Noktaları.....	57
2.4. Dinamik Faz Diyagramları	61
2.5. Sonuç ve Özet.....	66

3. BÖLÜM

SİLİNDİRİK SPİN-3/2 ISING NANOTÜP SİSTEMİNİN DENGEDEN OLMAYAN (DİNAMİK) DURUMDAKİ MANYETİK ÖZELLİKLERİ

3.1. Giriş.....	67
3.2. Modelin Tanıtımı ve Formülasyonu	68
3.2.1. Etkin-Alan Dinamik Denklemlerinin Elde Edilmesi	69
3.3. Dinamik Faz Geçiş Noktaları ve Dinamik Faz Diyagramları.....	76
3.3.1. Ortalama Mıknatıslanmanın Zamanla Değişimi.....	76
3.3.2. Dinamik Faz Geçiş Noktaları.....	79
3.4. Dinamik Faz Diyagramları	82
3.5. Sonuç ve Özet.....	84

4. BÖLÜM
SONUÇ, TARTIŞMA VE ÖNERİLER

Sonuç, Tartışma ve Öneriler.....	86
KAYNAKLAR.....	90
EKLER.....	103
ÖZGEÇMİŞ.....	110

ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 1.1	Silindirik nanotüp sisteminin şematik temsili: (a) ara kesit ve (b) üç boyutlu görünümü. Gri ve mavi toplar sırasıyla kabuktaki ve özdeki spin-3/2 manyetik atomları göstermektedir.....	16
Şekil 1.2a	m_T , m_C ve m_S mıknatıslanmalarının ve χ_T , χ_C ve χ_S alınganlıklarının $r = 1.0$, $\Delta_S = 0.5$ ve $D = 0.0$ değerleri için termal davranışı.....	29
Şekil 1.2b	$r = 1.0$, $\Delta_S = 0.0$ ve $D = 0.0$ değerleri için m_T , m_C ve m_S mıknatıslanmalarının ve χ_T , χ_C ve χ_S alınganlıklarının termal davranışı....	30
Şekil 1.2c	$r = 1.0$, $\Delta_S = -0.5$ ve $D = 0.0$ değerleri için m_T , m_C ve m_S mıknatıslanmalarının ve χ_T , χ_C ve χ_S alınganlıklarının termal davranışı....	31
Şekil 1.2d	$r = -1.0$, $\Delta_S = 0.0$ ve $D = 0.0$ değerleri için m_T , m_C ve m_S mıknatıslanmalarının ve χ_T , χ_C ve χ_S alınganlıklarının termal davranışı....	32
Şekil 1.2e	$r = 1.0$, $\Delta_S = 0.0$ ve $D = -3.25$ değerleri için m_T , m_C ve m_S mıknatıslanmalarının ve χ_T , χ_C ve χ_S alınganlıklarının termal davranışı....	33
Şekil 1.3	$r = 1.0$, $\Delta_S = 0.5$ ve $D = 0.0$ değerleri için sistemin termodinamik niceliklerinin termal davranışı. (a) İç enerji, (b) Öz ısı, (c) Entropi ve (d) Helmholtz serbest enerjisi.....	34
Şekil 1.4	$r = 1.0$, $\Delta_S = 0.0$ ve $D = -3.25$ değerleri için sistemin termodinamik niceliklerinin termal davranışı. (a) İç enerji, (b) Öz ısı, (c) Entropi ve (d) Helmholtz serbest enerjisi	36
Şekil 1.5	r ve Δ_S parametrelerinin çeşitli değerleri için (D, T) düzleminde faz diyagramları. (a) $r = 1.0$ ve $\Delta_S = -1.0$, (b) $r = 1.0$ ve $\Delta_S = 1.0$, (c) $r = 1.0$ ve $\Delta_S = 0.0$, (d) $r = 0.01$ ve $\Delta_S = 0.0$	39
Şekil 1.6	(Δ_S, T) düzleminde faz diyagramları.....	40
Şekil 1.7	(r, T) düzleminde faz diyagramları.....	41
Şekil 1.8	$r = 1.0$, $\Delta_S = 0.0$ ve $D = 0.0$ parametreleri ve farklı sıcaklık değerleri için histerezis ilmekleri	42
Şekil 1.9.	$r = 1.0$, $\Delta_S = -0.9$ ve $D = 1.0$ parametreleri ve farklı sıcaklık değerleri için histerezis ilmekleri	43
Şekil 1.10	$r = -1.0$, $\Delta_S = 0.0$ ve $D = 0.0$ parametreleri ve farklı sıcaklık değerleri için histerezis ilmekleri	45
Şekil 1.11	$r = -1.0$, $\Delta_S = 0.0$ ve $T = 1.0$ parametreleri ve farklı kristal alan değerleri için histerezis ilmekleri	46

- Şekil 1.12 $\Delta_s = -0.5$ ve $D = -1.0$ parametreleri için toplam mıknatıslanmanın termal davranışı. **(a)** Ferromanyetik durum, **(b)** Antiferromanyetik durum 47
- Şekil 1.13 Toplam mıknatıslanmanın termal davranışı. **(a)** $r = 1.0$ ferromanyetik durumu ve $D = -1.0$ ile $\Delta_s = -0.9, -0.5, 0.0$ ve 0.5 değerleri için **(b)** $r = -1.0$ antiferromanyetik durumu ve $D = -1.0$ ile $\Delta_s = -0.9, -0.5, 0.0$ ve 0.5 değerleri için elde edilmiştir..... 48
- Şekil 1.14 Toplam mıknatıslanmanın termal davranışı. **(a)** $r = 0.5$ ve $\Delta_s = -0.5$ sabit değerleri ile $D = -2.0, -1.0$ ve 1.5 için, **(b)** $r = -0.25$ ve $\Delta_s = -0.5$ sabit değerleri ile $D = -2.5, -1.0$ ve 1.75 için elde edilmiştir..... 49
- Şekil 2.1 Spin-3/2 BC modeli için ortalama mıknatıslanmanın $m(\xi)$ zamanla değişimi. **(a)** Sistemde paramanyetik (P) faz mevcuttur, $D/zJ = 0.25$, $h/zJ = 1.25$, $\omega = 2\pi$ ve $T/zJ = 0.675$. **(b)** Sistemde ferromanyetik-3/2 ($F_{3/2}$) faz mevcuttur, $D/zJ = 0.25$, $h/zJ = 0.5$, $\omega = 2\pi$ ve $T/zJ = 0.3$. Ortalama mıknatıslanmanın zamanla değişimini daha açık görebilmek için, ortalama mıknatıslanmanın davranışı zaman skalasında 58 - 62 değerleri arasında çizildi ve şekle eklendi. **(c)** Sistemde ferromanyetik-1/2 ($F_{1/2}$) faz mevcuttur, $D/zJ = -0.3125$, $h/zJ = 1.05$, $\omega = 2\pi$ ve $T/zJ = 0.06$. **(d)** Sistemde $F_{3/2} + P$ karma fazı mevcuttur, $D/zJ = -0.25$, $h/zJ = 1.05$, $\omega = 2\pi$ ve $T/zJ = 0.26$ 58
- Şekil 2.2 Spin-3/2 BC modeli için dinamik mıknatıslanmanın (M) sıcaklığa göre değişimi. **(a)** $F_{3/2}$ fazından P fazına ikinci-dereceden geçiş. **(b)** $F_{1/2}$ fazından P fazına ikinci-dereceden geçiş. **(c)** $F_{1/2}$ fazından P fazına birinci-dereceden geçiş. **(d)** P fazından P fazına birinci-dereceden geçiş. **(e)** ve **(f)** Sırasıyla, $F_{3/2} + P$ fazından $F_{3/2}$ fazına birinci-dereceden geçiş, $F_{3/2}$ fazından $F_{3/2} + P$ fazına ikinci-dereceden geçiş ve son olarak $F_{3/2} + P$ fazından P fazına ikinci-dereceden geçiş..... 60
- Şekil 2.3 Spin-3/2 BC modeli için $(T/zJ, h/zJ)$ düzleminde dinamik faz diyagramları. Dinamik faz diyagramları paramanyetik (P), ferromanyetik-3/2 ($F_{3/2}$), ferromanyetik-1/2 ($F_{1/2}$) temel fazlarını ve $F_{3/2}+P$ karma fazını içerir. Kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçiş çizgilerini ve içi dolu daireler dinamik üçlü kritik noktayı göstermektedir. Z, A, M, E, TP ve QP özel noktaları sırasıyla dinamik sıfır sıcaklığı, multikritik, tetrakritik, kritik son, üçlü ve kuadrupol noktalarını göstermektedir. $\omega = 2.0\pi$ ve **(a)** $D/zJ = 0.25$, **(b)** $D/zJ = -0.475$, **(c)** $D/zJ = -0.625$, **(d)** $D/zJ = -0.85$, **(e)** $D/zJ = -1.0$, ve **(f)** $D/zJ = -1.5$ 64
- Şekil 2.4 Şekil 2.3 ile aynı fakat **(a)** $D/zJ = -0.475$ ve $\omega = 0.1\pi$, **(b)** $D/zJ = -0.475$ ve $\omega = 10\pi$ 65
- Şekil 3.1 Silindirik spin-3/2 Ising nanotüp sistemi için $m_{s1}(\xi)$, $m_{s2}(\xi)$ ve $m_c(\xi)$ ortalama mıknatıslanmaların zamanla değişimi. **(a)** Sistemde paramanyetik (P) faz mevcuttur, $r = 1.0$, $\Delta_s = 0.0$, $D = 0.0$, $h = 2.5$, $\omega =$

- 2π ve $T = 8.5$. **(b)** Sistemde ferromanyetik-3/2 ($F_{3/2}$) faz mevcuttur, $r = 1.0$, $\Delta_s = 0.0$, $D = -2.0$, $h = 2.5$, $\omega = 2\pi$ ve $T = 2.0$. **(c)** Sistemde ferromanyetik-1/2 ($F_{1/2}$) faz mevcuttur, $r = 1.0$, $\Delta_s = 0.0$, $D = -2.0$, $h = 2.0$, $\omega = 2\pi$ ve $T = 0.5$. **(d)** Sistemde nm fazı mevcuttur, $r = 0.5$, $\Delta_s = -3.0$, $D = -2.0$, $h = 1.5$, $\omega = 2\pi$ ve $T = 0$ 77
- Şekil 3.2 Silindirik spin-3/2 Ising nanotüp sisteminde $r = 1.0$, $\Delta_s = 0.0$, $D = -1.0$, $h = 2.0$, $\omega = 2\pi$ ve $T = 0.55$ parametreleri için $F_{3/2} + P$ karma fazını göstermektedir..... 79
- Şekil 3.3 Silindirik spin-3/2 Ising nanotüp sistemi için M_{S1} , M_{S2} ve M_C dinamik mıknatıslanmaların sıcaklığa göre değişimi. **(a)** $F_{3/2}$ fazından P fazına ikinci-dereceden geçiş. **(b)** $F_{1/2}$ fazından P fazına ikinci-dereceden geçiş. **(c)** ve **(d)** Sırasıyla, $F_{3/2} + P$ fazından $F_{3/2}$ fazına birinci-dereceden geçiş, $F_{3/2}$ fazından $F_{3/2} + P$ fazına ikinci-dereceden geçiş ve son olarak $F_{3/2} + P$ fazından P fazına ikinci-dereceden geçişleri göstermektedir..... 81
- Şekil 3.4 Silindirik spin-3/2 Ising nanotüp sistemi için (T, h) düzleminde dinamik faz diyagramları. Dinamik faz diyagramları paramanyetik (P), ferromanyetik-3/2 ($F_{3/2}$), ferromanyetik-1/2 ($F_{1/2}$), non-manyetik (nm) temel fazlarını ve $F_{3/2}+P$ karma fazını içerir. Kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçiş çizgilerini ve içi dolu daireler dinamik üçlü kritik noktayı göstermektedir. z özel noktası dinamik sıfır sıcaklığını göstermektedir. **(a)** $r = 1.0$, $\Delta_s = 0.0$, $D = 0.0$ ve $\omega = 2\pi$, **(b)** $r = 1.0$, $\Delta_s = 0.0$, $D = -2.0$ ve $\omega = 2\pi$, **(c)** $r = 1.0$, $\Delta_s = 0.0$, $D = -4.0$ ve $\omega = 2\pi$, **(d)** $r = 1.0$, $\Delta_s = 0.0$, $D = -1.0$ ve $\omega = 2\pi$ ve **(e)** $r = 0.5$, $\Delta_s = -3.0$, $D = -2.0$ ve $\omega = 2\pi$ 83

GİRİŞ

Evrende var olan bir takım yöntemler (deney, düşünce ve/veya gözlemler) yoluyla sistematik bir şekilde anlamak, incelemek ve daha sonra ihtiyaca göre yeni düzenlemeler ve keşifler yapmak insanoğlunun var oluşundan beri mevcut olan bir gerçektir. Bu gerçek ise bilim kavramının ta kendisidir. İnsanoğlunun evrene olan merakından dolayı bilim hep gelişerek devam etti. 20. Yüzyılın başına kadar bu gelişme çok hızlı olmadı. Fakat 20. yüzyılın başlarından itibaren maddenin temel yapı taşları, elektrik, elektronik ve optiksel özellikleri hakkında farklı felsefik yorumlar ortaya atılmaya başladı. Bu konuda Max Planck, Albert Einstein, Niels Bohr, Werner Heisenberg, Erwin Schrödinger, Max Born, Louis de Broglie, Paul Dirac, Wolfgang Pauli gibi bilim adamları bazı kuramlar ortaya attılar. Kuantum fiziği olarak adlandırılan bu öngörülere göre maddeyi oluşturan parçacıklar, örneğin elektronlar hem parçacık hem de dalga gibi davranırlar. Bu şekilde atomaltı ölçeklerde belirsizlik kuramının geçerli olduğu ortaya çıktı. Bu temel öğelerden doğan kuantum mekaniği sayesinde atom ve moleküller hakkındaki bilgi ve yorumlar daha gerçekçi bir şekilde algılanıp yorumlandı [1]. Dolayısıyla bilim ve ilgili teknolojiler hızla yükselen bir ivme ile gelişme gösterdi. Kuantum mekaniği sayesinde, katıların klasik parçacık kuramı kullanarak hesaplanan bazı temel elektronik ve manyetik özelliklerinin neden gözlemlerden büyük sapmalar gösterdiği açık bir şekilde görülmüş oldu [2]. Klasik mekaniğin geçerli olduğu imalat süreçlerinde malzemelerin atomik yapısı, mekanik, elektronik ve manyetik özellikleri ancak kuantum fiziğinin temel öngörülleri anlaşıldıktan sonra daha net bir şekilde çözümlenmeye başlandı. Yarı iletken malzemeler keşfedildi, özellikle silisyum teknolojisi önem kazanıp, mikro elektronik sanayi hızla gelişerek teknoloji kavramını doğurdu. Teknoloji kavramının doğmasıyla birlikte bilgisayarlar elektronik aygıtlar üretilmeye başlandı ve bilişim teknolojileri kavramı ortaya çıktı. Bilişim teknolojilerinin hayatın vazgeçilmez birer parçaları haline gelmeleri ile mikroelektronik başta olmak üzere, optoelektronik, fotonik gibi

teknolojilerde de önemli gelişmeler meydana geldi. Ancak bütün bu gelişmelerin yanında, bilgisayarların ve elektronik cihazların her alanda insan hayatına sunduğu imkân ve teknolojik kolaylıklarla beraber, bu teknolojilerin uygulanması farklı ve yeni problemleri de ortaya çıkardı. Bu problemler; aygıtlarda meydana gelen gereksiz ve zararlı ısılar, yetersiz bilgi depolama ve işleme kapasiteleri, aygıt ve cihaz elemanların boyutlarındaki büyük hacimler sayılabilir. Bu tür problemlere çözüm bulmak için bilimle uğraşan insanlar gün geçtikçe daha küçük boyutlara inmeye, daha az yer kaplayan, daha az enerji harcayarak daha hızlı çalışabilen aygıtlar ve sistemler geliştirmeye çalıştılar. Çünkü yapılan araştırmalar bir malzemenin boyutu küçüldükçe malzemeye ait yeni özelliklerin ortaya çıktığını göstermektedir [3]. Malzemelerin büyüklüğü nanometre ölçütlerine inince kuantum davranışlar bilinen klasik davranışların yerini almakta ve malzemelerin özellikleri kesikli bir değişim göstermeye başlamaktadır. Kimyasal ve fiziksel özellikler, yapının büyüklüğüne ve atom yapısının ayrıntılarına, dışarıdan sisteme bağlanan yabancı bir atomun cinsine ve yerine göre çok farklı ve olağanüstü davranışlar sergilemektedir. Şöyle ki, mevcut nano yapıya yabancı bir atomun yapışması elektronik özellikleri, örneğin elektrik iletkenliği fark edilebilir şekilde değiştirmektedir. Bu yabancı bir atom geçiş elementi olduğunda yapıştığı bir nano yapıya manyetik özellikler kazandırabilmektedir. Kısaca, bir nano yapının fiziksel özellikleri, bağ yapısı ve dolayısı ile mukavemeti onun büyüklüğüne ve boyutuna bağlı olarak önemli değişimler gösterebilmektedir. Benzer şekilde, nano ölçeklerde atomlar arası bağ yapısı da değişikliğe uğrayabilmekte; mekanik olarak malzeme güçlenirken ya da zayıflarken, elektronik olarak iletkenlik özelliği tümüyle değişebilmektedir. Bu gibi örneklerden yola çıkarak ürettiğimiz malzemeleri nano boyutlarda incelemek merakı nanobilim ve nanoteknoloji kapısını sonuna kadar araladı [4].

Nano boyutta bir dünya olduğunu ilk defa ünlü Amerikalı fizikçi Richard Feynman ortaya atmıştır. Feynman 1959 yılında bir konferansta “*There is plenty of room at the bottom*” (Aşağıda daha çok yer var) başlıklı konuşmasında ilk defa nano boyutlardaki gizeme değinmiştir. Feynman eğer atom ve molekül büyüklüklerde üretim yapılabilirse birçok yeni keşiflerin ortaya çıkacağını bildirmiştir. Nanoteknolojinin başlangıcı olarak kabul edilen bu konuşmada nano boyutlarda uğraşların olabilmesi için, öncelikle nano ölçekte ölçme ve üretim yöntemlerinin geliştirilmesi gerektiği vurgulanmıştır. Feynman konuşmasında;

- 24 ciltlik Britannica ansiklopedisi bir toplu iğne başına yazılabilir,
- Küçük ölçeklerde motorlar,
- Biyolojik yapılardakine benzer üstün özellikli yapı ve sistemler,
- Minyatür bilgisayarlar,
- Atomlara hükmetme, onları yeniden düzenleme

gibi ilk defa duyulup daha sonra keşfedilecek birçok yeni görüşlerden bahsetmiştir.

Feynman'ın ön gördüğü düşünceler ışığında 1980'li yılların başında nano yapıların bazı fiziksel büyüklüklerini ölçmek ve nano ölçekte üretim yapmak amacıyla bazı optik cihazlar ve buna uygun yöntemler üzerinde çalışılmaya başlandı. Bu çalışmalar hem nanometre ölçeklerinde saklı yeni davranışları ortaya çıkarmak, hem de atomu görüp onu istediğimiz yere taşıyabilmemize imkân sağlamak içindi. Nitekim birçok yeni bilgiler ve keşifler bu çalışmalarla beraber açığa çıktı [5]. İşte yeni devrim ve gelecek yüzyılın teknolojisi diye adlandırılan bu gelişmeler dönemi, nanobilim ve nanoteknoloji dönemidir. Kısaca tanımlamak gerekirse nanobilim, nanometre ölçütlerinde ortaya çıkan davranışları kuantum kuramı yardımı ile anlamamızı sağlayan bilimdir. Bunun yanında nanoteknoloji ise yeni nanoyapılar tasarlayıp sentezlemeyi, yada nanoyapılara yeni olağanüstü özellikler kazandırmayı ve bu özellikleri yeni işlevlerde kullanmayı amaçlayan bilimdir. Bir başka deyişle, nano bir ölçek, nanoteknoloji de o ölçekte geliştirilen teknolojiler anlamına geliyor, bu yüzden nanobilim ve nanoteknoloji ile uğraşmak çok disiplinli bir durumdur; hedefi belirli bir konu olmayıp; işbirliği gerektiren, birçok araştırmayı içine alan geniş bir kapsama alanını oluşturur. Nano metrenin milyarda biri demek ve milyarda bir ölçekle çalışmak demektir. Atomlarla ve onların dizilişleriyle; malzemede, üretim tekniklerinde, yenilik yapmak ve ihtiyaca uygun üstün özellikli yeni ürünler geliştirmek anlamına geliyor. Nano malzemeler üstün özelliklerini, mikrometreden 10 ile birkaç yüz kat daha küçük boyuttaki yapılara borçludurlar. Nanobilimin ortaya çıkmasıyla beraber nano ölçekli sistemlerin araştırılmasına yönelik deneysel ve teorik çalışmalar, teknolojik gelişmelere paralel olarak hızla artmış ve artmaktadır.

Nanobilim ve nanoteknolojinin tarihsel gelişimine bakacak olursak:

1959: Richard Feynman'ın meşhur konferansı.

1974: Aviram ve Seiden ilk moleküler elektronik aygıt için patent aldı.

1981: G. K. Binnig ve H. Rohrer atomları tek tek görüntüleyebilmek için Taramalı Tünellemeli Mikroskobu (STM) icat ettiler.

1985: R. Curl Jr., H. Kroto and R. Smalley Karbon 60'ı keşfettiler.

1987: İletkenliğin kuantum özelliği ilk defa gözlemlendi, T.A. Fulton ve G.J. Dolan ilk defa tek elektron transistörünü yaptılar.

1988: W. De Grado ekibiyle beraber suni protein yapmayı başardılar.

1989: Sweizer ve Eigler IBM logosunu nikel bir yüzey üzerinde duran xenon (35 Xe atomu) atomlarının yerlerini yeniden düzenleyerek yazdılar.

1991: Sumio Iijima çok duvarlı karbon nanotüpleri keşfetti.

1993: Sumio Iijima ve Donald S. Bethune tek duvarlı karbon nanotüpleri keşfettiler. Rice Üniversitesi'nde ilk nanoteknoloji laboratuvarı kuruldu.

1997: N. Seeman ilk kez DNA molekülünü kullanarak nanomekanik aygıt yaptı.

1999: M. Reed ve J. M. Tour ilk defa tek organik molekül ile elektronik anahtar yaptılar.

2000: ABD'de ilk defa nanoteknoloji araştırmaları için 422 milyon \$ kaynak ayrıldı.

2001: ZnO nanotel laseri yapıldı.

2002: Süperörgü nanoteller yapıldı.

2005: Dört tekerlekli nano araba modeli hareket ettirildi.

2008: Hücre içi analizler için nanoajanların yapılması.

2013: Hücre içi manipölasyonlar için nanoaygıtların yapılması [2-4].

2015: Yapay sistemlerin kendi kendini onarabilmesi.

2018: İnsan organlarının iç yapılanmasının tanımlanması.

2021: Vücudun içinde nanomakinelerin yapılmasının ön görülmesi.

Nano boyuttaki yapıların özelliklerini, makroskobik ölçekteki yapıların özelliklerini inceleyen ve ölçen yöntemlerle tam olarak belirlemek mümkün değildir. Nano ölçekteki yapıların farklılıkları sadece ebatlarının küçüklüğü ile ilgili değil, ayrıca küçük ebatlarda farklı fiziksel özelliklerin ortaya çıkması ile de ilişkilidir. Atomik ölçülere inildikçe kuantum özellikler daha belirgin bir hal almaktadır. Bunun en önemli sonuçlarından birisi, atomların geometrik yapılarının ve dizilişlerinin maddenin bazı fiziksel özelliklerini etkilemesidir. Daha önce değindiğimiz gibi elmas ile kömürü birbirinden ayıran özellik, elmasta karbon atomlarının düzlemsel bir tabaka yerine üç boyutlu bir kristal oluşturacak şekilde dizilmeleri ve pozisyon almalarındandır. Dolayısıyla atom yapısı ve atom sayıları aynı olan bu iki maddenin fiziksel özelliklerinin tamamen farklı olmasının sebebi, atom dizilişlerinin farklı olmasından kaynaklanmaktadır. Aynı şekilde başka elementlerden oluşmuş yapıların da boyutları küçülünce benzer şekilde makro yapıya göre çok farklı özellikler göstermektedir. Başka bir örnekte bizmut kristali ile bizmut nanoteli incelendiğinde; bizmut kristali makroskopik ebatlarda yarı metal bir malzeme karakteri gösterirken, nanotel halinde bizmut yarı iletken bir malzeme özelliği göstermeye başlamaktadır. Aynı atomlardan oluştuğu halde geometriler değişince birbirinden apayrı davranışa sahip iki farklı malzeme karşımıza çıkmaktadır, üstelik her iki yapıda da atomların birbirlerine bağlanma şekilleri de aynıdır. Bu örnekler bize maddenin elektronik özellikleri, optik özellikleri gibi özelliklerinin boyutla değiştiğini göstermektedir. Bundan; malzemelerin nanoölçekteki yapılarını kontrol etmeyi başarmakla birçok özelliği ve dolayısıyla işlevleri de kontrol edilebilmiş olacağımız sonucunu çıkarabiliriz [1, 2, 5]

Nanobilimin en büyük amacı, nanometre ölçekli yapıların analizlerini yapmaktır. Bu boyuttaki nesnelere, cihazların ve sistemlerin fiziksel özelliklerinin saptanması ve bu fiziksel özelliklere göre nanometre ölçekli yapıların imalatı, bu yolla malzemelerin

yenilenmesi ve geliştirilmesi, nano ölçekli ve duyarlı cihazların geliştirilmesi, uygun yöntemler bulunarak nanoskopik ve makroskopik dünya arasındaki bağı kurulmasıdır [3, 4, 5].

Nanobilimin ve nanoteknolojinin gelişmesinde en önemli etmen; nano ölçekte ölçme ve inceleme yapabilen mikroskoplar ve bu boyutlarda işlemler yapabilmek için oluşturulan yöntemlerdir. Günümüzde malzemelerin atomik boyutlarda inceleyip işlemek fikri ve uygulamaları:

- Saçılma Yöntemleri
- Taramalı Elektron Mikroskobu
- Transmisyon Elektron Mikroskobu (TEM)
- Taramalı Sonda Mikroskobu
- Taramalı Tünellemeli Mikroskop
- Atomik Kuvvet Mikroskobu
- Yakın Alan Taramalı Optik Mikroskop
- Mössbauer Spektrometresi

gibi gelişmiş yöntemlerin, mikroskopların ve spektrometrelerin üretilmesiyle beraber, bilim ve teknolojiye yeni bir boyut kazandırmıştır. Bu bilgiler ışığında nanometre ölçülerinde fiziksel ve kimyasal olayların anlaşılması ve kontrolü ile bu boyutlarda fonksiyonel malzemelerin, cihazların, sistemlerin geliştirilmesi ve üretilmesi mümkün olmuştur. Bu yöntemler sayesinde, özellikle yakın tarihte, bilim ve teknolojiye hızla kat edilen mesafeler eskiye nazaran akıl almaz bir seviyeye ulaşmıştır. Bu gibi gelişmeler oldukça insanoğlunun malzemeyle olan ilişkisi gittikçe artmış ve ileri malzeme teknolojisi, gelişmişlik seviyesinin temel bir göstergesi haline gelmiştir [2-5].

Nanobilimin ortaya çıkmasıyla beraber nano ölçekli sistemlerin araştırılmasına yönelik deneysel ve teorik çalışmalar, teknolojik gelişmelere paralel olarak hızla artmış ve

artmaktadır. Son yıllarda, nanotel, nanotüp, nanoparçacık, nanotop, nanonoktacık ve nano ölçekli incefilm gibi nano yapıları malzemelerin manyetik özellikleri en fazla çalışılan konular arasındadır. Bunun nedeni, bu nano parçacıkların; yüksek kapasiteli manyetik kayıt cihazları [6,7], sensörler ve moleküler görüntüleme cihazları [8, 9], kalıcı mıknatıslar [10], lineer olmayan optik [11], çevre ıslahı [12], medikal uygulamalar [13,14] ve kemoterapi tedavisi [15,16] gibi çeşitli alanlarda büyük bir uygulama alanına sahip olmalarından kaynaklanmaktadır. Bu sistemlerin manyetik özellikleri, büyüklükleri ve boyutlarıyla yakından ilişkilidir. Bir manyetik sistemin büyüklüğü nano ölçeğe düşürüldüğünde, bulk (malzemenin yüzey etkilerinden bağımsız iç kısmı) sistemlerde olmayan ve yüzeyin fiziksel özelliklerine son derece bağlı olan yeni manyetik özellikler sergilemektedirler [17]. Bu açıdan baktığımızda, nano malzemelerin elektronik ve manyetik özelliklerinin teorik olarak belirlenmesi çok önemlidir. Literatürde bunun için en çok kullanılan yöntem DFT (Density Functional Theory) yöntemidir. Örneğin; Srivastava ve Sen [18] DFT kullanarak BNC₂ yapısındaki nanoparçacığın tabakalarındaki yapısal kusurları incelediler. Azevedo ve ark. [19] DFT kullanarak B-C-N nanotüplerin elektronik özellikleri üzerinde deformasyon etkilerini incelediler. Jalilian ve ark. [20] DFT kullanarak BN (Boron Nitrit) nanotüp paketi içinde kapsüllü Fe, Co ve Ni atomik zincirlerin elektronik ve manyetik özelliklerini incelediler. Bengu ve ark. [21] yüksek çözünürlüklü elektron mikroskobu ve DFT kullanarak BN nano yapıları üzerindeki kusurları incelediler. Bengu ve ark. [22] DFT kullanarak B-C-N ince filmlerin yapı ve bağlanmasını teorik ve spektroskopik olarak incelediler. Hever ve ark. [23] DFT kullanarak SP³ tipi silikon nanotüplerin elektronik özelliklerini ve yapısal kararlılığını incelediler. Pon Ju ve ark. [24] DFT kullanarak ultra ince SiO₂ silikon nanotellerin elektronik ve yapısal özelliklerini incelediler. Wang ve ark. [25] DFT kullanarak demir nanoteller ile doldurulmuş tek duvarlı GeC nanotüplerin manyetik ve elektronik özelliklerini incelediler. DFT yöntemi kullanılarak nano parçacıklar üzerine daha birçok çalışma yapılmış ve yapılmaktadır.

Diğer taraftan, nano yapıları malzemelerin Ising modeliyle çok basit bir şekilde tanımlanabilmesinden dolayı, bu tür malzemelerin manyetik özellikleri, MFA (Mean Field Approximation), EFT (Effective Field Theory), MC (Monte Carlo) simülasyonu, VCE (Variational Cumulant Expansion) ve BPA (Bethe-Peierls Approximation) gibi yöntemler kullanılarak Ising spin sistemleriyle de incelenmektedir. Örneğin; Leite ve

Figueiredo [26] MFA ve MC kullanarak nano parçacıkları incelemiştir. Kaneyoshi [27-31] EFT ve MFA yöntemlerini kullanarak nanotel, nanotüp, nanoparçacık ve nano ölçekli ince filmlerin manyetik özelliklerini inceledi. Zaim ve ark. [32,33] MC metodunu kullanarak öz ve kabuktan oluşan nanoparçacıklar için kritik, telafi (compensation) sıcaklıklarını ve mıknatıslanmalarını elde ettiler. Lui ve ark. [34] silindirik amorf Co nanotelinin manyetik özelliklerini MC metodunu kullanarak incelediler. Wang ve ark. [35] özü Co atomlarından yeleği Cu atomlarından oluşan öz/kabuk yapısına sahip nanotelin elektronik ve manyetik özelliklerini Hartee-Fock yaklaşımını kullanarak sıkı-bağlanma (tight-binding) modeli ile incelediler. Wang ve ark. [36,37] VCE metodunu kullanarak, kübik yapılu Ising nanoparçacıklarının; basit kübik (sc), cisim merkezli kübik (bcc) ve yüzey merkezli kübik (fcc) manyetik nano yapılar için faz diyagramlarını ve kritik sıcaklıkları elde ettiler. Konstantinova [38] MC metodunu kullanarak farklı yarıçaplara sahip nanotüplerin manyetizasyon, alınganlık ve özısı diyagramlarını elde etti. Igleşis ve Labarta [39] MC metodunu kullanarak nanoparçacıklarda sonlu boyut ve yüzey etkilerini incelediler. Michael ve Trimper [40] Green fonksiyonu metodunu kullanarak Ising modeli ile ferroelektrik nanoparçacıklar için polarizasyon, histerezis ve kritik sıcaklık diyagramlarını elde ettiler. Scheinfein ve ark. [41] CaF_2/Si (111) yüzeyine depolanan Fe parçacıklarından oluşan nano-ölçekli bir yapının manyetik özelliklerini yapıyı oluşturan parçacıkların yarıçap ve yoğunluklarına bağlı olarak MC ve MFA ile inceleyerek, elde edilen süper paramanyetiklik verileriyle, aynı yapının deneysel elde edilen süper paramanyetiklik sonuçları arasında nicel uyumluluklar olduğunu gözlemlediler. Bakuzis ve Morais [42] Van der Waerden özdeşliğini kullanarak diferansiyel operatör tekniği ile manyetik nano parçacıklardan oluşan sistemlerin süper paramanyetik özellikleri ile bu yapıların büyüklükleri arasındaki bağımlılığı incelediler. Hanafin ve ark. [43] MC metodu ve DFT kullanarak, CoO nano yapısının manyetik ve termodinamik özelliklerini incelediler. Rego ve Figueiredo [44] BPA metodunu kullanarak nanoparçacıkların manyetik özelliklerini hesaplamak için yeni bir model geliştirdiler ve öz ve kabuktan oluşan hegzagonal bir nanosistem için manyetizasyon ve histerezis diyagramlarını elde ettiler. Yalçın ve ark. [45] BPA kullanarak tek-bölgeli (single-domain) öz ve kabuktan oluşan bir nano yapı için manyetizasyon ve histerezis diyagramlarını elde ettiler. Leite ve Figueiredo [46] iki boyutta hegzagonal nano yapıya sahip bir nanosistemin manyetik özelliklerini MFA ve MC metodu ile incelediler ve yüzeyi spin-glass türü

düzensizliğine sahip antiferromanyetik malzemeler için düşük sıcaklıklarda sadece özdeki antiferromanyetik parçacıklar için histerezis eğrilerinin oluştuğunu gözlemledik ve elde ettikleri teorik sonuçların, Lin ve ark. [47], Morrish ve ark. [48], Kodama ve ark. [49] elde ettikleri deneysel sonuçlarla uyumlu olduğunu gözlemledik. Keskin ve ark. [50] EFT kullanarak spin-1/2 Ising nanotel için histerezis özellikleri incelediler. Şarlı ve Keskin [51] EFT kullanarak spin-1 için alıngalık ve histerezis özellikleri incelediler. Şarlı [52] EFT kullanarak karma spin-1/2 öz ve spin-1 kabuk Ising nanotüp için alıngalık, iç enerji ve ısı sığasının band yapısını inceledi. Canko ve ark. [53] EFT kullanarak karma spin-1/2 öz ve spin-1 kabuk Ising nanotüp için manyetik özelliklerin kristal alana bağımlılığını incelediler. Akıncı [54,55] EFT kullanarak rastgele dağıtılan manyetik alanın Ising nanotelin manyetik özelliklerine etkisini inceledi. Yüksel ve ark. [56] MC kullanarak karma spin-3/2 öz ve spin-1 kabuk ferrimanyetik nano parçacık için faz diyagramlarını incelediler. Zaim ve ark. [57] öz-kabuk yapısındaki ferroelektrik ya da ferrielektrik nanotüplerin histerezis ilmeklerini spin-1/2 Ising sistemi için teorik olarak incelediler. Liu ve ark. [58] kristal alan ve transverse alan varlığında özü spin-1, kabuğu spin-3/2 manyetik atomlarından oluşan kübik nanotel sisteminin mıknatıslanma ve faz diyagramlarını çalıştılar. Kaneyoshi [59] nano ölçekli transverse Ising ince filmlerinin karakteristik özelliklerini seyreltilmiş yüzeyler varlığında inceledi. Yüksel ve ark. [60] silindirik Ising nanotelin manyetik özellikleri üzerinde bağ seyreltmenin etkisini araştırdılar. Jiang ve ark. [61] tek-iyon anizotropi ve transverse alan varlığında ferrimanyetik hegzagonal nanotelin manyetik özellikleri üzerinde yüzey etkilerini incelediler. Zaim ve ark. [62] öz/kabuk yapısındaki nanotellerin manyetik özellikleri üzerinde rastgele alanın etkisini çalıştılar. Masrour ve ark. [63] MC Simülasyonunu kullanarak dekore Ising nanotüp sisteminin manyetik özelliklerini araştırdılar. Magoussi ve ark. [64] rastgele manyetik alanın spin-1 Ising nanotüp sisteminin histerezis davranışları üzerindeki etkisini incelediler. Kantar ve ark. [65] öz-kabuk yapıdaki karma spin Ising nanoparçacığın manyetik özelliklerini çalıştılar. Jiang ve ark. [66] öz/kabuk yapısındaki çok katmanlı ve çok alt örgülü kübik nano tel sisteminin manyetik özellikleri üzerinde yüzey etkilerini incelediler. Kocakaplan ve ark. [67] olasılık dağılımı tekniği temelli EFT kullanarak kristal alan varlığında silindirik enine (transverse) spin-1 Ising nanotel sisteminin histerezis ilmeklerini ve telafi davranışlarını ayrıntılı bir şekilde incelediler. Magoussi ve ark. [68] spin-1 Ising nanotüp sisteminin manyetik özellikleri üzerinde trimodal rastgele alanın etkilerini araştırdılar. Kantar ve

Kocakaplan [69] öz/kabuk yapısındaki hegzagonal tipi Ising nanotel sisteminin faz diyagramlarını ve telafi davranışlarını detaylıca incelediler. Boughazi ve ark. [70] silindirik öz/kabuki yapısındaki nanotelin faz diyagramlarını ve manyetik özelliklerini ayrıntılı çalıştılar. Jiang ve ark. [71] Metalik nanotüplerin manyetik ve termodinamik özelliklerini araştırdılar. Canko ve ark. [72] silindirik Ising nanotüp sistemi üzerinde spin-1 Blume-Capel (BC) modelinin histerezis davranışlarını incelediler. Boughrara ve ark. [73] karma spin-1/2 öz ve spin-1 kabuk ferrimanyetik nanotel sisteminin manyetik özelliklerini ve faz diyagramlarını çalıştılar. Kocakaplan ve Kantar [74] özü spin-1/2 ve kabuğu spin-1 manyetik atomlarından oluşan karma spin hegzagonal tip Ising nanotel sisteminin termodinamik ve manyetik özelliklerini araştırdılar. Taşkın ve ark. [75] özü spin-1/2 ve kabuğu spin-3/2 manyetik atomlarından oluşan nanotüp sisteminin termal ve manyetik özelliklerini incelediler. Burada verilen bu çalışmaların hepsi nano yapı malzemelerin denge durumundaki özellikleri, örneğin; düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişimi, histerezis eğrileri, kritik üsteller, re-entrant olaylar, denge faz geçişleri ve denge faz diyagramları ile ilgilidir.

Diğer taraftan, nano yapı malzemelerin dengede olmama durumundaki özellikleri, yani dinamik davranışları üzerine de çalışmalar yapılmaya başlanmıştır. Deviren ve Keskin [76] EFT ve Glauber-tipi stokastik dinamik kullanarak spin-1/2 Ising nanotüp için zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan altında dinamik mıknatıslanmaların termal davranışlarını incelediler. Deviren ve ark. [77, 78] spin-1/2 Ising nanotel için zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan altında dinamik faz geçişlerini ve dinamik mıknatıslanmaları araştırdılar. Yüksel ve ark. [79] zaman bağlı manyetik alan altında öz ve kabuktan oluşan ferrimanyetik nano parçacığın histerezis ve dinamik faz geçiş özelliklerini incelediler. Deviren ve ark. [80] kinetik silindirik spin-1/2 Ising nanotüp sisteminin dinamik manyetik özelliklerini çalıştılar. Vatansever ve Polat [81] dinamik MC simülasyonunu kullanarak küresel ferimanyetik öz-kabuk yapısındaki nanoparçacığın dinamik manyetik özelliklerini zamana bağlı salınımlı manyetik alan altında incelediler. Yüksel [82] nano boyuttaki aşırı ince BC filmlerinin dinamik faz geçişlerini dinamik MC similasyonunu kullanarak inceledi. Vatansever ve Polat [83] dinamik MC similasyonunu kullanarak öz-kabuk yapısındaki nano kübik parçacığın dinamik manyetik özelliklerini araştırdılar. Ertaş ve Kocakaplan [84] silindirik spin-1/2 hegzagonal tipi Ising nanotel sisteminin dinamik manyetik özelliklerini çalıştılar.

Kantar ve ark. [85] zamana bağılı salınımlı manyetik alan altında silindirik spin-1/2 Ising nanotel sisteminin dinamik faz diyagramlarını elde ettiler. Wang ve ark. [86] silindirik öz-kabuk yapısındaki ferrolektrik nanotüplerin faz diyagramlarının dinamik özelliklerinin incelediler. Burada şu noktayı da belirtelim ki, bu çalışmaların çoğunda spin-1/2 veya spin-1 Ising sistemi incelenmiştir. Bunun nedeni ise bu sistemlerin en basit Ising sistemleri olmasıdır. Dolayısıyla, nano yapılı malzemelerin spin-3/2, spin-2 ve spin-5/2 gibi yüksek spin değerli Ising sistemleriyle incelenmesi önem arz etmektedir.

Spin-3/2 Ising modeli, Ising modelleri içerisinde önemli modellerden birisidir. Bu model için Hamiltonyen ifadesi bilineer (J), bikuadratik (K) ve kristal alan (D) etkileşme parametrelerini içeriyorsa, spin-3/2 Blume-Emery-Griffiths (BEG) modeli, J ve K parametrelerini içeriyorsa izotropik spin-3/2 BEG, J ve D parametrelerini içeriyorsa spin-3/2 Blume-Capel (BC) modeli diye adlandırılır. Fizikte bazı sistemler vardır ki iki durumlu spin-1/2 ve üç durumlu spin-1 Ising sistemleri ile açıklanamıyor. Bu sistemler dört durumlu ve üç düzen parametrelili olup ancak spin-3/2 Ising modelleri ile incelenebilirler. Örneğin, nadir toprak bileşenlerinden biri olan DyVO₄ (Dysprosium Vanadate) üzerine yapılan deneysel çalışmalarda [87-91], DyVO₄'ün 14 K'de tetragonal yapıdan ortorombik yapıya kristalografik ve 3 K' de de manyetik olmak üzere arka arkaya iki faz geçişi verdiği görülmüştür. Bu tür sistemler ise, ilk defa Sivardiére [92, 93], Sivardiére ve Blume [94] ve Sivardiére ve ark. [95] tarafından önerilen dört durumlu spin-3/2 Ising sistemiyle açıklanabilmektedir. Daha sonra, Krinsky ve Mukamel [96] spin-3/2 Ising sistemi ile etanol (C₂H₅OH), karbondioksit (CO₂) ve su (H₂O)'dan oluşan üçlü sıvı karışımının açıklanabileceğini göstermiştir. Scheffler ve ark. [97] spin-3/2 değerine sahip GaP deki kusurların tanımını ve elektronik yapılarını incelediler. Sowa ve Falicov [98], çoklu parçacık küçük küme teorisi ile bcc yapıdaki Fe, Co ve Fe-Co alaşımını incelediler. LaGraffve Dowben [99] ince Gd tabakalarının manyetik düzenini incelediler. Irwin ve Sanford [100] bir ferri oksit spin camı olan BaSn_xTi_{2-x}Fe₄O₁₁ bileşiğinin Mossbauer spektrometresi için spin durulma zamanını incelediler. Bu malzemeler spin-3/2 değerine sahiplerdir. Lewandowski ve Wilson [101] Ab initio yöntemini kullanarak spin-3/2 ile CaF₂ bileşiğindeki Mn safsızlığının uyarılmış durumlarının kendi içerisindeki tutarlı çoklu konfigürasyonlarını incelediler. Stoddard ve ark. [102] nadir NaSn moleküler yarı

iletkeni için atomik hareketleri incelediler. Khalifah ve ark. [103] yarı bir boyutlu spin-3/2'li La_3RuO_7 bileşiğinin manyetik ve elektronik özelliklerini incelediler. Horváth ve ark. [104] $\text{KEr}(\text{MoO}_4)_2$ bileşiği için $S=3/2$ BC modelini incelediler. Kaneyoshi ve Jaščur [105] ve Kaneyoshi ve Benyousef [106] EFT kullanılarak bal peteği örgü üzerinde spin-3/2 BC modelinin manyetik özelliklerini incelediler. Antiferromanyetik spin-3/2 BC modelindeki faz geçişleri, kümesel değişim metodu ile Keskin ve ark. [107] tarafından incelenmiştir. Albayrak ve Keskin [108] kesin tekrarlıma bağıntılarını kullanarak Bethe kafesi üzerinde spin-3/2 BC modelini çözdüler ve faz diyagramında birinci-dereceden faz geçiş sıcaklığını yaklaşık olarak hesaplamalarının yanında, Curie ya da ikinci-dereceden faz geçiş sıcaklığı için kesin ifadeyi elde etmişlerdir. Özsoy ve ark. [109] tekrarlıma bağıntılarını kullanarak Bethe kafesi üzerinde spin-3/2 BC modelinin mıknatıslanma, dipol ve kuadrupol moment terimlerinin termal davranışlarını ayrıntılı bir şekilde incelediler. Ekiz ve ark. [110], manyetik alanın varlığında ve yokluğunda spin-3/2 BEG modeli için Bethe kafesi üzerinde tam tekrarlıma bağıntılarını kullanarak faz diyagramlarını elde etmişlerdir. Spin-3/2 BEG modelinin zamana bağlı davranışı Canko ve ark. [111] tarafından Glauber-tipi stokastik dinamik kullanılarak incelenmiş ve dinamik düzen parametreleri yardımıyla da dinamik faz geçiş sıcaklıkları bulunmuştur. Keskin ve Canko [112], modelin dinamiğini en düşük dereceli kümesel değişim metodu kullanarak incelemiş ve sistemin denge faz diyagramlarının yanında yarı kararlı faz diyagramlarını sunmuşlardır. Keskin ve ark. [113], spin-3/2 BC modelini salınımlı dış manyetik alan altında Glauber-tipi stokastik dinamik kullanarak incelemişler ve modelin dinamik faz diyagramlarını elde etmişlerdir. Xue ve ark. [114] nano ölçekte GaAs örneğinin istatistiksel nükleer spin kutuplanmasını ölçtüler. Tomiyasu ve ark. [115] spinel spin-3/2 HgCr_2O_4 bileşiğinin moleküler spin-sıvı halini incelediler. Okuda ve ark. [116] bir spin-3/2 antiferromanyetik üçgen örgü ile $\text{CuCr}_{1-x}\text{MgO}_2$ bileşiğinin termal ve manyeto taşıma özelliklerini incelediler. Romhányi ve Penc [117] spin-3/2 Ising sistemini kullanarak güçlü bir kristal alan ile $\text{Ba}_2\text{CoGe}_2\text{O}_7$ çoklu bozon spin dalga teorisini incelediler. Ayrıca Cr^{3+} iyonu ve ^{132}Cs , ^9Be , ^{135}Ba , ^{137}Ba ve ^{201}Hg elementleri gibi malzemelerde spin-3/2 atomlu malzemelerdir. Dolayısıyla, bu tür malzemeler için model oluşturan spin-3/2 Ising sisteminin manyetik özelliklerinin incelenmesi önem arz etmektedir.

Literatürde bu çalışmalar olmasına rağmen, spin-3/2 Ising nanotüp sisteminin denge ve dengede olmama (dinamik) durumları için manyetik özellikleri, en iyi bilgilerimiz dâhilinde, bu tez çalışması kapsamı dışında incelenmemiştir. Literatürdeki bu eksiği gidermek için denge durumunda korelayonlu EFT, dinamik durumda ise Glauber-tipi stokastik dinamik temelli korelasyonlu EFT (DEFT) yaklaşımları kullanılarak basit kare örgü ve silindirik Ising nanotüp sistemleri için spin-3/2 BC modelinin manyetik özellikleri detaylıca incelenecektir.

Giriş bilgilerinden sonra, 1. Bölüm' de denge durumu için silindirik spin-3/2 Ising nanotüp sisteminin termodinamik ve manyetik özellikleri, mıknatıslanma, iç enerji, ısı sığası, alınganlık, entropi, serbest enerji, histerezis ilmeği, faz diyagramı ve telafi davranışları gibi, korelasyonlu EFT kullanılarak kapsamlıca incelenecektir. İlk olarak sistemin model ve formülasyonu tanımlanacak ve bundan yararlanarak sistemin düzen parametreleri (m_{S1} , m_{S2} ve m_C mıknatıslanmaları, q_{S1} , q_{S2} ve q_C kuadrupol momentleri ve r_{S1} , r_{S2} ve r_C oktopolar momentleri) için EFT denklemleri elde edilecektir. Düzen parametrelerinden yararlanarak termodinamik ve manyetik nicelikler için gerekli olan denklemler elde edilecektir. Birbirlerine bağlı bu çiftlenimli denklemler numerik olarak çözülecek ve sistemin düzen parametreleri ile termodinamik ve manyetik niceliklerinin termal davranışları sistem parametrelerinin çeşitli değerleri için hesaplanacaktır. Düzen parametrelerinin sıcaklığın fonksiyonu olarak davranışları incelenerek faz geçiş sıcaklıkları tespit edilecek ve aynı zamanda faz geçişlerinin doğası (kesikli veya sürekli yani birinci- veya ikinci-derece faz geçişleri) karakterize edilecektir. Ayrıca sistemde var olan telafi davranışlarını bulabilmek için sistemdeki toplam mıknatıslanmanın sıcaklığın bir fonksiyonu olarak davranışı incelenecektir. Faz diyagramları farklı düzlemlerde sunulacaktır.

2. Bölüm' de spin-3/2 BC modelinin dinamik davranışlarının DEFT ile incelenirken modelin ve metodun tanımlanması ve anlaşılabilir olması bakımından basit kare örgü üzerinde uygulaması verilecektir. İlk önce kare örgü üzerinde spin-3/2 BC sistemi için DEFT denklemleri Glauber geçiş oranları kullanılarak elde edilecektir. Sistemlerdeki mevcut olan fazları elde etmek için, ortalama mıknatıslanmanın zamana bağlı davranışları incelenecektir. Elde edilecek olan bu diferansiyel denklemler Adams-Moulton kestirme ve düzeltme, Runge-Kutta, vb gibi nümerik yöntemlerle çözülecek ve

ortalama düzen parametrelerinin zamana göre değişimi kapsamlıca incelenerek sistemlerde oluşan fazlar tespit edilecektir. Dinamik düzen parametrelerini veren denklemler Adams-Moulton kestirme ve düzeltme ve Romberg integrasyon yöntemiyle beraber kullanılarak çözülecek ve dinamik düzen parametrelerinin indirgenmiş sıcaklığa göre değişimleri kapsamlıca incelenerek, sistemlerde meydana gelen dinamik faz geçişlerinin tabiatı (birinci- ve ikinci-derece) karakterize edildi ve aynı zamanda dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıkları bulunacaktır. Daha sonrada hesaplanan DFG sıcaklıkları kullanılarak sistemlerin dinamik faz diyagramları (T/zJ , h/zJ) düzleminde sunulacaktır.

3. Bölümde silindirik spin-3/2 Ising nanotüp sisteminin dinamik manyetik özellikleri, yani sistemdeki fazların elde edilmesi, dinamik düzen parametrelerinin termal davranışı, dinamik faz geçiş noktaları ve dinamik faz diyagramları gibi, salınımlı dış manyetik alan varlığında DEFT yaklaşımı kullanılarak detaylıca incelenecektir. Silindirik spin-3/2 Ising nanotüp sistemini için DEFT denklemleri Glauber geçiş oranları kullanılarak elde edilecektir. Sistemlerdeki mevcut olan fazları elde etmek için, ortalama mıknatıslanmanın zamana bağlı davranışları incelenecek. Elde edilecek olan bu diferansiyel denklemler Runge-Kutta, Adams-Moulton kestirme ve düzeltme, vb gibi nümerik yöntemlerle çözülecek ve ortalama düzen parametrelerinin zamana göre değişimi kapsamlıca incelenerek sistemlerde oluşan fazlar tespit edilecektir. Dinamik düzen parametrelerini veren denklemler Adams-Moulton kestirme ve düzeltme ve Romberg integrasyon yöntemiyle beraber kullanılarak çözülecek ve dinamik düzen parametrelerinin indirgenmiş sıcaklığa göre değişimleri detaylıca incelenerek, sistemlerde meydana gelen dinamik faz geçişlerinin tabiatı (birinci- ve ikinci-derece) karakterize edilecek ve aynı zamanda dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıkları bulunacaktır. Sonrada, hesaplanan DFG sıcaklıkları kullanılarak sistemlerin dinamik faz diyagramları (T , h) düzleminde sunulacaktır.

Son olarak 4. Bölüm' de, yapılan çalışmalar özetlenerek elde edilen sonuçların tartışılması yapılmış ve gelecekte yapılabilecek veya yapılması gerekli çalışmalar önerilecektir.

1. BÖLÜM

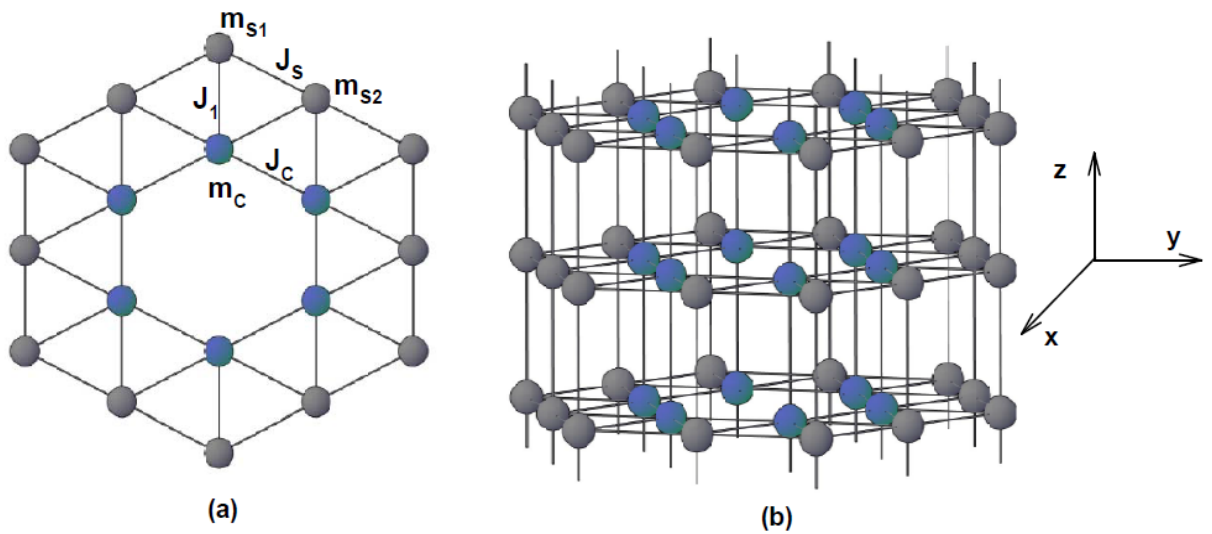
SİLİNDİRİK SPİN-3/2 ISING NANOTÜP SİSTEMİNİN DENGE DURUMUNDAKİ MANYETİK ÖZELLİKLERİ

1.1 Giriş

Bu bölümde silindirik spin-3/2 Ising nanotüp sisteminin denge durumundaki termodinamik ve manyetik özellikleri, mıknatıslanma, iç enerji, ısı sığası, alınganlık, entropi, serbest enerji, histerezis ilmeği, faz diyagramı ve telafi davranışları gibi, korelasyonlu Etkin-Alan Teorisi (EFT) kullanılarak kapsamlıca incelenecektir. İlk olarak sistemin model ve formülasyonu tanımlanacak ve bundan yararlanarak sistemin düzen parametreleri yani mıknatıslanmaları, kuadropol momentleri ve oktopolar momentleri için EFT denklemleri elde edilecektir. Düzen parametrelerinden yararlanarak termodinamik ve manyetik nicelikler için gerekli olan denklemler elde edilecektir. Birbirlerine bağlı bu çiftlenimli denklemler nümerik olarak çözülecek ve sistemin düzen parametreleri ile termodinamik ve manyetik niceliklerinin termal davranışları sistem parametrelerinin çeşitli değerleri için hesaplanacaktır. Düzen parametrelerinin sıcaklığın fonksiyonu olarak davranışları incelenerek faz geçiş sıcaklıkları tespit edilecek ve aynı zamanda faz geçişlerinin doğası (kesikli veya sürekli yani birinci- veya ikinci-derece faz geçişleri) karakterize edilecektir. Ayrıca sistemde var olan telafi sıcaklıklarını bulabilmek için sistemdeki toplam mıknatıslanmanın sıcaklığın bir fonksiyonu olarak davranışı incelenecektir. Faz diyagramları farklı düzlemlerde sunulacaktır.

1.2 Modelin Tanıtımı ve Formülasyonu

Silindirik nanotüp sistemine en yakın örgü hegzagonal örgü yapısıdır. Bu nedenle nanotüp sistemini tanımlamak için yaygın olarak kullanılan basit şematik gösterim Şekil 1.1 deki gibi verilmektedir. Şekil 1.1 de mavi küreler nanotüp içindeki öz (core) manyetik atomlarını, gri küreler nanotüp yüzeyindeki kabuk (shell) manyetik atomlarını göstermektedir.



Şekil 1.1 Silindirik nanotüp sisteminin şematik temsili: **(a)** ara kesit ve **(b)** üç boyutlu. Gri ve mavi küreler sırasıyla kabuktaki ve özdeki spin-3/2 manyetik atomları göstermektedir.

En yakın komşu etkileşmelerini, kristal alan veya tek-iyon anizotropi terimini ve dış manyetik alan terimini içeren silindirik spin-3/2 Ising nanotüp sisteminin Hamiltonyen ifadesi,

$$H = -J_S \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - J_C \sum_{\langle mn \rangle} S_m S_n - J_1 \sum_{\langle im \rangle} S_i S_m - D \left(\sum_i (S_i)^2 + \sum_m (S_m)^2 \right) - h \left(\sum_i S_i + \sum_m S_m \right) \quad (1.1)$$

şeklinindedir. Burada $\langle \dots \rangle$ toplamın en yakın komşu çiftler üzerinden olacağını göstermektedir. Spin-3/2 Ising modeli dört durumlu ve üç düzen parametrelili bir sistemdir. Burada durumdan kastedilen her bir spin değerinin ortalama kesirsel değeridir ve durum değişkeni olarak adlandırılır. Bu sebepten, Şekil 1.1' de her bir noktadaki manyetik atomlar $S_i = +3/2, +1/2, -1/2, -3/2$ değerlerini alabilir. J_S, J_C ve J_1 sırasıyla

kabuk manyetik atomları arasındaki bilineer etkileşme parametresi, öz manyetik atomları arasındaki bilineer etkileşme parametresi ve kabuk ile öz atomları arasındaki bilineer etkileşme parametresidir (Şekil 1.1' e bakabilirsiniz). D kristal-alan veya tek-iyon anizotropi etkileşme terimi ve h ise dış manyetik alandır. Nano yapılı malzemelerin fiziksel özellikleri üzerinde kabuk yüzeyindeki atomlarının etkisi çok fazla olduğundan genellikle nano yapılı malzemelerde kabuk yüzeyinde manyetik atomlar arasındaki bilineer etkileşme terimi

$$J_s = J_c (1 + \Delta_s) \quad (1.2)$$

şeklinde tanımlanır. Ayrıca kolaylık olması bakımından kabuk ile öz atomları arasındaki bilineer etkileşme parametresi $r = J_1 / J_c$ şeklinde tanımlanır. Ayrıca, bu tez çalışması boyunca $J_c = 1.0$ alınacaktır. $r > 0$ olduğunda öz ve kabuk yüzeyindeki spinlerin yönelimleri birbirine paraleldir ve sistem ferromanyetik spin konfigürasyonu gösterir. Şayet $r < 0$ olursa, öz ve kabuktaki spin yönelimleri birbirine zıt yönlü olur ve sistem antiferromanyetik veya ferrimanyetik spin konfigürasyonu gösterir.

Yukarıda, spin-3/2 Ising modelinin üç düzen parametrelili bir sistem olduğunu söylemiştik. Bu düzen parametreleri, mıknatıslanma (m), kuadrupol moment (q) ve oktopolar moment (r) parametreleridir. Bu düzen parametreleri aşağıdaki gibi tanımlanır.

- $m = \langle S \rangle$ şeklinde ortalama mıknatıslanma olup çift kutup momenti veya dipol momenti olarak adlandırılır ve bir tarafa yönelmenin diğer tarafa yönelmeden fazlalığını gösterir.
- $q = \langle S^2 \rangle$ şeklinde kuadrupol moment terimidir ve mıknatıslanmanın karesi olarak bilinir.
- $r = \langle S^3 \rangle$ şeklinde oktopolar moment terimidir ve mıknatıslanmanın üçüncü dereceden kuvvetidir.

Diğer taraftan, EFT yöntemi ilk kez Honmura ve Kaneyoshi [118] ile Kaneyoshi ve arkadaşları [119] tarafından tanımlansa da, nano yapılı malzemelerde (nanotüp veya nanotel gibi) manyetik özellikleri incelemek için korelasyonlu EFT yöntemini Kaneyoshi kullanmıştır. Korelasyonlu EFT' de, spin-3/2 Ising sistemi için ortalama mıknatıslanma ifadesi,

$$\langle S_i^k \rangle = \left\langle \prod_{i=1}^z [a_0 + a_1 S_i + a_2 S_i^2 + a_3 S_i^3] \right\rangle F_k(x+h) \Big|_{x=0}, \quad (1.3)$$

şeklinde verilir. Bu eşitlik Callen'in 1963'te, spin-1/2 [120] için elde ettiği spin korelasyonunu ifade eden Callen eşitliği ifadesinin, spin-3/2 için genelleştirilmiş şeklidir. Burada $\langle \dots \rangle$ ifadesi kanonik küme ortalamasını göstermektedir. Spin-3/2 için $k = 1, 2$ ve 3 değerlerini alır. Burada z en yakın komşu sayısını gösterir. Denklem (1.3) kesindir ve herhangi bir örgü için geçerlidir. Denklem (1.3)'ü Ising nanotüp sisteminin düzen parametreleri için aşağıdaki gibi yazabiliriz.

$$\langle S_i \rangle = \left\langle \prod_{i=1}^2 [a_0 + a_1 S_i + a_2 S_i^2 + a_3 S_i^3] \right\rangle \left\langle \prod_{m=1}^2 [a_0 + a_1 S_m + a_2 S_m^2 + a_3 S_m^3] \right\rangle \left\langle \prod_{k=1}^1 [b_0 + b_1 S_k + b_2 S_k^2 + b_3 S_k^3] \right\rangle F_1(x+h) \Big|_{x=0}, \quad (1.4a)$$

$$\langle S_m \rangle = \left\langle \prod_{m=1}^2 [a_0 + a_1 S_m + a_2 S_m^2 + a_3 S_m^3] \right\rangle \left\langle \prod_{i=1}^2 [a_0 + a_1 S_i + a_2 S_i^2 + a_3 S_i^3] \right\rangle \left\langle \prod_{k=1}^2 [b_0 + b_1 S_k + b_2 S_k^2 + b_3 S_k^3] \right\rangle F_1(x+h) \Big|_{x=0}, \quad (1.4b)$$

$$\langle S_k \rangle = \left\langle \prod_{k=1}^4 [c_0 + c_1 S_k + c_2 S_k^2 + c_3 S_k^3] \right\rangle \left\langle \prod_{i=1}^1 [b_0 + b_1 S_i + b_2 S_i^2 + b_3 S_i^3] \right\rangle \left\langle \prod_{m=1}^2 [b_0 + b_1 S_m + b_2 S_m^2 + b_3 S_m^3] \right\rangle F_1(x+h) \Big|_{x=0}. \quad (1.4c)$$

$$\langle S_i^2 \rangle = \left\langle \prod_{i=1}^2 [a_0 + a_1 S_i + a_2 S_i^2 + a_3 S_i^3] \right\rangle \left\langle \prod_{m=1}^2 [a_0 + a_1 S_m + a_2 S_m^2 + a_3 S_m^3] \right\rangle, \quad (1.5a)$$

$$\left\langle \prod_{k=1}^1 [b_0 + b_1 S_k + b_2 S_k^2 + b_3 S_k^3] \right\rangle F_2(x+h)|_{x=0}$$

$$\langle S_m^2 \rangle = \left\langle \prod_{m=1}^2 [a_0 + a_1 S_m + a_2 S_m^2 + a_3 S_m^3] \right\rangle \left\langle \prod_{i=1}^2 [a_0 + a_1 S_i + a_2 S_i^2 + a_3 S_i^3] \right\rangle, \quad (1.5b)$$

$$\left\langle \prod_{k=1}^2 [b_0 + b_1 S_k + b_2 S_k^2 + b_3 S_k^3] \right\rangle F_2(x+h)|_{x=0}$$

$$\langle S_k^2 \rangle = \left\langle \prod_{k=1}^4 [c_0 + c_1 S_k + c_2 S_k^2 + c_3 S_k^3] \right\rangle \left\langle \prod_{i=1}^1 [b_0 + b_1 S_i + b_2 S_i^2 + b_3 S_i^3] \right\rangle, \quad (1.5c)$$

$$\left\langle \prod_{m=1}^2 [b_0 + b_1 S_m + b_2 S_m^2 + b_3 S_m^3] \right\rangle F_2(x+h)|_{x=0}$$

$$\langle S_i^3 \rangle = \left\langle \prod_{i=1}^2 [a_0 + a_1 S_i + a_2 S_i^2 + a_3 S_i^3] \right\rangle \left\langle \prod_{m=1}^2 [a_0 + a_1 S_m + a_2 S_m^2 + a_3 S_m^3] \right\rangle, \quad (1.6a)$$

$$\left\langle \prod_{k=1}^1 [b_0 + b_1 S_k + b_2 S_k^2 + b_3 S_k^3] \right\rangle F_3(x+h)|_{x=0}$$

$$\langle S_m^3 \rangle = \left\langle \prod_{m=1}^2 [a_0 + a_1 S_m + a_2 S_m^2 + a_3 S_m^3] \right\rangle \left\langle \prod_{i=1}^2 [a_0 + a_1 S_i + a_2 S_i^2 + a_3 S_i^3] \right\rangle, \quad (1.6b)$$

$$\left\langle \prod_{k=1}^2 [b_0 + b_1 S_k + b_2 S_k^2 + b_3 S_k^3] \right\rangle F_3(x+h)|_{x=0}$$

$$\langle S_k^3 \rangle = \left\langle \prod_{k=1}^4 [c_0 + c_1 S_k + c_2 S_k^2 + c_3 S_k^3] \right\rangle \left\langle \prod_{i=1}^1 [b_0 + b_1 S_i + b_2 S_i^2 + b_3 S_i^3] \right\rangle, \quad (1.6c)$$

$$\left\langle \prod_{m=1}^2 [b_0 + b_1 S_m + b_2 S_m^2 + b_3 S_m^3] \right\rangle F_3(x+h)|_{x=0}$$

(1.4) – (1.6) denklemlerini de bütün spin-spin korelasyonlarının tamamı ele alınırsa, problemin çözümü zorlaşır. Bu zorluğu yenmek için ilk çaba korelasyonlar arasındaki etkileşmeyi indirgeyen bağılaşsımsız (decoupling) yaklaşımı

$$\langle S_i S_i \dots S_i \rangle \cong \langle S_i \rangle \langle S_i \rangle \dots \langle S_i \rangle, \quad (1.7)$$

şeklinde kullanılır. Aslında bu yaklaşım, esas itibariyle hacim veya yoğunluk (bulk) probleminde Zernike yaklaşımına [120] tekabül etmektedir ve yüzey problemlerini içeren çok sayıda manyetik sisteme başarılı bir şekilde uygulanmıştır [121-125]. Bağlantısızlık (decoupling) yaklaşımı ve (1.4) – (1.6) denklemleri kullanılırsa, sistemin ortalama mıknatıslanmaları, kuadrupol ve oktipolar moment terimleri aşağıdaki gibi yazılır.

$$m_{S1} = \langle S_i \rangle = \left[a_0 + a_1 \langle S_i \rangle + a_2 \langle S_i^2 \rangle + a_3 \langle S_i^3 \rangle \right]^2 \left[a_0 + a_1 \langle S_m \rangle + a_2 \langle S_m^2 \rangle + a_3 \langle S_m^3 \rangle \right]^2 \times \left[b_0 + b_1 \langle S_k \rangle + b_2 \langle S_k^2 \rangle + b_3 \langle S_k^3 \rangle \right] F_1(x+h) \Big|_{x=0}, \quad (1.8a)$$

$$m_{S2} = \langle S_m \rangle = \left[a_0 + a_1 \langle S_m \rangle + a_2 \langle S_m^2 \rangle + a_3 \langle S_m^3 \rangle \right]^2 \left[a_0 + a_1 \langle S_i \rangle + a_2 \langle S_i^2 \rangle + a_3 \langle S_i^3 \rangle \right]^2 \times \left[b_0 + b_1 \langle S_k \rangle + b_2 \langle S_k^2 \rangle + b_3 \langle S_k^3 \rangle \right]^2 F_1(x+h) \Big|_{x=0}, \quad (1.8b)$$

$$m_C = \langle S_k \rangle = \left[c_0 + c_1 \langle S_k \rangle + c_2 \langle S_k^2 \rangle + c_3 \langle S_k^3 \rangle \right]^4 \left[b_0 + b_1 \langle S_i \rangle + b_2 \langle S_i^2 \rangle + b_3 \langle S_i^3 \rangle \right] \times \left[b_0 + b_1 \langle S_m \rangle + b_2 \langle S_m^2 \rangle + b_3 \langle S_m^3 \rangle \right]^2 F_1(x+h) \Big|_{x=0}, \quad (1.8c)$$

$$q_{S1} = \langle S_i^2 \rangle = \left[a_0 + a_1 \langle S_i \rangle + a_2 \langle S_i^2 \rangle + a_3 \langle S_i^3 \rangle \right]^2 \left[a_0 + a_1 \langle S_m \rangle + a_2 \langle S_m^2 \rangle + a_3 \langle S_m^3 \rangle \right]^2 \times \left[b_0 + b_1 \langle S_k \rangle + b_2 \langle S_k^2 \rangle + b_3 \langle S_k^3 \rangle \right] F_2(x+h) \Big|_{x=0}, \quad (1.9a)$$

$$q_{S2} = \langle S_m^2 \rangle = \left[a_0 + a_1 \langle S_m \rangle + a_2 \langle S_m^2 \rangle + a_3 \langle S_m^3 \rangle \right]^2 \left[a_0 + a_1 \langle S_i \rangle + a_2 \langle S_i^2 \rangle + a_3 \langle S_i^3 \rangle \right]^2 \times \left[b_0 + b_1 \langle S_k \rangle + b_2 \langle S_k^2 \rangle + b_3 \langle S_k^3 \rangle \right]^2 F_2(x+h) \Big|_{x=0}, \quad (1.9b)$$

$$q_C = \langle S_k^2 \rangle = \left[c_0 + c_1 \langle S_k \rangle + c_2 \langle S_k^2 \rangle + c_3 \langle S_k^3 \rangle \right]^4 \left[b_0 + b_1 \langle S_i \rangle + b_2 \langle S_i^2 \rangle + b_3 \langle S_i^3 \rangle \right] \times \left[b_0 + b_1 \langle S_m \rangle + b_2 \langle S_m^2 \rangle + b_3 \langle S_m^3 \rangle \right]^2 F_2(x+h) \Big|_{x=0}, \quad (1.9c)$$

$$r_{S_1} = \langle S_i^3 \rangle = \left[a_0 + a_1 \langle S_i \rangle + a_2 \langle S_i^2 \rangle + a_3 \langle S_i^3 \rangle \right]^2 \left[a_0 + a_1 \langle S_m \rangle + a_2 \langle S_m^2 \rangle + a_3 \langle S_m^3 \rangle \right]^2 \times \left[b_0 + b_1 \langle S_k \rangle + b_2 \langle S_k^2 \rangle + b_3 \langle S_k^3 \rangle \right] F_3(x+h) \Big|_{x=0}, \quad (1.10a)$$

$$r_{S_2} = \langle S_m^3 \rangle = \left[a_0 + a_1 \langle S_m \rangle + a_2 \langle S_m^2 \rangle + a_3 \langle S_m^3 \rangle \right]^2 \left[a_0 + a_1 \langle S_i \rangle + a_2 \langle S_i^2 \rangle + a_3 \langle S_i^3 \rangle \right]^2 \times \left[b_0 + b_1 \langle S_k \rangle + b_2 \langle S_k^2 \rangle + b_3 \langle S_k^3 \rangle \right]^2 F_3(x+h) \Big|_{x=0}, \quad (1.10b)$$

$$r_C = \langle S_k^3 \rangle = \left[c_0 + c_1 \langle S_k \rangle + c_2 \langle S_k^2 \rangle + c_3 \langle S_k^3 \rangle \right]^4 \left[b_0 + b_1 \langle S_i \rangle + b_2 \langle S_i^2 \rangle + b_3 \langle S_i^3 \rangle \right] \times \left[b_0 + b_1 \langle S_m \rangle + b_2 \langle S_m^2 \rangle + b_3 \langle S_m^3 \rangle \right]^2 F_3(x+h) \Big|_{x=0}. \quad (1.10c)$$

(1.8) - (1.10) denklemlerindeki a_i , b_i ve c_i katsayıları silindirik spin-3/2 Ising nanotüp sistemi için yazılacak Van der Waerden [126] özdeşliğinden faydalanarak aşağıdaki şekilde bulunur:

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{1}{8} \left(9 \cosh \left[\frac{1}{2} J_s \nabla \right] - \cosh \left[\frac{3}{2} J_s \nabla \right] \right), \\ a_1 &= \frac{1}{12} \left(27 \sinh \left[\frac{1}{2} J_s \nabla \right] - \sinh \left[\frac{3}{2} J_s \nabla \right] \right), \\ a_2 &= \frac{1}{2} \left(-\cosh \left[\frac{1}{2} J_s \nabla \right] + \cosh \left[\frac{3}{2} J_s \nabla \right] \right), \\ a_3 &= \frac{1}{3} \left(-3 \sinh \left[\frac{1}{2} J_s \nabla \right] + \sinh \left[\frac{3}{2} J_s \nabla \right] \right). \\ \\ b_0 &= \frac{1}{8} \left(9 \cosh \left[\frac{1}{2} J_1 \nabla \right] - \cosh \left[\frac{3}{2} J_1 \nabla \right] \right), \\ b_1 &= \frac{1}{12} \left(27 \sinh \left[\frac{1}{2} J_1 \nabla \right] - \sinh \left[\frac{3}{2} J_1 \nabla \right] \right), \\ b_2 &= \frac{1}{2} \left(-\cosh \left[\frac{1}{2} J_1 \nabla \right] + \cosh \left[\frac{3}{2} J_1 \nabla \right] \right), \\ b_3 &= \frac{1}{3} \left(-3 \sinh \left[\frac{1}{2} J_1 \nabla \right] + \sinh \left[\frac{3}{2} J_1 \nabla \right] \right). \end{aligned} \quad (1.11)$$

$$\begin{aligned}
c_0 &= \frac{1}{8} \left(9 \cosh \left[\frac{1}{2} J_c \nabla \right] - \cosh \left[\frac{3}{2} J_c \nabla \right] \right), \\
c_1 &= \frac{1}{12} \left(27 \sinh \left[\frac{1}{2} J_c \nabla \right] - \sinh \left[\frac{3}{2} J_c \nabla \right] \right), \\
c_2 &= \frac{1}{2} \left(-\cosh \left[\frac{1}{2} J_c \nabla \right] + \cosh \left[\frac{3}{2} J_c \nabla \right] \right), \\
c_3 &= \frac{1}{3} \left(-3 \sinh \left[\frac{1}{2} J_c \nabla \right] + \sinh \left[\frac{3}{2} J_c \nabla \right] \right).
\end{aligned}$$

(1.8) - (1.10) denklemlerindeki $F_1(x+h)$, $F_2(x+h)$ ve $F_3(x+h)$ fonksiyonları aşağıdaki gibi verilir.

$$F_1(x+h) = \frac{1}{2} \frac{3 \sinh \left[\frac{3\beta(x+h)}{2} \right] + \sinh \left[\frac{\beta(x+h)}{2} \right] \exp(-2\beta D)}{\cosh \left[\frac{3\beta(x+h)}{2} \right] + \cosh \left[\frac{\beta(x+h)}{2} \right] \exp(-2\beta D)}, \quad (1.12a)$$

$$F_2(x+h) = \frac{1}{2} \frac{9 \cosh \left[\frac{3\beta(x+h)}{2} \right] + \cosh \left[\frac{\beta(x+h)}{2} \right] \exp(-2\beta D)}{2 \cosh \left[\frac{3\beta(x+h)}{2} \right] + 2 \cosh \left[\frac{\beta(x+h)}{2} \right] \exp(-2\beta D)}, \quad (1.12b)$$

$$F_3(x+h) = \frac{1}{2} \frac{27 \sinh \left[\frac{3\beta(x+h)}{2} \right] + \sinh \left[\frac{\beta(x+h)}{2} \right] \exp(-2\beta D)}{4 \cosh \left[\frac{3\beta(x+h)}{2} \right] + 4 \cosh \left[\frac{\beta(x+h)}{2} \right] \exp(-2\beta D)}. \quad (1.12c)$$

Denklem (1.12)' de $\beta = 1/k_B T$, T mutlak sıcaklık ve k_B Boltzmann sabitidir ve yapılan tüm hesaplamalarda kolaylık için $k_B = 1.0$ olarak alınmıştır. (1.8)-(1.12) denklemlerinden yararlanılarak (1.8) – (1.10) denklemlerinin sağ tarafları genişletilir. Bu şekilde m , q ve r düzen parametreleri çok uzun ve karmaşık trigonometrik formdaki katsayılar cinsinden yazılmış olur. İlk olarak bu katsayıları trigonometrik formdan kurtarmamız ve Denklem (1.12)' deki fonksiyonlar cinsinden yazmamız gerekir. Bunun için diferansiyel operatör tekniği adı verilen aşağıdaki eşitlik kullanılır.

$$\exp(\alpha \nabla) f(x) = f(x + \alpha) \quad (1.13)$$

Burada $\nabla = \partial / \partial x$ diferansiyel operatördür. Bu şekilde (1.8) – (1.10) denklemlerindeki m , q ve r düzen parametreleri için katsayılar hesaplanır ve çiftlenimli eşitlikler elde edilir. Birbirlerine bağlı bu çiftlenimli denklemler numerik olarak çözülecek ve m , q ve

r düzen parametrelerinin termal davranışları sistem parametrelerinin çeşitli değerleri için belirlenir. Şunu da belirtmemiz gerekir ki Denklem (1.1)' deki Hamiltonyen ifadesi bikuadratik etkileşme parametresini (K) içermediğinden dolayı, (1.9) denklemindeki q teriminin, ve termal davranışı m nin davranışına benzediğinden dolayı da oktopolar moment teriminin termal davranışı bu tez çalışmasında verilmeyecektir. Fakat (1.9) ve (1.10) denklemleri (1.8) denklemiyle çiftlenimli olduğundan dolayı elbette hesaplamalara dâhil edilecektir. Bu sebepten sadece mıknatıslanma ifadesini kullanacağız. m_{S1} , m_{S2} ve m_C mıknatıslanmaları birbirlerine bağlı fonksiyonlar şeklinde en sade halde aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$m_{S1} = F_{m_{S1}}(b_i, m_{S1}, m_{S2}, m_C) \quad (1.14a)$$

$$m_{S2} = F_{m_{S2}}(c_i, m_{S1}, m_{S2}, m_C) \quad (1.14b)$$

$$m_C = F_C(a_i, m_{S1}, m_{S2}, m_C) \quad (1.14c)$$

Buradaki $F_{m_{S1}}$, $F_{m_{S2}}$ ve F_{m_C} fonksiyonlarının en açık halleri çok uzun olduğundan **EK-1'** de verilmiştir. Şekil 1.1' deki nanotüp sistemimiz için hem toplam m_T hem de kabuk yüzeyindeki toplam m_S mıknatıslanması, nanotüp sisteminin her bir noktası için öz ve kabuk yüzeyindeki toplam atom sayısına bağlı olarak şu şekilde yazılabilir.

$$m_T = \frac{1}{18}(6m_{S1} + 6m_{S2} + 6m_C) , \quad (1.15a)$$

$$m_S = \frac{1}{12}(6m_{S1} + 6m_{S2}) . \quad (1.15b)$$

Sistemdeki alınganlıkları hesaplamak için mıknatıslanmaların dış manyetik alana göre türevi aşağıdaki gibi alınır. Çünkü alınganlık uygulanan manyetik alana cevap olarak malzemede oluşan mıknatıslanmanın derecesini belirten birimsiz bir niceliktir.

$$\chi_\alpha = \lim_{h \rightarrow 0} \left(\frac{\partial m_\alpha}{\partial h} \right) \quad (1.16)$$

where, $\alpha = C, S_1$ ve S_2 dir. (1.8) ve (1.16) denklemleri kullanılarak χ_{S_1} , χ_{S_2} ve χ_C alınganlıkları

$$\chi_{S_1} = n_1 \chi_C + n_2 \chi_{S_1} + n_3 \chi_{S_2} + n_4 \frac{\partial F_1(x)}{\partial h}, \quad (1.17a)$$

$$\chi_{S_2} = m_1 \chi_C + m_2 \chi_{S_1} + m_3 \chi_{S_2} + m_4 \frac{\partial F_1(x)}{\partial h}, \quad (1.17b)$$

$$\chi_C = k_1 \chi_C + k_2 \chi_{S_1} + k_3 \chi_{S_2} + k_4 \frac{\partial F_1(x)}{\partial h}, \quad (1.17c)$$

şeklindedir. (1.17) denklemindeki k_i , m_i ve n_i katsayıları m_{S_1} , m_{S_2} ve m_C değişkenlerinin birer fonksiyonudur. Fakat bu fonksiyonlar çok uzun ve karmaşık olduğundan dolayı verilmeyecektir. (1.17a)–(1.17c) lineer denklemleri çözülürse χ_{S_1} , χ_{S_2} ve χ_C alınganlıkları k_i , m_i ve n_i katsayıları cinsinden aşağıdaki gibi elde edilir.

$$\begin{aligned} \chi_{S_1} = & -((-k_4 m_1 - m_4 + k_1 m_4 - k_4 m_3 n_1 + k_3 m_4 n_1 + k_4 m_1 n_3 + \\ & m_4 n_3 - k_1 m_4 n_3 - k_3 m_1 n_4 - m_3 n_4 + k_1 m_3 n_4) / (\\ & 1 - k_1 - k_2 m_1 - m_2 + k_1 m_2 - k_3 n_1 + k_3 m_2 n_1 - k_2 m_3 n_1 - \\ & k_3 m_1 n_2 - m_3 n_2 + k_1 m_3 n_2 - n_3 + k_1 n_3 + k_2 m_1 n_3 + m_2 n_3 - \\ & k_1 m_2 n_3)), \end{aligned} \quad (1.18a)$$

$$\begin{aligned} \chi_{S_2} = & -((-k_4 n_1 + k_4 m_2 n_1 - k_2 m_4 n_1 - k_4 m_1 n_2 - m_4 n_2 + k_1 m_4 n_2 - \\ & n_4 + k_1 n_4 + k_2 m_1 n_4 + m_2 n_4 - k_1 m_2 n_4) / (\\ & 1 - k_1 - k_2 m_1 - m_2 + k_1 m_2 - k_3 n_1 + k_3 m_2 n_1 - k_2 m_3 n_1 - \\ & k_3 m_1 n_2 - m_3 n_2 + k_1 m_3 n_2 - n_3 + k_1 n_3 + k_2 m_1 n_3 + m_2 n_3 - \\ & k_1 m_2 n_3)), \end{aligned} \quad (1.18b)$$

$$\begin{aligned} \chi_C = & -((k_4 - k_4 m_2 + k_2 m_4 - k_4 m_3 n_2 + k_3 m_4 n_2 - k_4 n_3 + k_4 m_2 n_3 - \\ & k_2 m_4 n_3 + k_3 n_4 - k_3 m_2 n_4 + k_2 m_3 n_4) / (-1 + k_1 + k_2 m_1 + m_2 - \\ & k_1 m_2 + k_3 n_1 - k_3 m_2 n_1 + k_2 m_3 n_1 + k_3 m_1 n_2 + m_3 n_2 - \\ & k_1 m_3 n_2 + n_3 - k_1 n_3 - k_2 m_1 n_3 - m_2 n_3 + k_1 m_2 n_3)). \end{aligned} \quad (1.18c)$$

Nanotüp sistemimiz için hem toplam χ_T hem de kabuk yüzeyindeki toplam χ_S nanotüp sisteminin her bir noktası için şu şekilde yazılır.

$$\chi_T = \frac{1}{18}(6\chi_{S1} + 6\chi_{S2} + 6\chi_C) \quad (1.19a)$$

$$\chi_S = \frac{1}{12}(6\chi_{S1} + 6\chi_{S2}) \quad (1.19b)$$

Sistemin iç enerjisi (U) Hamilton' yen ifadesinden yararlanılarak şu şekilde yazılır.

$$\frac{U}{N} = -\frac{1}{2}(\langle E_{S1} \rangle + \langle E_{S2} \rangle + \langle E_C \rangle) - D(q_{S1} + q_{S2} + q_C) - h(m_{S1} + m_{S2} + m_C), \quad (1.20)$$

Denklem (1.14)' teki $\langle E_{S1} \rangle$, $\langle E_{S2} \rangle$ ve $\langle E_C \rangle$ ifadeleri

$$\begin{aligned} \langle E_{S1} \rangle = & \frac{\partial}{\partial \nabla} \left[a_0 + a_1 \langle S_i \rangle + a_2 \langle S_i^2 \rangle + a_3 \langle S_i^3 \rangle \right]^2 \left[a_0 + a_1 \langle S_m \rangle + a_2 \langle S_m^2 \rangle + a_3 \langle S_m^3 \rangle \right]^2 \\ & \times \left[b_0 + b_1 \langle S_k \rangle + b_2 \langle S_k^2 \rangle + b_3 \langle S_k^3 \rangle \right] F_1(x+h) \Big|_{x=0}, \end{aligned} \quad (1.21a)$$

$$\begin{aligned} \langle E_{S2} \rangle = & \frac{\partial}{\partial \nabla} \left[a_0 + a_1 \langle S_m \rangle + a_2 \langle S_m^2 \rangle + a_3 \langle S_m^3 \rangle \right]^2 \left[a_0 + a_1 \langle S_i \rangle + a_2 \langle S_i^2 \rangle + a_3 \langle S_i^3 \rangle \right]^2 \\ & \times \left[b_0 + b_1 \langle S_k \rangle + b_2 \langle S_k^2 \rangle + b_3 \langle S_k^3 \rangle \right]^2 F_1(x+h) \Big|_{x=0}, \end{aligned} \quad (1.21b)$$

$$\begin{aligned} \langle E_C \rangle = & \frac{\partial}{\partial \nabla} \left[c_0 + c_1 \langle S_k \rangle + c_2 \langle S_k^2 \rangle + c_3 \langle S_k^3 \rangle \right]^4 \left[b_0 + b_1 \langle S_i \rangle + b_2 \langle S_i^2 \rangle + b_3 \langle S_i^3 \rangle \right] \\ & \times \left[b_0 + b_1 \langle S_m \rangle + b_2 \langle S_m^2 \rangle + b_3 \langle S_m^3 \rangle \right]^2 F_1(x+h) \Big|_{x=0}. \end{aligned} \quad (1.21c)$$

şeklinde verilir. Miknatislanmalar için uyguladığımız diferansiyel operatör tekniğinin aynısını denklem (1.21)' e uygulayarak katsayılar elde edilir ve $\langle E_{S1} \rangle$, $\langle E_{S2} \rangle$ ve $\langle E_C \rangle$ ifadeleri hesaplanır.

Sistemin öz ısısı (C_h) iç enerjinin sıcaklığa göre türevinden elde edildiğinden dolayı aşağıdaki gibi bir bağıntı kullanılır.

$$C_h = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_h \quad (1.22)$$

Termodinamikten bildiğimiz gibi bir sistemin Helmholtz serbest enerjisi

$$F = U - TS \quad (1.23)$$

gibi tanımlanır. Termodinamiğin üçüncü yasasından sistemin entropisi

$$S = \int_0^T \frac{C}{T'} dT' \quad (1.24)$$

formunda yazılabilir. (1.23) ve (1.24) denklemlerinden yararlanılarak sistemin serbest enerjisi

$$F = U - T \int_0^T \frac{C}{T'} dT' \quad (1.25)$$

şeklinde kolayca yazılabilir.

Diğer taraftan, sistemdeki faz diyagramlarını oluştururken ikinci-dereceden faz geçişlerini belirlemede kolaylık olsun diye şöyle bir yaklaşım kullanılmaktadır [27, 30, 60, 69]. Bu yaklaşıma göre, (1.8a) – (1.8c) denklemlerinin sağ tarafı genişletilir ve m_{S1} , m_{S2} ve m_C miktanslanmaları için dereceleri birden büyük olan tüm terimler ihmal edilir. Böylece

$$m_{S1} = a_1 m_{S1} + a_2 m_{S2} + a_3 m_C \quad (1.26a)$$

$$m_{S2} = b_1 m_{S1} + b_2 m_{S2} + b_3 m_C \quad (1.26b)$$

$$m_C = c_1 m_{S1} + c_2 m_{S2} + c_3 m_C \quad (1.26c)$$

formundan üç tane lineer denklem elde edilir. Bu üç tane lineer denklemi çözmek için A katsayılar matrisi aşağıdaki gibi yazılır.

$$Am = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \\ c_1 & c_2 & c_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_{S1} \\ m_{S2} \\ m_C \end{pmatrix} = 0, \quad (1.27)$$

A matrisinin elemanlarını oluşturan a_i , b_i ve c_i katsayıları çok karmaşık ve uzun olduğundan dolayı burada verilmeyecektir. Bu katsayılar (1.8a)–(1.8c) denklemlerinden kolayca elde edilir. A matrisinin determinantı $\text{Det}(A) = 0.0$ dan sıcaklık değişimi ile beraber $\text{Det}(A)$ hesaplanır. $\text{Det}(A)$ 'nın işaret değiştirdiği değere karşı gelen sıcaklık değeri ikinci-dereceden faz geçiş noktasıdır. Bu şekilde faz diyagramlarındaki ikinci-dereceden tüm faz geçiş noktaları belirlenir. Maalesef birinci-dereceden faz geçiş noktaları bu yolla hesaplanamıyor. Bu yüzden birinci-dereceden faz geçiş sıcaklık noktalarını hesaplamak için mecburen (1.8a) – (1.8c) denklemlerini nümerik olarak çözmek zorundayız.

Sistemde bazı durumlar için faz geçişi meydana gelmeden önce toplam mıknatıslanma (m_T) sıfır olur ki m_T 'nin sıfır olduğu bu sıcaklığa telafi (compensation) sıcaklığı (T_{telafi}) denilmektedir. Telafi sıcaklığı öz (m_C) ve kabuk (m_S) mıknatıslanmaların mutlak değerleri arasındaki geçiş noktalarına bakıldıktan sonra tespit edilebilir. Telafi sıcaklığında m_C ve m_S mıknatıslanmalarının mutlak değerleri aynı değere sahiptirler ve bu durum $T_{\text{telafi}} < T_C$ şartıyla beraber aşağıdaki eşitlikleri de sağlamalıdır.

$$|m_S(T_{\text{telafi}})| = |m_C(T_{\text{telafi}})|, \quad (1.28)$$

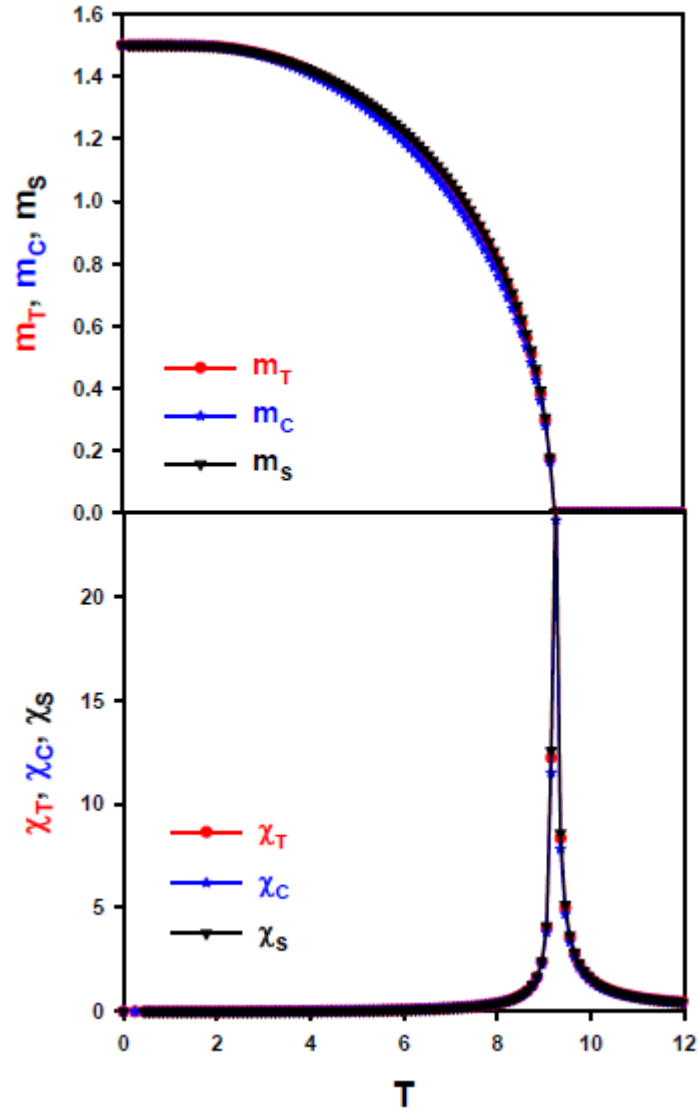
ve

$$\text{sgn}[m_S(T_{\text{telafi}})] = \text{sgn}[m_C(T_{\text{telafi}})]. \quad (1.29)$$

Bu iki eşitlik sayesinde sistemdeki telafi sıcaklık değerleri elde edilir ve telafi davranışları belirlenir.

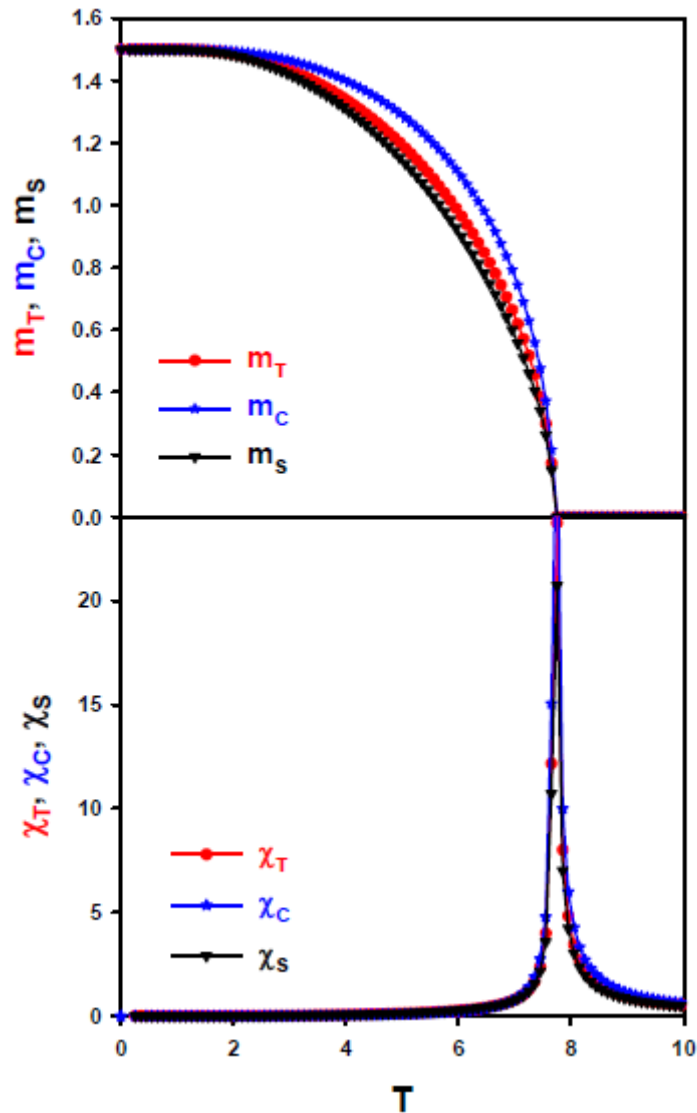
1.3 Mıknatıslanmaların ve Alınganlıkların Termal Davranışı ve Faz Geçişleri

Şekil 1.2 ferromanyetik ($r > 0$) ve antiferromanyetik ($r < 0$) durumlarında ve dış manyetik alanın yokluğunda sistem parametrelerinin çeşitli değerleri için m_T , m_C ve m_S mıknatıslanmalarının ve χ_T , χ_C ve χ_S alınganlıklarının termal davranışını göstermektedir. Şekil 1.2a $r = 1.0$, $\Delta_S = 0.5$ ve $D = 0.0$ değerleri için çizildi. Beklenildiği gibi, sıfır sıcaklık değerinde m_T , m_C ve m_S mıknatıslanmaları birbirine eşittir ve 1.5 değerini alırlar. Sıcaklık artışıyla beraber, sürekli bir şekilde azalır ve sıfıra giderler. Sistem, $T_C = 9.25$ sıcaklık değerinde ikinci-dereceden faz geçişine uğrayarak ferromanyetik (F) fazdan paramanyetik (P) faza geçer. Mıknatıslanmaların sıcaklıkla değişimleri birbirlerine çok yakındır. Alınganlıklara bakacak olursak, sıfır sıcaklığında sıfıra eşittirler. Sıcaklık artışıyla beraber alınganlıklar artmaya başlar. Faz geçiş sıcaklığının civarında çok hızlı bir şekilde artarlar ve tam faz geçiş sıcaklığı değerinde sonsuza giderler. Faz geçiş sıcaklığından sonrada alınganlıklar azalmaya başlar. Mıknatıslanmalara benzer şekilde, alınganlıkların da termal davranışı birbirlerine çok yakındır.



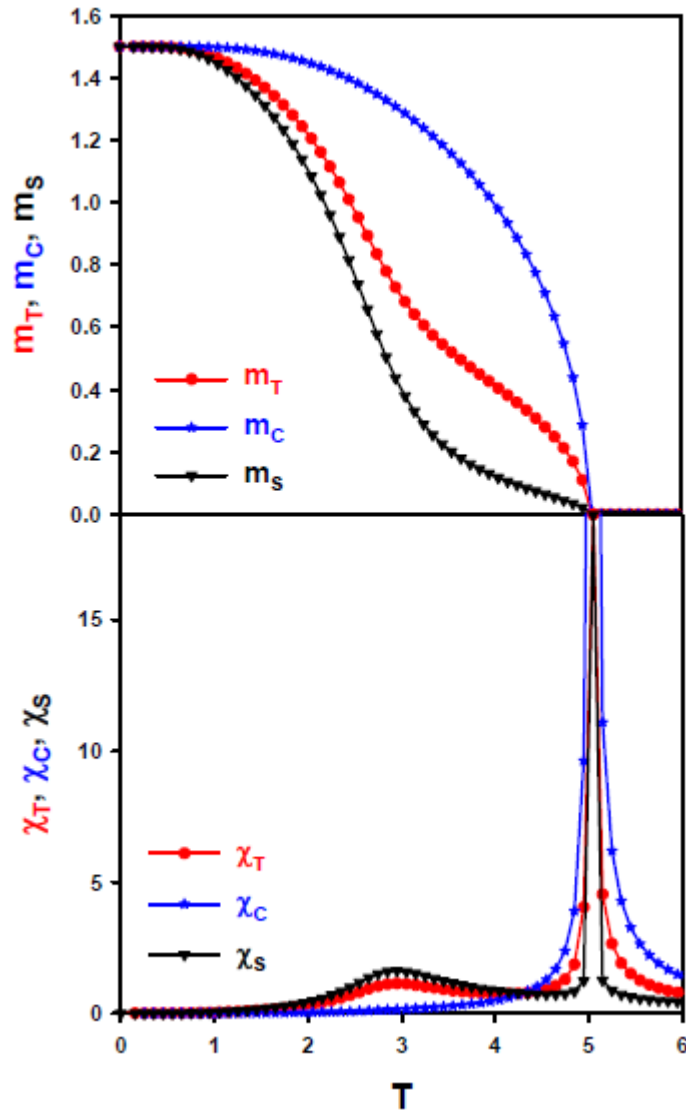
Şekil 1.2a m_T , m_C ve m_S mıknatıslanmalarının ve χ_T , χ_C ve χ_S alınganlıklarının $r = 1.0$, $\Delta_s = 0.5$ ve $D = 0.0$ değerleri için termal davranışı

$r = 1.0$, $\Delta_s = 0.0$ ve $D = 0.0$ değerleri için Şekil 1.2b elde edildi. Şekil 1.2b' de mıknatıslanmaların ve alınganlıkların termal davranışı Şekil 1.2a' ya benzemekle birlikte aralarında iki tane fark vardır. Birinci fark, Şekil 1.2a'ya göre Şekil 1.2b'de mıknatıslanmaların sıcaklıkla değişimleri birbirlerinden ayrılmaya başlıyor. İkinci fark ise kabuk yüzeyinde manyetik atomlar arasındaki bilineer etkileşme teriminin değeri azaldığından faz geçiş sıcaklığı küçülür ($T_C = 7.75$). Çok azda olsa alınganlıkların da birbirlerinden ayrılmaya başladığını görüyoruz. Şekil 1.2c ise $r = 1.0$, $\Delta_s = -0.5$ ve $D = 0.0$ değerleri için mıknatıslanmaların ve alınganlıkların termal davranışını göstermektedir.



Şekil 1.2b $r = 1.0$, $\Delta_S = 0.0$ ve $D = 0.0$ değerleri için m_T , m_C ve m_S mıknatıslanmalarının ve χ_T , χ_C ve χ_S alınganlıklarının termal davranışı.

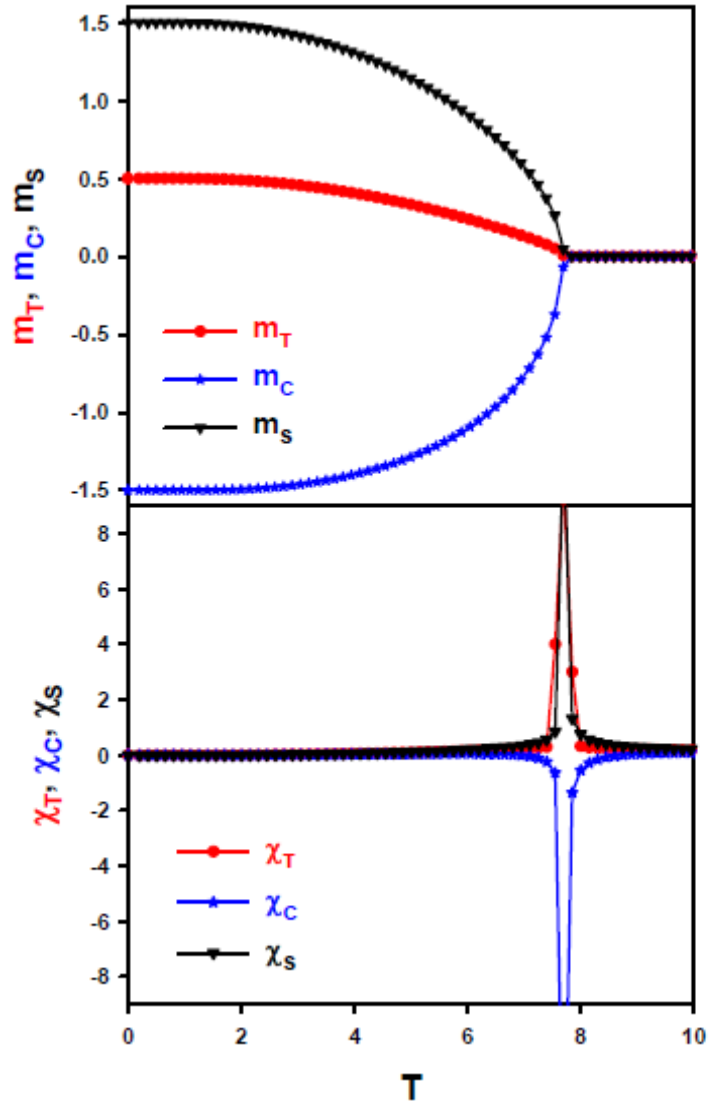
Şekil 1.2c'de m_C mıknatıslanmasının davranışı Şekil 1.2a ve Şekil 1.2b'dekine benzer olmasına rağmen m_T ve m_S mıknatıslanmalarının davranışı Şekil 1.2a ve Şekil 1.2b'dekinden farklıdır. Sıfır sıcaklık değerinde $m_T = m_C = m_S = 1.5$ değerini alırlar. Sıcaklık artışıyla beraber, m_T ve m_S hızlı bir şekilde azalır ve sıfıra giderler. Sistem, $T_C = 5.05$ sıcaklık değerinde ikinci-dereceden faz geçişine uğrayarak ferromanyetik (f) fazdan paramanyetik (p) faza geçer. χ_T , χ_C ve χ_S alınganlıkları sıfır sıcaklığında sıfıra eşittirler. Sıcaklık artışıyla beraber alınganlıklar artmaya başlar. χ_T ve χ_S faz geçiş sıcaklığından önce bir tepe yapar fakat burada faz geçişi olmaz. Faz geçiş sıcaklığının civarında çok hızlı bir şekilde artar ve tam faz geçiş sıcaklığı değerinde sonsuza gider. Faz geçiş sıcaklığından sonrada alınganlıklar azalmaya başlar.



Şekil 1.2c $r = 1.0$, $\Delta_s = -0.5$ ve $D = 0.0$ değerleri için m_T , m_C ve m_S mıknatıslanmalarının ve χ_T , χ_C ve χ_S alınganlıklarının termal davranışı

Antiferromanyetik ($r < 0$) durum için, $r = -1.0$, $\Delta_s = 0.0$ and $D = 0.0$ değerlerinde m_T , m_C ve m_S mıknatıslanmaları ve χ_T , χ_C ve χ_S alınganlıklarının termal davranışı Şekil 1.2d' de görülmektedir. Sıfır sıcaklık değerinde $m_C = -1.5$ ve $m_S = 1.5$ değerlerini alır. Bunlara bağlı olarak (1.9a) denkleminde $m_T = 0.5$ değerini alır sıfır sıcaklık değerinde. Sıcaklık artışıyla beraber, m_T ve m_S sürekli bir şekilde azalarak sıfıra giderken, m_C sürekli artarak sıfıra gider. Sistem, $T_C = 7.65$ sıcaklık değerinde ikincidereceden faz geçişine uğrayarak antiferromanyetik (af) fazdan paramanyetik (p) faza geçer. Alınganlıklar sıfır sıcaklığında eşittirler ve sıfır değerini alır. Sıcaklık artışıyla beraber χ_T ve χ_S alınganlıkları artmaya başlar. Fakat χ_C alınganlığı negatif olarak

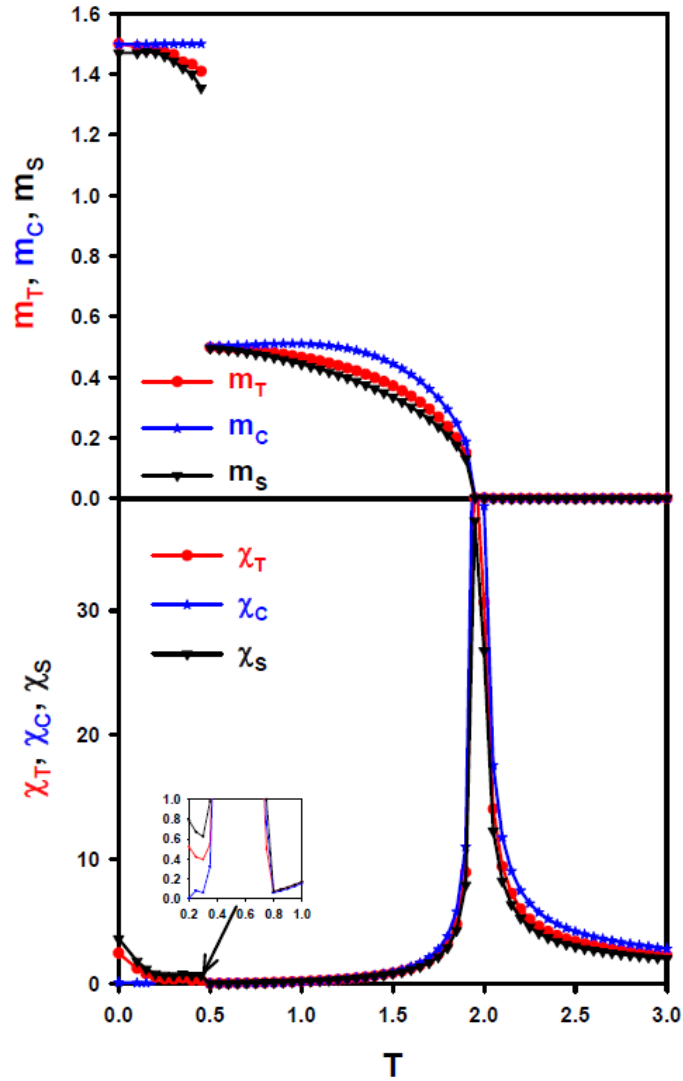
azalmaya başlar. Faz geçiş sıcaklığının civarında çok hızlı bir şekilde χ_T ve χ_S artarken χ_C de çok hızlı bir şekilde azalır. Tam faz geçiş sıcaklığı değerinde χ_T , χ_C ve χ_S sonsuza giderler ve faz geçişi meydana gelir.



Şekil 1.2d $r = -1.0$, $\Delta_s = 0.0$ ve $D = 0.0$ değerleri için m_T , m_C ve m_S mıknatıslanmalarının ve χ_T , χ_C ve χ_S alınganlıklarının termal davranışı.

Şekil 1.2e $r = 1.0$, $\Delta_s = 0.0$ ve $D = -3.25$ değerleri için mıknatıslanmaların ve alınganlıkların termal davranışını göstermektedir. Sıfır sıcaklık değerinde m_T , m_C ve m_S mıknatıslanmaları birbirine eşittir ve 1.5 değerini alırlar. Sıcaklık artışıyla beraber mıknatıslanmalar azalmaya başlar ve ilk önce $T_t = 0.5$ sıcaklık değerinde birinci-dereceden faz geçişine uğrayarak ferromanyetik-3/2 fazından ($F_{3/2}$) Ferromanyetik-1/2 ($F_{1/2}$) fazına geçer. Daha sonra sistem $T_C = 1.95$ değerinde ikinci-dereceden faz geçişine

uğrar ve $F_{1/2}$ fazından p fazına geçer. Alınganlıklar dikkatlice incelendiğinde sıfır sıcaklığında χ_C sıfır olurken χ_T ve χ_S sıfırdan farklı bir değer alırlar. Sıcaklık artışıyla beraber alınganlıklar artmaya başlar ve önce birinci-dereceden faz geçiş noktasında daha sonrada sistemin p fazına geçtiği sıcaklık değerinde sonsuza gider.

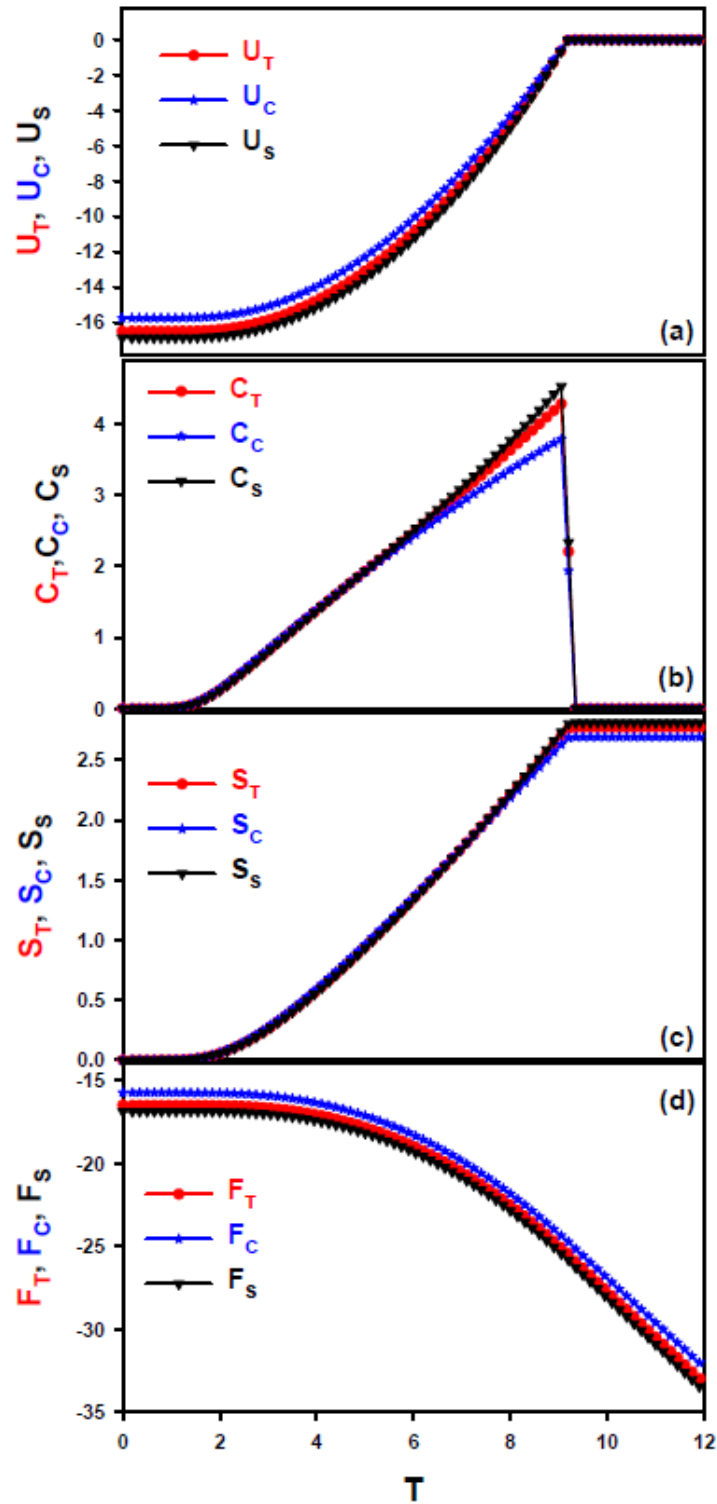


Şekil 1.2e $r = 1.0$, $\Delta_s = 0.0$ and $D = -3.25$ değerleri için m_T , m_C ve m_S mıknatıslanmaları ve χ_T , χ_C ve χ_S alınganlıklarının termal davranışı.

1.4. Termodinamik Nicelikler

Silindirik spin-3/2 Ising nanotüp sisteminin iç enerji (U), öz ısı (C), entropi (S) ve Helmholtz serbest enerjisi (F) gibi bazı termodinamik nicelikleri, sistem

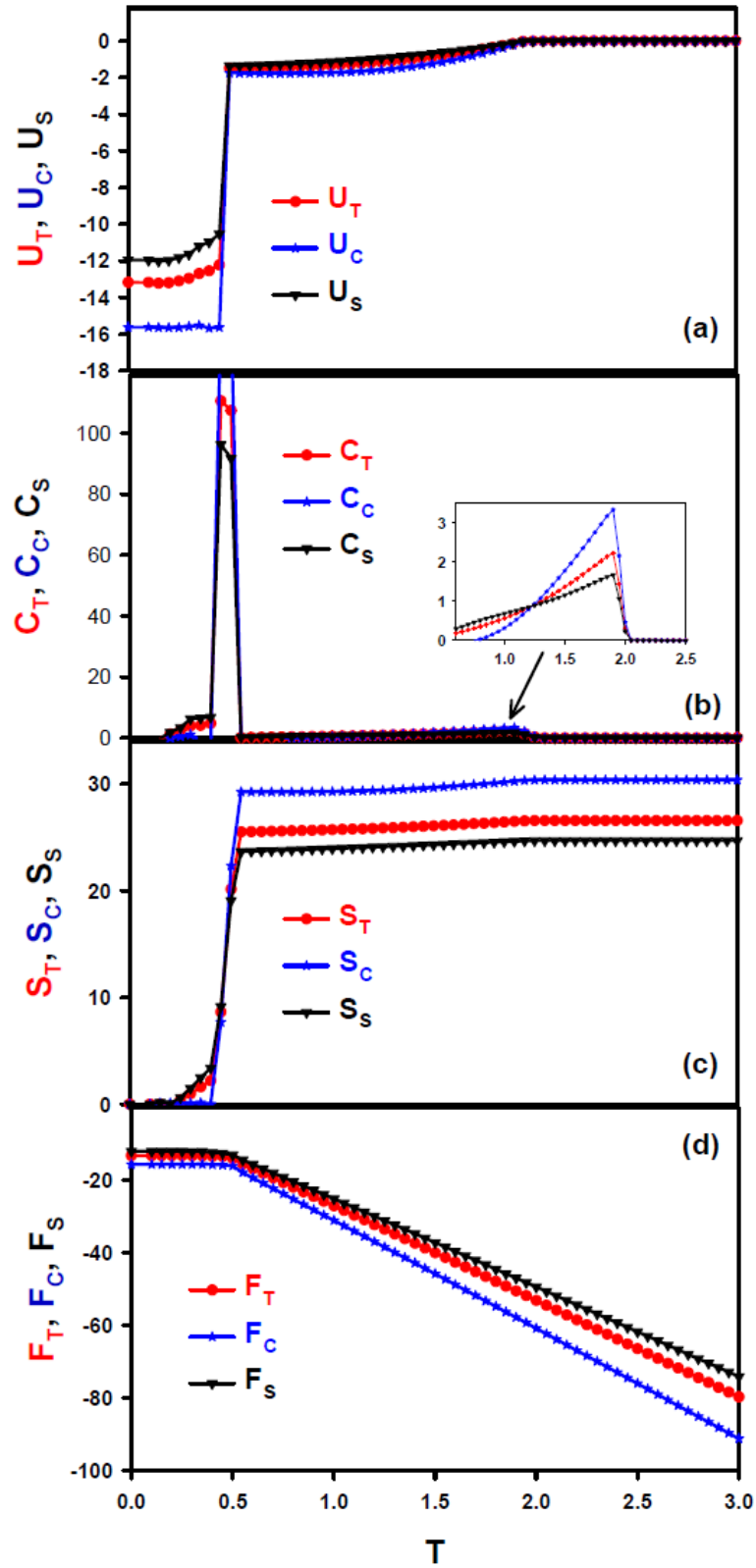
parametrelerinin farklı değerleri için Şekil 1.3 ve 1.4' te verilmiştir. Şekil 1.3 $r = 1.0$, $\Delta s = 0.5$ ve $D = 0.0$ değerleri için elde edilmiştir.



Şekil 1.3 $r = 1.0$, $\Delta s = 0.5$ and $D = 0.0$ değerleri için sistemin termodinamik niceliklerinin termal davranışı. (a) İç enerji, (b) Öz ısı, (c) Entropi ve (d) Helmholtz serbest enerjisi

Şekil 1.3a' da sistemin toplam (U_T), öz (U_C) ve kabuk (U_S) için iç enerjilerin sıcaklıkla değişimleri görülmektedir. İç enerjiler, T_C kritik sıcaklık değerinde keskin bir dönüş (cusp) yaparak sonlu bir değer almaktadır. Tam bu noktada iç enerjilerin türevi süreksiz olur ve bu noktada öz ısının değeri maksimum olur. Bu gerçek şekil 1.3b' de de gözükmemektedir. İç enerjilerin türevinin süreksiz olduğu bu nokta ikinci-dereceden faz geçiş noktasına karşılık gelir. Şekil 1.3b' de toplam (C_T), öz (C_C) ve kabuk (C_S) öz ısılarının sıcaklıkla değişimleri verilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi $T = 0.0$ sıcaklık değerinde öz ısılar sıfırdır ve sıcaklık artışıyla beraber öz ısılar artmaya başlar ve T_C ' de öz ısılar bir pik vermektedir. Şekil 1.3c' de toplam (S_T), öz (S_C) ve kabuk (S_S) için entropilerin sıcaklıkla değişimleri görülmektedir. Entropiler başlangıçta sıfıra eşittirler ve önemsizdirler. Fakat sıcaklık artışıyla beraber artmaya başlarlar ve önem kazanırlar. T_C sıcaklık değerinde keskin bir dönüş yaparak sonlu bir değer almaktadırlar. Şekil 1.3d toplam (F_T), öz (F_C) ve kabuk (F_S) için serbest enerjilerinin sıcaklıkla değişimlerini göstermektedir. Düşük sıcaklık değerlerinde entropinin önemsiz olduğunu şekil 1.3c' yi anlatırken söylemiştik. Böyle durumlarda entropi önemsiz olduğundan dolayı, sistemin serbest enerjisi taban durum enerjisine karşılık gelir. Sıcaklık artışıyla beraber, serbest enerjii minimize etmek için sistem entropiyi maksimize etmek ister. Bu gerçek sıcaklık artışıyla birlikte entropinin artmasından açıkça görülmektedir. Böylece entropi önem kazanır. Bununla birlikte, şekil 1.3d' de, T_C sıcaklık değerinde sistemin serbest enerjisinin davranışı süreklidir. Bunun anlamı, sistemde meydana gelen faz geçişinin ikinci-dereceden faz geçişi olduğudur. Şekil. 1.3' te ki iç enerji, öz ısı, entropi ve serbest enerji gibi termodinamik niceliklerin termal davranışlarına benzer sonuçlar spin-1 Ising nanotüp [53], karma spin (1/2-1) [74] ve spin-1/2 [127] hegzagonal Ising nanotel gibi çeşitli nano yapıları sistemlerde de gözlenmiştir.

Şekil 1.4 $r = 1.0$, $\Delta_S = 0.0$ ve $D = -3.25$ değerleri için çizilmiştir. Şekil 1.4a' da iç enerjilerin sıcaklıkla değişimleri verilmiştir. İç enerjilerde, sıcaklığın artmasıyla birlikte bir artış görülür ve önce $T_t = 0.5$ faz geçiş sıcaklığında süreksizlik görülür yani sistemde birinci-derece faz geçişi meydana gelmektedir. Böylece, sistem ilk önce $F_{3/2}$ fazından $F_{1/2}$ fazına geçer. Bu noktada iç enerjiler bir atlama yapar.



Şekil 1.4 $r = 1.0$, $\Delta s = 0.0$ and $D = -3.25$ değerleri için sistemin termodinamik niceliklerinin termal davranışı. (a) İç enerji, (b) Öz ısı, (c) Entropi ve (d) Helmholtz serbest enerjisi

Daha sonra sistem $T_C = 1.95$ değerinde ikinci-dereceden faz geçişine uğrar ve $F_{1/2}$ fazından P fazına geçer. Bu noktada ise iç enerjiler T_C kritik sıcaklık değerinde keskin bir dönüş (cusp) yaparak sonlu bir değer almaktadır. İç enerjilerin türevinin süreksiz olduğu bu nokta ikinci-dereceden faz geçiş noktasına karşılık gelir. Şekil 1.4b’de öz ısıların termal davranışı verilmiştir. Birinci-dereceden faz geçiş noktasında öz ısılar büyük bir sıçrama yapar ve süreksiz davranırlar. İkinci-dereceden faz geçiş noktasında ise öz ısılar keskin bir dönüş yaparak sonlu bir değer almaktadır. Bu davranışı daha açık görebilmek için, ikinci-dereceden faz geçişinin meydana geldiği bu bölge büyütülmüş ve grafiğin içinde küçük bir grafik olarak verilmiştir. Şekil 1.4c’ de toplam (S_T), öz (S_C) ve kabuk (S_s) için entropilerin sıcaklıkla değişimleri görülmektedir. Entropiler başlangıçta sifira eşittirler ve önemsizdirler. Fakat sıcaklık artışıyla beraber artmaya başlarlar ve önem kazanırlar. Birinci-dereceden faz geçiş sıcaklık değerinde keskin bir artış yaparak belli bir değere atlamaktadırlar. İkinci-dereceden faz geçiş noktasında entropilerin davranışı Şekil 1.3c’de ki gibidir. Şekil 1.4d toplam (F_T), öz (F_C) ve kabuk (F_s) için serbest enerjilerinin sıcaklıkla değişimlerini göstermektedir. Düşük sıcaklık değerlerinde entropinin önemsiz olduğunu Şekil 1.3’ü anlatırken söylemiştik. Böyle durumlarda sistemin serbest enerjisinin, taban durum enerjisine karşılık geldiğini söylemiştik. Sıcaklık artışıyla beraber, serbest enerjiyi minimize etmek için sistem entropiyi maksimize etmek ister. Bu gerçek sıcaklık artışıyla birlikte entropinin artmasından açıkça görülmektedir. Birinci-dereceden faz geçiş noktasında serbest enerjinin davranışında keskin bir eğim değişimi meydana gelir. İkinci-dereceden faz geçiş noktasında ise serbest enerjinin davranışı, Şekil 1.4d’ deki gibi süreklidir. Bunun anlamı, sistemde meydana gelen faz geçişinin ikinci-dereceden faz geçişi olduğudur. Şekil. 1.4’ teki iç enerji, öz ısı, entropi ve serbest enerji gibi termodinamik niceliklerin termal davranışlarına benzer sonuçlar spin-1 Ising nanotüp [53], karma spin (1/2-1) hegzagonal Ising nanotel [74] ve karma spin (1/2-3/2) Ising nanotüp [75] sistemlerinde de gözlenmiştir.

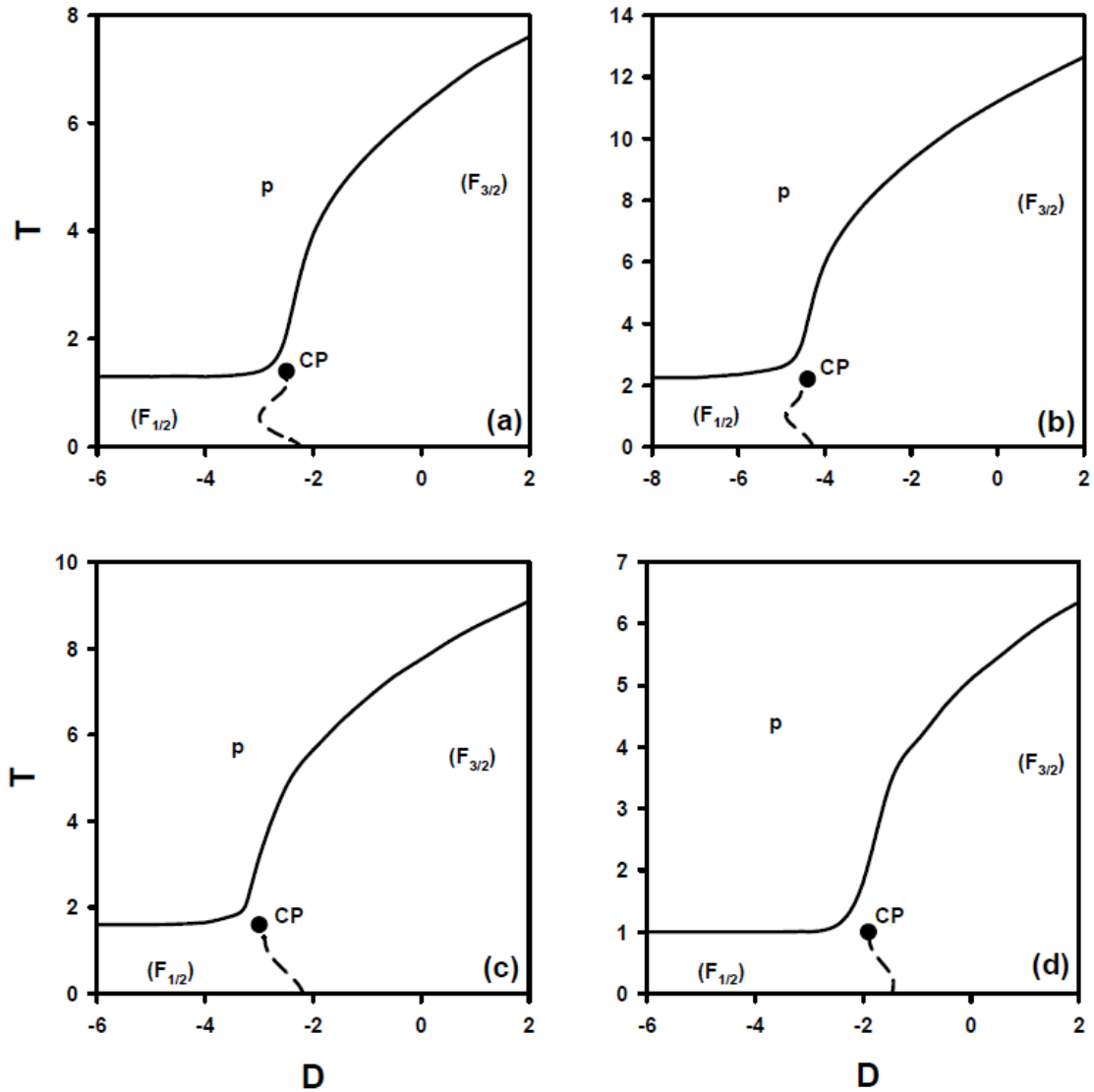
1.5 Faz Diyagramları

Silindirik spin-3/2 Ising nanotüp sisteminin denge durumundaki faz diyagramları aşağıdaki gibi üç farklı düzlemde elde edilmiştir. Bu tez çalışması boyunca $k_B = 1.0$ ve

$J_C = 1.0$ alındığından dolayı $(D/J_C, k_B T/J_C)$, $(r, k_B T/J_C)$ ve $(\Delta_S/J_C, k_B T/J_C)$ düzlemleri basitçe (D, T) , (r, T) ve $(\Delta_S, k_B T/J_C)$ indirgenmiş şeklinde alınacak.

1.5.1 (D, T) Düzleminde Faz Diyagramları

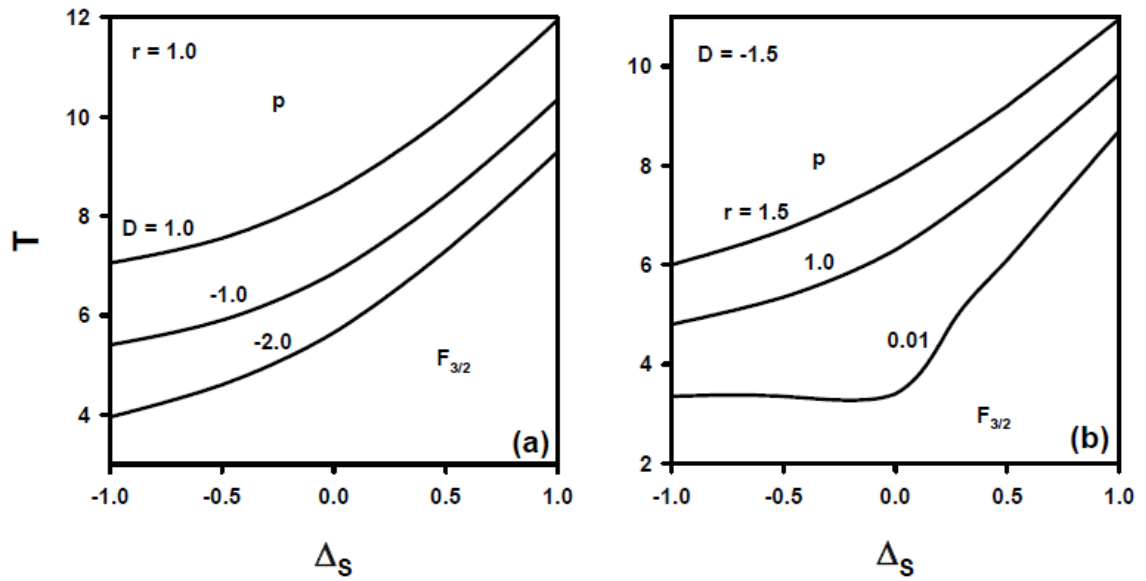
Şekil 1.5' te r ve Δ_S parametrelerinin çeşitli değerleri için (D, T) düzleminde faz diyagramları çizilmiştir. Şekilde, içi dolu daireler kritik son noktayı (CP) temsil ederken, kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçiş çizgilerini göstermektedir. Sistemde ferromanyetik-3/2 fazı ($F_{3/2}$), ferromanyetik 1/2 fazı ($F_{1/2}$) ve paramanyetik (p) fazları gözlemlendi. Kristal alanın pozitif ve büyük değerlerinde sistem $F_{3/2}$ fazından p fazına geçer ve faz geçiş sıcaklığı yüksektir. Kristal alanın negatif ve küçük değerlerinde sistem $F_{1/2}$ fazından p fazına geçer ve faz geçiş sıcaklığı küçüktür. Kristal alan pozitif değerlerden negatif değerlere doğru değişirken, düşük sıcaklıklarda kristal alanın belli bir değerinden itibaren $F_{3/2}$ ve $F_{1/2}$ fazları arasında süreksiz bir geçiş vardır ve bu da gösteriyor ki sistem $F_{3/2}$ fazından $F_{1/2}$ fazına geçerken birinci-dereceden faz geçişine uğrayarak geçiyor. Bu birinci-dereceden faz geçiş çizgileri sıfırdan itibaren sıcaklık artarken belli bir sıcaklık değerinde kritik son nokta (CP) ile son bulur. Şekil 1.5' te elde edilen (D, T) düzlemindeki faz diyagramlarına benzer sonuçlar karma spin (1/2, 3/2) Ising nanotüp sistemi [75] ve üçlü spin (ternary spins) Ising nano parçacıklarda [128] da gözlemlenmiştir.



Şekil 1.5 r ve Δ_s parametrelerinin çeşitli değerleri için (D, T) düzleminde faz diyagramları. (a) $r = 1.0$ ve $\Delta_s = -1.0$, (b) $r = 1.0$ ve $\Delta_s = 1.0$, (c) $r = 1.0$ ve $\Delta_s = 0.0$, (d) $r = 0.01$ ve $\Delta_s = 0.0$

1.5.2 (Δ_s, T) Düzleminde Faz Diyagramları

Şekil 1.6 (Δ_s, T) düzleminde faz diyagramını göstermektedir. Tüm faz geçişleri $F_{3/2}$ fazından p fazına ikinci-dereceden faz geçişi şeklindedir. Şekil 1.6 (a) $r = 1.0$ sabit değerinde $D = 1.0, -1.0$ ve -2.0 değerleri için çizilmiştir. Açıkça görüldüğü gibi Δ_s ve D değerleri büyüdükçe, faz geçiş sıcaklığı da yükselir. Şekil 1.6 (b) $D = -1.5$ sabit değerinde $r = 1.5, 1.0$ ve 0.01 değerleri için çizilmiştir. Burada da açıkça görüldüğü gibi Δ_s ve r değerleri büyüdükçe, faz geçiş sıcaklığı da yükselir.

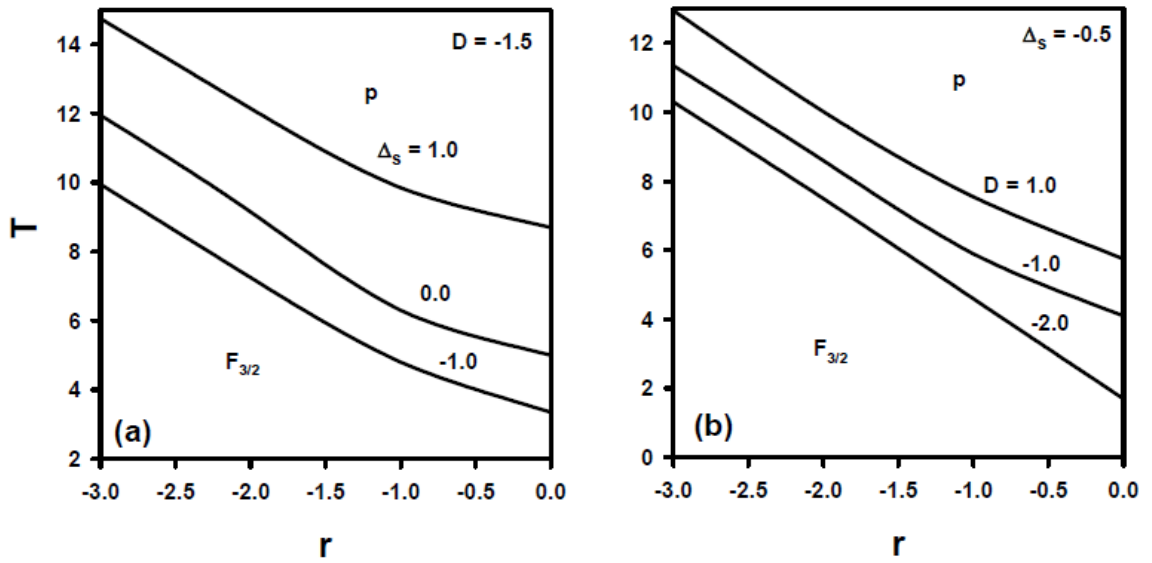


Şekil 1.6 (Δ_s, T) düzleminde faz diyagramları.

Şunu da belirtmemiz gerekir ki, r 'nin küçük değerlerinde ($r = 0.01$ gibi) faz geçiş sıcaklığı, Δ_s 'in sıfırdan küçük değerleri için faz geçiş sıcaklığı hemen hemen sabit kalıyor. Şekil 1.6'da elde edilen (Δ_s, T) düzlemindeki faz diyagramlarına benzer sonuçlar transverse Ising nano parçacıklarında [27], enine (transverse) ising nanotüp ve nanotel sistemlerinde [30] ve karma spin $(1/2, 1)$ hekzagonal Ising nanotel [69] sisteminde de elde edilmiştir.

1.5.3 (r, T) Düzleminde Faz Diyagramları

Şekil 1.7 (r, T) düzleminde faz diyagramını göstermektedir. Tüm faz geçişleri $f_{3/2}$ fazından p fazına ikinci-dereceden faz geçişi şeklindedir. Şekil 1.7 (a) $D = -1.5$ sabit değerinde $\Delta_s = 1.0, 0.0$ ve -1.0 değerleri için çizilmiştir. Açıkça görüldüğü gibi Δ_s ve r değerleri büyüdükçe, faz geçiş sıcaklığı da yükselir. Şekil 1.7 (b) $\Delta_s = -0.5$ sabit değerinde $D = 1.0, -1.0$ ve -2.0 değerleri için çizilmiştir. Burada da açıkça görüldüğü gibi D ve r değerleri büyüdükçe, faz geçiş sıcaklığı da yükselir. Şekil 1.7' de elde edilen (r, T) düzlemindeki faz diyagramlarına benzer sonuçlar karma spin $(1/2, 1)$ hekzagonal Ising nanotel [69] sisteminde, karma spin $(1/2, 1)$ Ising nanotel [73] sisteminde, enine Ising nano parçacıklarında [27] ve enine ising nanotüp ve nanotel sisteminde [30] de elde edilmiştir.



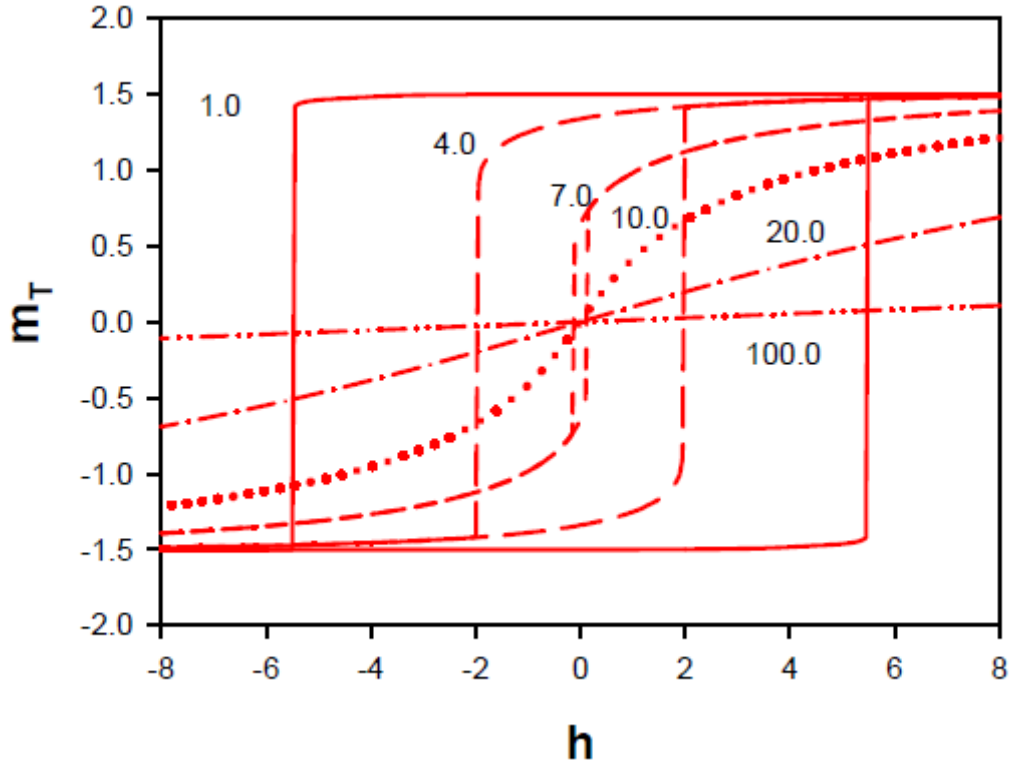
Şekil 1.7 (r, T) düzleminde faz diyagramları.

1.6. Histerezis İlmekleri

Silindirik spin-3/2 Ising nanotüp sisteminin histerezis ilmekleri (1.15a) denklemindeki toplam mıknatıslanmanın numerik olarak hesaplanmasıyla, aşağıda kapsamlı bir şekilde incelenmiştir.

1.6.1 Histerezis İlmekleri Üzerinde Sıcaklığın Etkisi

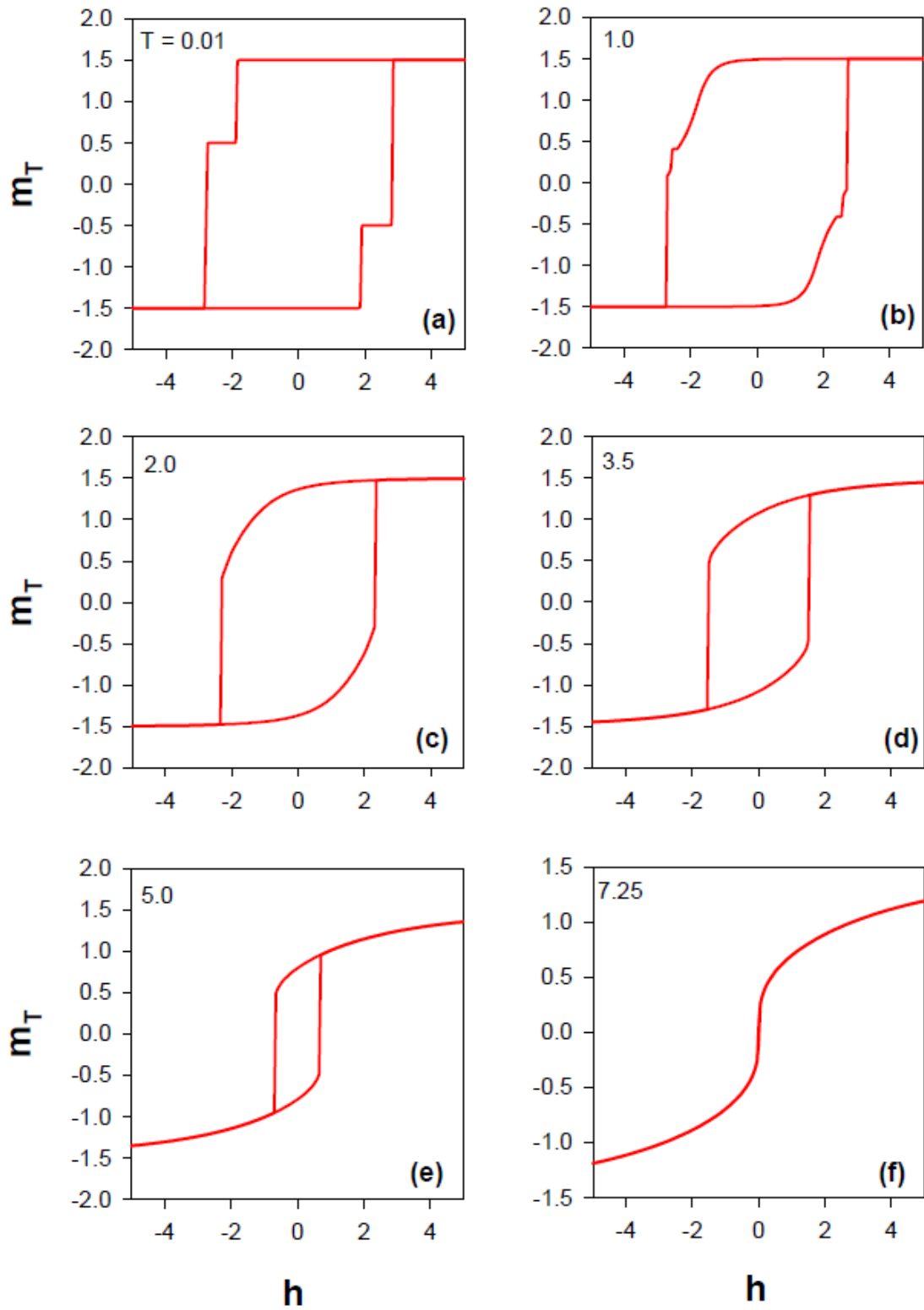
Şekil 1.8, $r = 1.0$, $\Delta_s = 0.0$ ve $D = 0.0$ sabit parametreleri ve çeşitli sıcaklık değerleri için elde edilmiştir. Şekilde çizgilerin üzerindeki rakamlar sıcaklık değerlerini göstermektedir. Açıkça görüldüğü gibi, manyetik alanın hem pozitif hem de negatif değerleri için toplam mıknatıslanma eğrileri simetriktir. Bu simetrik eğrilerden histerezis ilmekleri oluşur. Histerezis ilmeklerinin davranışları sıcaklık artışıyla değişir. Faz geçiş sıcaklığına ($T_c = 7.75$.) yaklaştıkça, bu davranışlar keskinleşir ve incilir. Faz geçiş sıcaklığı ve üzerindeki sıcaklık değerlerinde histerezis ilmeği kaybolur. Faz geçiş sıcaklığının çok üstündeki sıcaklık değerlerinde ($T = 100$) toplam mıknatıslanma sıfır olduğundan, histerezis ilmeğinin davranışı sıfıra yakın doğrusal bir davranıştır. Bu sonuçlar, şekil 1.8’ de açıkça görülmektedir.



Şekil 1.8 $r = 1.0$, $\Delta_s = 0.0$ ve $D = 0.0$ parametreleri ve farklı sıcaklık değerleri için histerezis ilmekleri

Şekil 1.8’ de elde ettiğimiz sonuçlara benzer sonuçlar deneysel olarak CoFe_2O_4 nano parçacıklarda [129], $\text{La}_{2/3}\text{Sr}_{1/3}\text{MnO}_3$ nano parçacığın monte edildiği nanotüplerde [130], Mn^{+} implante edilmiş Si nanotellerde [131] ve karbon nanotüplerde de [132, 133] gözlenmiştir. Teorik olarak ta benzer sonuçlar ferroelektrik yada ferrielektrik nanotüplerde [57], Blume–Capel model silindirik Ising nanotüpte [72], silindirik transverse spin-1 Ising nanotelde [67], karma spin Ising nanoparçacıklarda [65] ve BaTiO_3 nanotellerin ferromanyetik davranışlarında [134] gözlenmiştir.

$r = 1.0$, $\Delta_s = -0.9$ ve $D = 1.0$ durumunda sıcaklığın histerezis davranışları üzerinde etkisini incelemek için Şekil 1. 9 elde edilmiştir. $T < T_c = 7.15$ ($T=0.01, 1.0, 2.0, 3.5$ ve



Şekil 1.9 $r = 1.0$, $\Delta_s = -0.9$ ve $D = 1.0$ parametreleri ve farklı sıcaklık değerleri için histerezis ilmekleri

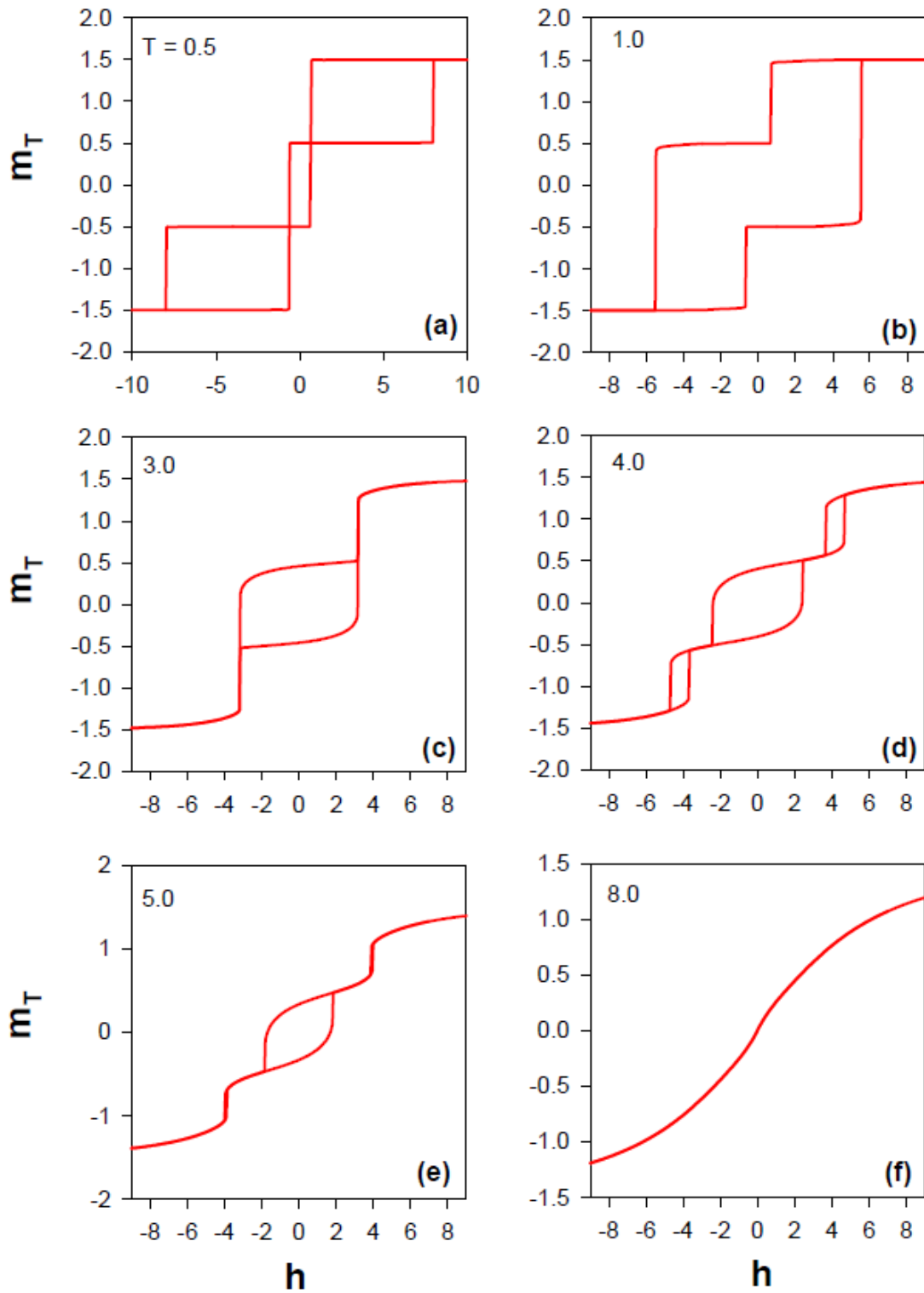
5.0) ve $T > T_c$ ($T=7.25$) sıcaklık değerleri için bir histerezis ilmekleri serisi çizilmiştir. Şekil 1.9(a) iki ilmek içeriyor. Sıcaklık artışıyla beraber, iki ilmek tek ilmeğe dönüşüyor

ve kritik sıcaklık değerine yaklaştıkça bu tek ilmek keskinleşiyor ve inceliyor. 1.9(b)-1.9(e) şekillerinde bu sonuçlar açıkça görülmektedir. Kritik sıcaklık değerinden sonraki sıcaklık değerlerinde histerezis ilmeği kaybolur. Bu sonuçlar, $\text{La}_{2/3}\text{Sr}_{1/3}\text{MnO}_3$ nano parçacığın monte edildiği nanotüpler [130], Mn^{+} implante edilmiş Si nanoteller [131], karbon nanotüpler için öz-kabuk katalizör nano parçacıklar [135] ve çok katmanlı Py/Cu, CoFeB/Cu, CoNiP/Cu, FeGa/Py, ve FeGa/CoFeB nanoteller [136] ile çok iyi bir uyum içerisindedir.

Şekil 1.10, $r = -1.0$ antiferromanyetik durumu ve $\Delta_S = 0.0$ ve $D = 0.0$ parametrelerinde, farklı sıcaklık değerleri için çizilmiştir. Şekil 1.10(a) $T = 0.5$ sıcaklık değeri için üçlü histerezis ilmeği göstermektedir. Sıcaklık artışıyla beraber üçlü histerezis ilmeği şekil 1.10(b)'de ki gibi $T = 1.0$ için ikili histerezis ilmeğine döner. Şekil 1.10(c)'de sıcaklık artmaya devam ettiğinde $T = 3.0$ için ikili histerezis ilmeği tek histerezis ilmeğine döner. $T = 4.0$ sıcaklık değerinde tekli histerezis ilmeği şekil 1.10(d)'de ki gibi üçlü histerezis ilmeğine döner. Şekil 1.10(e) $T = 5.0$ için tek histerezis ilmeği içerir. $T_c = 7.75$ kritik sıcaklık değerinden büyük sıcaklık değeri için ($T = 8.0$) şekil 1.10(f)'de görüldüğü gibi kaybolur. Üçlü histerezis ilmekleri deneysel olarak çok katmanlı Py/Cu, CoFeB/Cu, CoNiP/Cu, FeGa/Py, ve FeGa/CoFeB nanotellerde [136], tek-kristal (001) Co_2MnGe Heusler alaşım filmlerinde [137] ve $\text{DyFe}_2/\text{YFe}_2$ süper örgülerinde [138] gözlenmiştir. Teorik olarak ta moleküler-temelli manyetik malzemelerde [139] ve tek zincir mıknatıslanmalarında [140] üçlü histerezis ilmekleri gözlenmiştir. Ayrıca, öz-kabuk yapıdaki spin-1/2 silindirik Ising nanotel [50], silindirik transverse spin-1 Ising nanotel [67], karma spin Ising nanoparçacık [65] ve öz-kabuk yapıdaki rastgele alan içeren silindirik Ising nanotel sistemlerinde [62] de üçlü histerezis ilmekleri gözlenmiştir.

1.6.2 Histerezis İlmekleri Üzerinde Kristal Alanın Etkisi

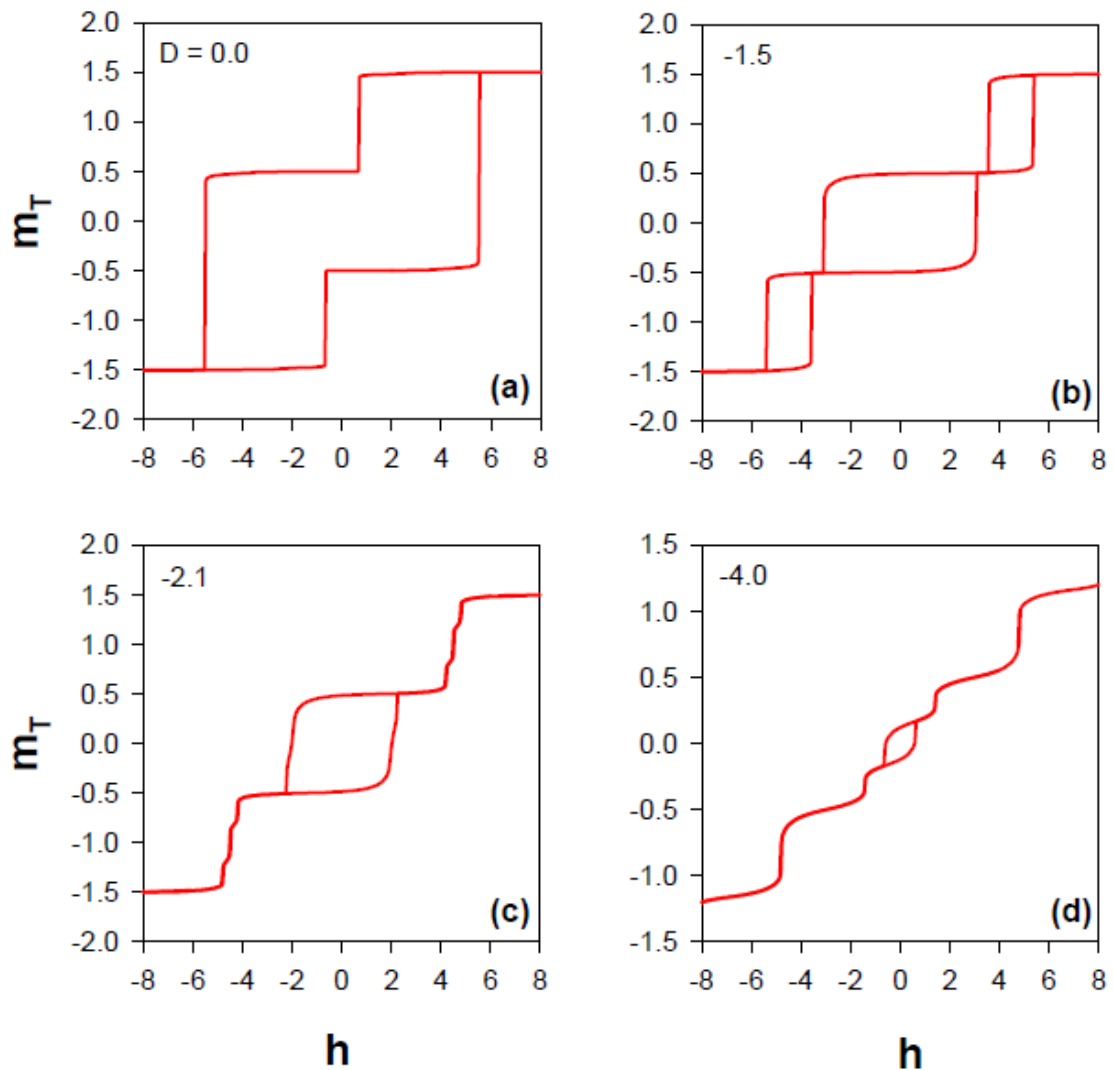
Histerezis ilmekleri üzerinde kristal alanın etkisini incelemek için $T = 1.0$, $r = -1.0$ ve



Şekil 1.10 $r = -1.0$, $\Delta_s = 0.0$ ve $D = 0.0$ parametreleri ve farklı sıcaklık değerleri için histerezis ilmekleri

$\Delta_s = 0.0$ sabit değerlerinde ve çeşitli kristal alan ($D = 0.0, -1.5, -2.1$ ve -4.0) değerleri için Şekil 1.11 elde edilmiştir. Şekil 1.11(a) $D = 0.0$ için elde edilmiştir ve ikili ilmek

mevcuttur. Kristal alan $D = -1.5$ olarak değiştirildiğinde şekil 1.11(b)' de görüldüğü gibi üçlü ilmek meydana gelir. Şekil 1.11(c) $D = -2.1$ için çizilmiştir ve tek bir histerezis ilmeği oluşmuştur. Şekil 1.11(d) $D = -4.0$ için çizilmiştir ve tek bir histerezis ilmeği içerir ama şekil 1.11(c)' den farkı histerezis ilmeğinin küçülmesidir. Bundan sonra D nin değerlerini negatif olarak ne kadar küçük seçersek seçelim tek bir histerezis ilmeği oluşacaktır ve küçük olacaktır. Benzer histerezis davranışları silindirik enine spin-1 Ising nanotel [67] ve karma spin Ising nanoparçacık [65] sistemlerinde de gözlenmiştir.



Şekil 1.11 $r = -1.0$, $\Delta_s = 0.0$ ve $T = 1.0$ parametreleri ve farklı kristal alan değerleri için histerezis ilmekleri

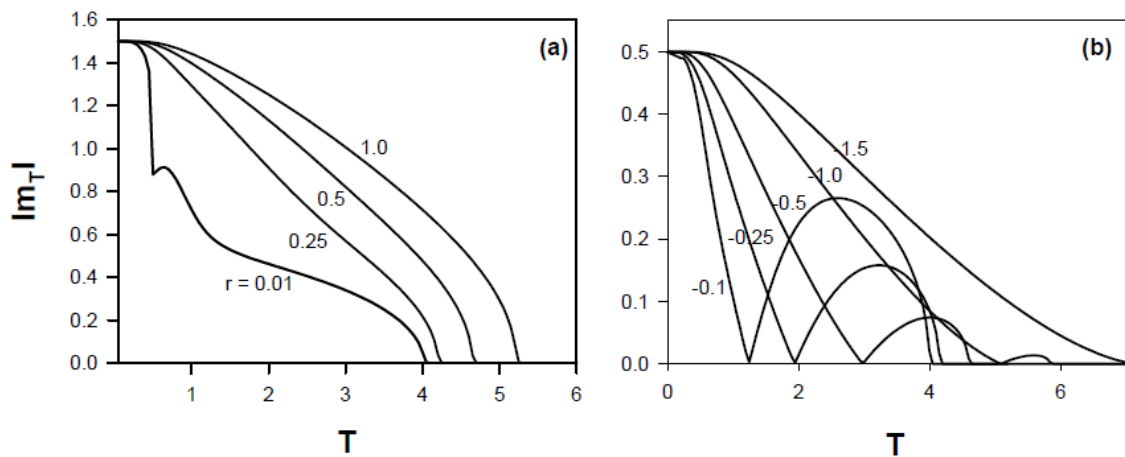
1.7. Telafi (Compensation) Davranışları

Silindirik spin-3/2 Ising nanotüp sistemi için toplam mıknatıslanmanın termal davranışı

sistem parametrelerine bağılı olarak incelenmiştir. Bilindiği gibi, telafi sıcaklığı (T_{telafi}), kritik sıcaklığın altında toplam mıknatıslanmanın sıfır olduğu sıcaklıktır [141]. Bu sıcaklık $T = T_{\text{komp}}$ 'ta alt örgülerin manyetik momentlerinin birbirlerini yok etmelerinden meydana gelmektedir. Bu durumda toplam mıknatıslanma sıfır olduğundan malzeme dış alanla etkileşmez. Oda sıcaklığı civarında manyetik nanoparçacıklar için telafi sıcaklığının varlığı termo-manyetik kayıt sistemleri açısından kritik öneme sahiptir [142-145]. Buna ilaveten, bu sıcaklıkta bazı fiziksel nicelikler ilginç davranışlar göstermektedir.

1.7.1 Öz-Kabuk Arasındaki Etkileşmenin Etkisi

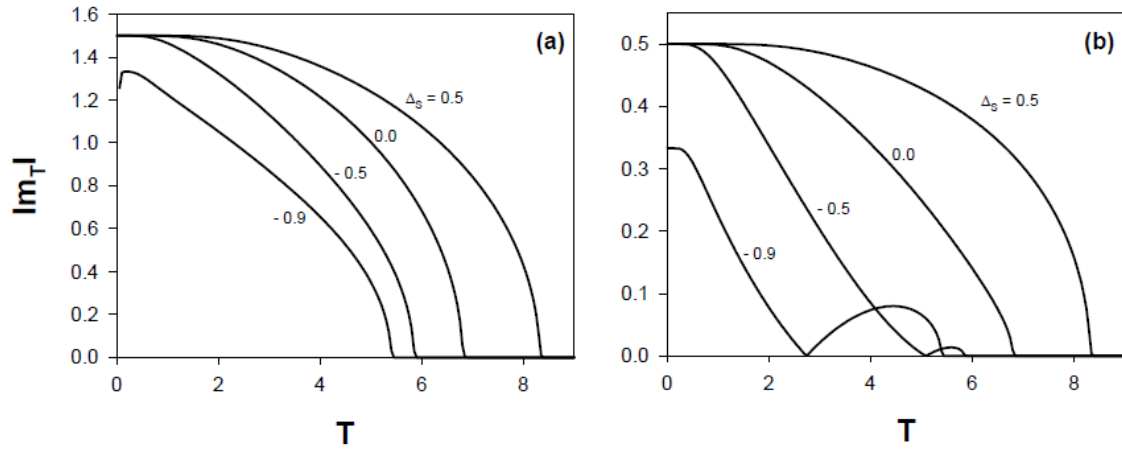
Şekil 1.12 ferromanyetik ve antiferromanyetik durumlar için öz-kabuk arasındaki etkileşme parametresinin toplam mıknatıslanmanın termal davranışları üzerindeki etkisini göstermektedir. Şekil 1.12(a) $\Delta_s = -0.5$ ve $D = -1.0$ sabit değerleri ve $r = 0.01, 0.25, 0.5$ and 1.0 ferromanyetik durumları için elde edilmiştir. Toplam mıknatıslanmanın termal davranışı $r = 0.01$ için S-tipi davranış gösterirken, $r = 0.25, 0.5$ and 1.0 için ise R-tipi davranış göstermektedir. Bu sınıflandırma Néel teorisi [141] ve Strečka [146] tarafından yapılmıştır. Şekil 1.12(b) antiferromanyetik durum için çizilmiştir. Burada da $r = -0.1, -0.25, -0.5$ and -1.0 değerlerinde toplam mıknatıslanma N-tipi davranış göstermektedir.



Şekil 1.12 $\Delta_s = -0.5$ ve $D = -1.0$ parametreleri için toplam mıknatıslanmanın termal davranışı. (a) Ferromanyetik durum, (b) Antiferromanyetik durum

1.7.2 Kabuk Yüzeysel Etkileşmesinin Etkisi

Şekil 1.13 kabuk yüzeyi değiş-tokuş etkileşme parametresinin toplam mıknatıslanmanın termal davranışı üzerindeki etkisini incelemek için elde edilmiştir. Şekil 1.13(a)' dan açıkça görüldüğü gibi tüm $\Delta_s = -0.9, -0.5, 0.0$ ve 0.5 değerleri için toplam mıknatıslanma Q-tipi davranış göstermektedir. Δ_s değerleri büyüdükçe sistemin faz geçiş sıcaklığında büyüdüğü görülmektedir. Şekil 1.13(b) ise $r = -1.0, D = -1.0$ sabit değerleri ve $\Delta_s = -0.9, -0.5, 0.0$ ve 0.5 için elde edilmiştir. Şekil 1.13(b)' de toplam mıknatıslanma $\Delta_s = -0.5$ ve -0.9 değerleri için N-tipi davranış gösterirken, $\Delta_s = 0.5$ ve 0.0 değerleri için ise Q-tipi davranış gösterir. Şekil 1.13' te açıkça görüldüğü gibi kabuk yüzeyi etkileşmesi arttıkça faz geçiş sıcaklığı da artar. Bunu sebebi, öz-kabuk yapıdaki nanoparçacıkların manyetik özelliklerinin hacimsel olan malzemelerin manyetik özelliklerinden farklı olmaları, sonlu olmaları ve dolayısıyla parçacık yüzey boyutundan çok etkilenmelerinden dolayıdır.

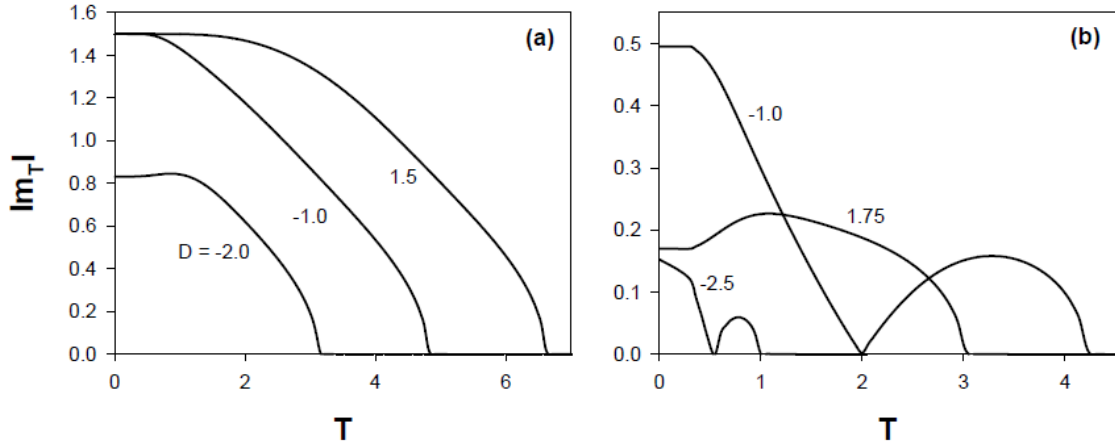


Şekil 1.13 Toplam mıknatıslanmanın termal davranışı. (a) $r = 1.0$ ferromanyetik durumu ve $D = -1.0$ ile $\Delta_s = -0.9, -0.5, 0.0$ ve 0.5 değerleri için (b) $r = -1.0$ antiferromanyetik durumu ve $D = -1.0$ ile $\Delta_s = -0.9, -0.5, 0.0$ ve 0.5 değerleri için.

1.7.3 Kristal Alanın Etkisi

Şekil 1.14 kristal alan parametresinin toplam mıknatıslanmanın termal davranışı üzerindeki etkisini göstermektedir. Kristal alan değerleri arttıkça faz geçiş sıcaklığının arttığı görülmektedir. Şekil 1.14(a)'da toplam mıknatıslanma $D = -2.0$ için P-tipi, $D = -$

1.0 için ise R-tipi davranış göstermektedir. Şekil 1.14(b)' de toplam mıknatıslanmanın davranış tipi $D = -2.5$ ve -1.0 için N-tipi iken, $D = 1.75$ için P-tipi dir.



Şekil 1.14 Toplam mıknatıslanmanın termal davranışı. (a) $r = 0.5$ ve $\Delta_s = -0.5$ sabit değerleri ile $D = -2.0$, -1.0 ve 1.5 için, (b) $r = -0.25$ ve $\Delta_s = -0.5$ sabit değerleri ile $D = -2.5$, -1.0 ve 1.75 için elde edilmiştir.

1.8. Sonuç ve Özet

Bu bölümde, silindirik spin-3/2 Ising nanotüp sisteminin denge durumundaki mıknatıslanma, iç enerji, ısı sıçması, alınganlık, entropi, serbest enerji, histeresis ilmeği, faz diyagramı ve toplam mıknatıslanmanın termal davranışları gibi termodinamik ve manyetik özellikleri korelasyonlu Etkin-Alan Teorisi (EFT) kullanılarak kapsamlıca incelendi. Sistemin faz diyagramları (D , T), (Δ_s , T) ve (r , T) düzlemlerinde sunuldu. Sistemde, Hamiltonyen parametrelerine bağlı olarak birinci-dereceden ve ikinci-dereceden faz geçişlerinin yanında kritik son nokta (CP) da gözlemlendi. Sonuçlarımız gösterdi ki sistemin termodinamik ve manyetik özellikleri öz-kabuk değiş tokuş ve kabuk yüzey değiş tokuş etkileşmesinden ve kristal alandan çok güçlü bir şekilde etkilenir. Sistemin fiziksel parametrelerine bağlı olarak tekli, ikili ve üçlü histeresis ilmekleri bulundu. Néel sınıflandırmasına göre sistemimizdeki toplam mıknatıslanma sistem parametrelerinin uygun değerleri için Q-, R-, P- ve S- tipi davranışlarını gösterdi. Elde edilen sonuçların deneysel ve teorik çalışmalarla ile çok iyi bir uyum içerisinde olduğu görüldü.

Bu bölümdeki histerezis ve telafi ile ilgili kısımlardan elde edilen sonuçlar Journal of Applied Physics dergisinde yayımlanmıştır. Daha ayrıntılı bilgi için bu çalışmaya bakabilirsiniz [147].

2. BÖLÜM

SPİN-3/2 BLUME-CAPEL MODELİNİN KARE ÖRGÜ ÜZERİNDE DİNAMİK MANYETİK ÖZELLİKLERİ

2.1. Giriş

Bu bölümde, Bölüm 3'te verilecek olan silindirik spin-3/2 Ising nanotüp sisteminin dinamik davranışlarının daha iyi anlaşılması için, spin-3/2 Blume-Capel (BC) modelinin basit kare örgü üzerindeki dinamik davranışlarının uygulaması verilecektir. Bunun için basit kare örgü seçildi. Bu nedenle, kare örgü üzerinde yani spin-3/2 BC modelinin dinamik düzen parametrelerinin termal davranışı, dinamik faz geçiş noktaları ve dinamik faz diyagramları gibi dinamik manyetik özellikleri salınımlı dış manyetik alan varlığında Glauber-tipi stokastik dinamik temelli korelasyonlu EFT (DEFT) yaklaşımı kullanılarak detaylıca incelenecektir. Kare örgü üzerinde spin-3/2 BC modeli için DEFT denklemleri Glauber geçiş oranları kullanılarak elde edilecektir. Sistemlerdeki mevcut olan fazları elde etmek için, ortalama mıknatıslanmanın zamana bağlı davranışları incelenecek. Elde edilecek olan bu diferansiyel denklemler Runge-Kutta yöntemiyle nümerik olarak çözülecek ve ortalama düzen parametrelerinin zamana göre değişimi kapsamlıca incelenerek sistemlerde oluşan fazlar tespit edilecektir. Dinamik düzen parametrelerini veren denklemler Runge-Kutta ve Romberg integrasyon yöntemleri beraber kullanılarak çözülecek ve dinamik düzen parametrelerinin indirgenmiş sıcaklığa göre değişimleri detaylıca incelenerek, sistemlerde meydana gelen dinamik faz geçişlerinin tabiatı (birinci- ve ikinci-derece) karakterize edilecek ve aynı zamanda dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıkları bulunacaktır. Sonrada, hesaplanan DFG sıcaklıkları kullanılarak sistemlerin dinamik faz diyagramları (T/zJ , h/zJ) düzleminde sunulacaktır.

2.2. Modelin Tanıtımı ve Formülasyonu

Kristal alan etkileşmeli veya tek iyon anizotropili Ising Hamiltonyenli modeller genelde Blume-Capel (BC) modelleri diye adlandırılır ve bu modeller istatistik fizik ve yoğun madde fiziğinde en fazla kullanılan modellerden biridir. Bu model ilk olarak spin-1 Ising modeli için Blume [148] ve Capel [149, 150] tarafından birbirinden bağımsız olarak geliştirilmiştir ve 50 yıldan beri çeşitli fiziksel sistemlerde meydana gelen çoklu kritik olayların incelenmesinde temel rol oynamaktadır. Giriş bölümünde de anlatıldığı gibi düşük spin değerlerine sahip Ising sistemleri üzerinde birçok çalışma yapılmasına rağmen yüksek spin değerlerine sahip Ising sistemleri üzerinde yapılan çalışmalar oldukça sınırlıdır. Bu bakımdan tezin bu bölümünde spin-3/2 BC modeli kare örgü üzerinde çalışılacaktır. Bölüm 1' de spin-3/2 Ising modelinin dört durumlu ve üç düzen parametrelili bir sistem olduğunu söylemiştik. Burada durumdan kastedilen şey her bir spin değerinin ortalama kesirsel değeridir ve bu durumlar $S_i = +3/2, +1/2, -1/2, -3/2$ değerlerini alabilir. Bu düzen parametrelerinin mıknatıslanma (m), kuadrupol moment (q) ve oktipolar moment (r) parametreleri olduğunu Bölüm 1' de (1.2) denkleminde sonra belirtmiştik. Bu düzen parametreleri şu temel fazları tanımlamaktadır:

- i) Paramanyetik faz (p): $m = 0$,
- ii) Ferromanyetik fazlar:
 - a) Ferromanyetik-1/2 fazı ($F_{1/2}$): $m = \pm 1/2$,
 - b) Ferromanyetik-3/2 fazı ($F_{3/2}$): $m = \pm 3/2$.

Bilineer (J), kristal alan (D) ve zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan etkileşme parametrelerini içeren spin-3/2 BC modelinin Hamiltonyeni

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - D \sum_i S_i^2 - h(t) \sum_i S_i, \quad (2.1)$$

şeklindedir. Burada, S_i spin değişkenini, $\langle ij \rangle$ toplamın en yakın komşu çiftler üzerinden alınacağını göstermektedir. J bilineer etkileşme parametresi, D kristal alan etkileşmesi veya tek-iyon anizotropi sabiti ve son terim $h(t)$ ise zamanla değişen salınımlı dış manyetik alandır ve

$$h(t) = h_0 \sin(\omega t), \quad (2.2)$$

şeklinde tanımlanır. Burada h_0 ve $\omega = 2\pi\nu$ sırasıyla salınımlı alanın genliği ve açısal frekansıdır. Sistem T mutlak sıcaklığında, izotermal ısı banyosu ile temas halindedir.

2.2.1 Etkin-Alan Dinamik Denklemlerinin Elde Edilmesi

Bu kesimde zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan altında spin-3/2 BC modeli için sistemin dinamik davranışını açıklayan etkin-alan dinamik denklemleri, kare örgü üzerinde elde edilecektir. Korelasyonlu etkin-alan teorisinde, spin-3/2 Ising sistemi için ortalama mıknatıslanma ifadesi,

$$\langle S_i^k \rangle = \left\langle \prod_{i=1}^z [a_0 + a_1 S_i + a_2 S_i^2 + a_3 S_i^3] \right\rangle F_k(x+h)|_{x=0}, \quad (2.3)$$

olarak verilir. Bu eşitlik Callen'ın 1963'te, spin-1/2 [119] için elde ettiği spin korelasyonunu ifade eden Callen eşitliği ifadesinin, spin-3/2 için genelleştirilmiş şeklidir. Burada $\langle \dots \rangle$ ifadesi kanonik küme ortalamasını göstermektedir. Spin-3/2 için $k = 1, 2$ ve 3 değerlerini alır. z en yakın komşu sayısıdır ve kare örgü için $z = 4$ alınır. Van der Waerden [126] özdeşliğinden faydalanarak, spin-3/2 Ising sistemi için a_i katsayıları aşağıdaki şekilde bulunur:

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{1}{8} \left(9 \cosh \left[\frac{1}{2} J \nabla \right] - \cosh \left[\frac{3}{2} J \nabla \right] \right), \\ a_1 &= \frac{1}{12} \left(27 \sinh \left[\frac{1}{2} J \nabla \right] - \sinh \left[\frac{3}{2} J \nabla \right] \right), \\ a_2 &= \frac{1}{2} \left(-\cosh \left[\frac{1}{2} J \nabla \right] + \cosh \left[\frac{3}{2} J \nabla \right] \right), \\ a_3 &= \frac{1}{3} \left(-3 \sinh \left[\frac{1}{2} J \nabla \right] + \sinh \left[\frac{3}{2} J \nabla \right] \right), \end{aligned} \quad (2.4)$$

Burada $\nabla = \partial / \partial x$ diferansiyel operatördür. Diferansiyel operatör tekniği $\exp(\alpha \nabla) f(x) = f(x + \alpha)$ şeklindeki bir matematiksel eşitlikten yararlanılarak açılımlar yapılacaktır. Spin-3/2 $F_k(x)$ ($k = 1, 2$ ve 3) fonksiyonları,

$$F_1(x+h) = \frac{1}{2} \frac{3 \sinh[3\beta(x+h)/2] + \sinh[\beta(x+h)/2] \exp(-2\beta D)}{\cosh[3\beta(x+h)/2] + \cosh[\beta(x+h)/2] \exp(-2\beta D)}, \quad (2.5a)$$

$$F_2(x+h) = \frac{1}{2} \frac{9 \cosh[3\beta(x+h)/2] + \cosh[\beta(x+h)/2] \exp(-2\beta D)}{2 \cosh[3\beta(x+h)/2] + 2 \cosh[\beta(x+h)/2] \exp(-2\beta D)}, \quad (2.5b)$$

$$F_3(x+h) = \frac{1}{2} \frac{27 \sinh[3\beta(x+h)/2] + \sinh[\beta(x+h)/2] \exp(-2\beta D)}{4 \cosh[3\beta(x+h)/2] + 4 \cosh[\beta(x+h)/2] \exp(-2\beta D)}, \quad (2.5c)$$

şeklinde tanımlanır. Burada $\beta = 1/k_B T$, T mutlak sıcaklık ve k_B Boltzmann sabitidir ve yapılan tüm hesaplamalarda kolaylık için $k_B = 1.0$ olarak alınmıştır. Denklem (2.3) kesindir ve herhangi bir örgü için geçerlidir. Spin-3/2 gibi yüksek spinli sistemler için bu denklemin bütün spin-spin korelasyonlarının tamamı ele alınırsa, problemin çözümü zorlaşır. Bu zorluğu yenmek için ilk çaba korelasyonlar arasındaki etkileşmeyi indirgeyen bağılantısız (decoupling) yaklaşımıdır:

$$\langle S_i S_{i'} \dots S_{i^n} \rangle \cong \langle S_i \rangle \langle S_{i'} \rangle \dots \langle S_{i^n} \rangle, \quad (2.6)$$

Buna göre $i \neq i' \neq \dots \neq i^n$ olmak üzere korelasyonlu EFT birçok sisteme uygulanmıştır. Aslında bu yaklaşım, esas itibariyle hacim veya yoğun (bulk) probleminde Zernike yaklaşımına [120] tekabül etmektedir ve yüzey problemlerini içeren çok sayıda manyetik sisteme başarılı bir şekilde uygulanmıştır [121-125]. Bağılantısızlık (decoupling) yaklaşımı ve denklem (2.3) kullanılarak ve kare örgü için $z = 4$ yazılarak sistemin ortalama mıknatıslanma (m), kuadrupol (q) ve octupolar (r) moment terimleri aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$m = \langle S_i \rangle = \left[a_0 + a_1 \langle S_i \rangle + a_2 \langle S_i^2 \rangle + a_3 \langle S_i^3 \rangle \right]^4 F_1(x+h)|_{x=0}, \quad (2.7a)$$

$$q = \langle S_i^2 \rangle = \left[a_0 + a_1 \langle S_i \rangle + a_2 \langle S_i^2 \rangle + a_3 \langle S_i^3 \rangle \right]^4 F_2(x+h)|_{x=0}, \quad (2.7b)$$

$$r = \langle S_i^3 \rangle = \left[a_0 + a_1 \langle S_i \rangle + a_2 \langle S_i^2 \rangle + a_3 \langle S_i^3 \rangle \right]^4 F_3(x+h)|_{x=0}. \quad (2.7c)$$

Bu üç denklem birbirlerine çiftlenimli olarak bağlıdır. Bu sebepten, bu denklemler numerik olarak birbirlerine bağlı bir şekilde çözülür. Fakat r düzen parametresinin davranışı m 'ye benzediğinden r 'nin termal davranışları bu tez çalışmasında incelenmedi. Aynı şekilde bu tez çalışmasında q 'nun da termal davranışları incelenmedi. Çünkü spin-3/2 BC modelinin Hamiltonyen ifadesi denklem (2.1)'de görüldüğü gibi bikuadratik etkileşme parametresi (K) içermiyor. Böylece bu tez çalışmasında yalnızca m düzen parametresinin termal davranışı incelendi.

Sistemin ortalama dinamik etkin-alan denklemini elde etmek için, denklem (2.7a)'daki ortalama miknatislanma eşitliğine master denklemi temelli Glauber-tipi stokastik dinamik özellikle de Glauber geçiş oranları aşağıdaki gibi uygulanır.

$$\tau \frac{dm}{dt} = -m + \left\langle \prod_{i=1}^4 \left[a_0 + a_1 S_i + a_2 S_i^2 + a_3 S_i^3 \right] \right\rangle F_1(x+h)|_{x=0}. \quad (2.8)$$

formunda elde edilir. Bu denklemin sağ tarafı açılırsa aşağıdaki formda yazılabilir.

$$\begin{aligned} \tau \frac{dm}{dt} = & -m + a_0 + a_1 m + a_2 m^2 + a_3 m^3 + a_4 m^4 + a_5 m^5 + a_6 m^6 + a_7 m^7 + a_8 m^8 \\ & + a_9 m^9 + a_{10} m^{10} + a_{11} m^{11} + a_{12} m^{12}. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Böylece sistemin ortalama dinamik etkin-alan denklemi elde edilmiş oldu. Denklem (2.9)'da ki a_i katsayıları çok uzun ve karmaşık olduğundan burada verilmeyip **EK-2'** de verilmiştir. Bir sonraki kesimde bu denklemin nümerik çözümleri yapılacak ve bu çözümler tartışılacaktır.

2.3. Dinamik Faz Geçiş Noktaları ve Dinamik Faz Diyagramları

2.3.1. Ortalama Miknatislanmanın Zamanla Değişimi

Bu kesimde, denklem (2.9) ile verilen ortalama etkin-alan dinamik denkleminin Adams-Moulton kestirme ve düzeltme yöntemi kullanılarak nümerik olarak çözülmesiyle ortalama düzen parametresinin, yani ortalama miknatislanmanın $m(\xi)$ zamana bağlı davranışı incelenecektir. Sistemde var olan fazları bulmak için denklem (2.9) ile verilen etkin-alan dinamik denkleminin kararlı çözümleri farklı D/zJ , h/zJ ve T/zJ değerleri için incelenecektir. Denklem (2.9)'un kararlı çözümleri 2π periyodu için ξ 'nin periyodik bir fonksiyonu olacaktır, yani

$$m(\xi + \pi) = -m(\xi), \quad (2.10)$$

şeklinindedir. Burada $\xi = \omega t$ dir. Eğer denklem (2.9)'un çözümü, (2.10) denklemiyle verilen özelliğe sahipse simetrik çözüm olarak adlandırılır ve bu paramanyetik (P) yada düzensiz faza karşılık gelir. Bu çözümde $m(\xi)$ sürekli sıfır civarında salınır. İkinci çözüm ise, (2.10) denklemiyle verilen özelliğe sahip değildir ve bu simetrik olmayan çözüm olarak adlandırılır ki bu çözüm ferromanyetik (F) faza karşılık gelir. Bu çözümde $m(\xi)$ sıfır olmayan değerler etrafında salınır. Eğer $m(\xi) = \pm 3/2$ değerleri etrafında salınıyorsa ferromanyetik-3/2 ($F_{3/2}$) faz ve $m(\xi) = \pm 1/2$ değeri etrafında salınıyorsa ferromanyetik-1/2 ($F_{1/2}$) faz olarak adlandırılır. Bu durumda ortalama miknatislanma dış manyetik alana uymaz. Bu çözümlerin gerçekliği açık bir şekilde (2.9) ile verilen etkin-alan dinamik denkleminin nümerik olarak çözülmesiyle görebiliriz. (2.9) numaralı denklemin, verilen parametreler ve başlangıç değerleri için Adams-Moulton kestirme ve düzeltme yöntemi kullanılarak çözülmesiyle Şekil 2.1 elde edilmiştir. Şekil 2.1(a) $d = 0.25$, $h/zJ = 1.25$, $\omega = 2.0\pi$, ve $T/zJ = 0.675$ parametreleri için elde edilmiştir. Şekilden de açıkça görüldüğü gibi bu parametre değerlerinde ve farklı başlangıç koşulları için sistem daima P fazını göstermektedir. Şekil 2.1(b) farklı başlangıç koşulları ve $d = 0.25$, $h/zJ = 0.5$, $\omega = 2.0\pi$, and $T/zJ = 0.3$ parametre değerleri için daima $F_{3/2}$ fazını göstermektedir. $d = -0.3125$, $h/zJ = 1.7$, $\omega = 2.0\pi$, and $T/zJ = 0.06$ parametre değerleri ve farklı başlangıç koşulları için $F_{1/2}$ fazını Şekil 2.1(c)' de

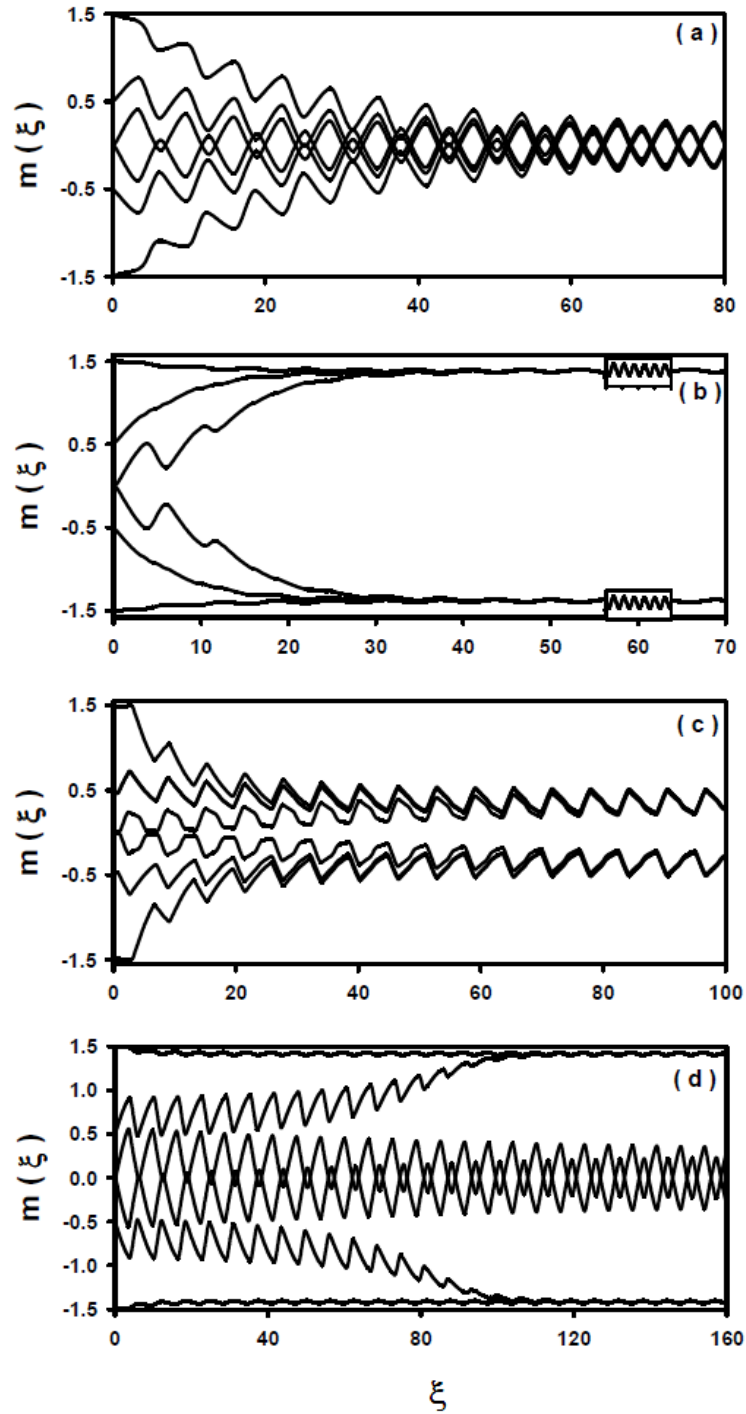
görebiliriz. Son olarak Şekil 2.1(d), $d = 0.25$, $h/zJ = 1.05$, $\omega = 2.0\pi$, and $T/zJ = 0.26$ parametre değerleri için elde edilmiştir ve $F_{3/2} + P$ karma fazını göstermektedir. Şekil 2.1'de elde edilen bu fazlar Şekil 2.3'teki faz diyagramlarında açık bir şekilde görülmektedir.

2.3.2. Dinamik Faz Geçiş Noktaları

Sistemde mevcut olan fazlar arasındaki dinamik faz sınırlarını belirleyebilmemiz için, dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıklarını hesaplamalı ve dinamik faz geçişlerinin doğasını (kesikli veya sürekli yani birinci- veya ikinci-derece faz geçişleri) karakterize etmeliyiz. Daha sonra dinamik faz diyagramlarını sunabiliriz. DFG sıcaklıkları bir periyot başına ortalama düzen parametresinin yani dinamik mıknatıslanmanın indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak incelenmesiyle elde edilecektir. Dinamik düzen parametresi veya salınımlı dış manyetik alanın bir periyodu üzerinden mıknatıslanmanın zaman ortalaması olarak dinamik mıknatıslanma,

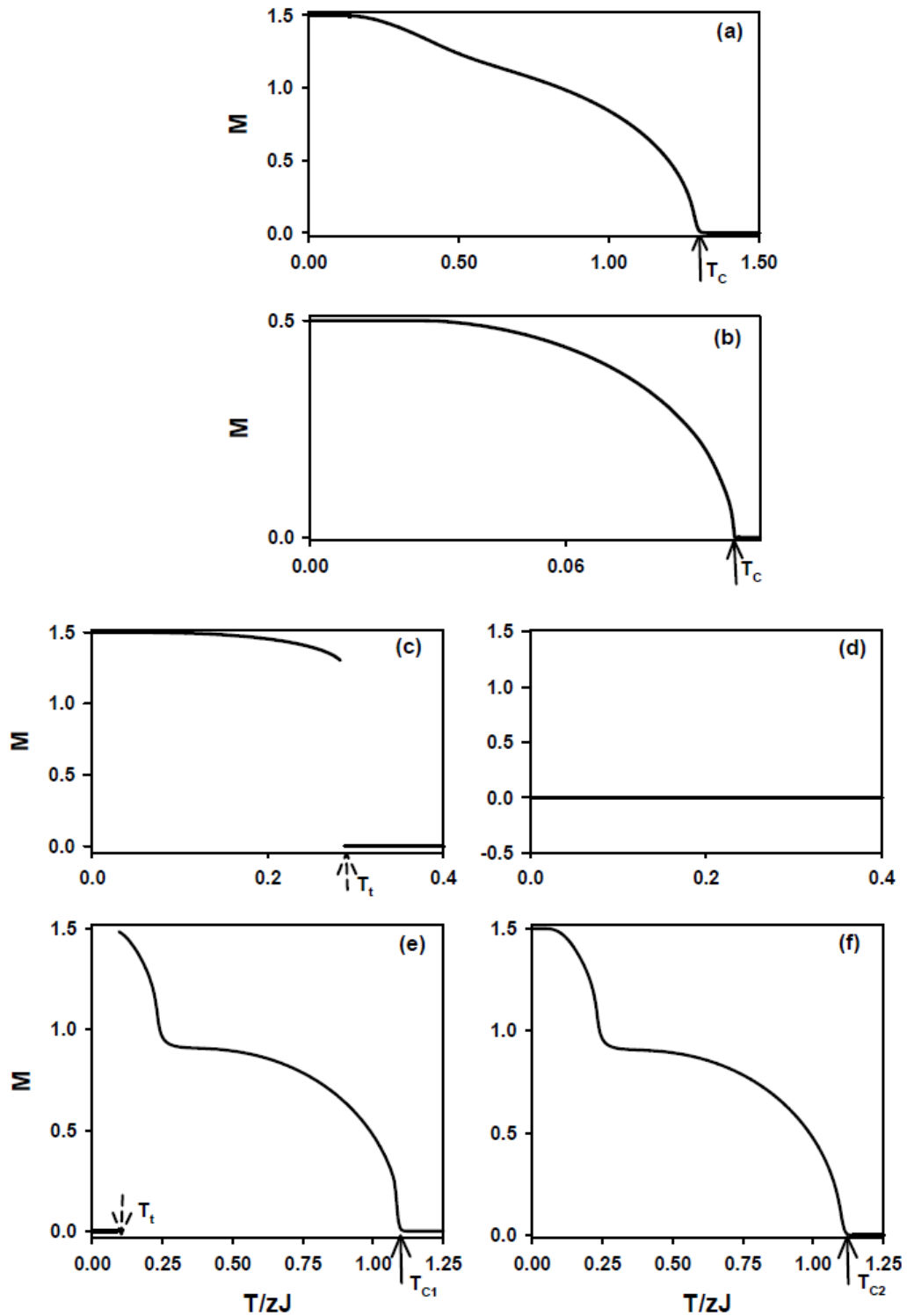
$$M = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} m(\xi) d\xi . \quad (2.11)$$

Denklem (2.11) etkileşme parametrelerinin bir kaç değeri için sıcaklığın bir fonksiyonu olarak Adams-Moulton kestirme ve düzeltme ile Romberg integrasyon yöntemi gibi nümerik metotların birleştirilmesiyle çözüldü. M ' nin elde edilen bu termal davranışı bize DPT noktalarını ve dinamik faz geçiş tipini verecektir. Fazlar arasındaki dinamik faz sınırlarının, DFG sıcaklıklarının nasıl elde edildiği Şekil 2.2'de gösterilmektedir. Bu şekillerde; T_c , $F_{3/2}$ veya $F_{1/2}$ fazından P fazına ikinci-derece faz geçiş sıcaklığını gösterirken, $T_{1/2}$ ise $F_{3/2}$ fazından P 'ye veya P 'den $F_{3/2}$ fazına birinci-derece faz geçiş sıcaklıklarını göstermektedir.



Şekil 2.1. Spin-3/2 BC modeli için ortalama mıknatıslanmanın $m(\xi)$ zamanla değişimi. **(a)** Sistemde paramanyetik (P) faz mevcuttur, $D/zJ = 0.25$, $h/zJ = 1.25$, $\omega = 2\pi$ ve $T/zJ = 0.675$. **(b)** Sistemde ferromanyetik-3/2 ($F_{3/2}$) faz mevcuttur, $D/zJ = 0.25$, $h/zJ = 0.5$, $\omega = 2\pi$ ve $T/zJ = 0.3$. Ortalama mıknatıslanmanın zamanla değişimini daha açık görebilmek için, ortalama mıknatıslanmanın davranışı zaman skalasında 58 - 62 değerleri arasında çizildi ve şekle eklendi. **(c)** Sistemde ferromanyetik-1/2 ($F_{1/2}$) faz mevcuttur, $D/zJ = -0.3125$, $h/zJ = 1.05$, $\omega = 2\pi$ ve $T/zJ = 0.06$. **(d)** Sistemde $F_{3/2} + P$ karma fazı mevcuttur, $D/zJ = -0.25$, $h/zJ = 1.05$, $\omega = 2\pi$ ve $T/zJ = 0.26$.

Şekil 2.2, M dinamik mıknatıslanmasının termal ortalamasının davranışını göstermektedir. Şekil 2.2(a) $D/zJ = 0.25$, $h/zJ = 0.1$ ve $\omega = 2\pi$ için elde edildi. Bu şekilde, sıfır sıcaklıkta $M = 1.5$ ' tir ve bu düzen parametresi indirgenmiş sıcaklık artarken sürekli olarak azalarak, $T_c/zJ = 1.305$ değerinde sıfır olmaktadır. Böylece sistemde $F_{3/2}$ fazından P faza $T_c/zJ = 1.305$ değerinde ikinci-dereceden faz geçişi meydana gelmektedir. Şekil 2.2(b)' nin davranışı şekil 2.2(a)' nın davranışına benzerdir. Farkı ise şudur: dinamik faz geçişi $F_{1/2}$ fazından P fazına ve $T_c/zJ = 0.102$ dir. Şekil 2.2(c) ve 2.2(d) $D/zJ = 0.25$, $h/zJ = 1.15$ ve $\omega = 2\pi$ parametreleri ve farklı başlangıç koşulları için elde edildi. Şayet başlangıç değeri olarak $M = 1.5$ seçilirse, sıfır sıcaklığında $M = 1.5$ olur ve sıcaklık artışıyla beraber M azalmaya başlar. $T_1/zJ = 0.27$ sıcaklık değerinde sistem birinci-dereceden faz geçişine uğrar ve $F_{3/2}$ fazından P fazına geçer. Diğer taraftan, şayet başlangıç koşulu olarak $M = 0.0$ seçilirse, tüm sıcaklık değerlerinde $M = 0.0$ olur. Bu sonuçlar şekil 2.2(c) ve 2.2(d)' de açıkça görülmektedir. Şekil 2.2(e) ve 2.2(f), $D/zJ = -0.625$, $h/zJ = 0.1$ ve $\omega = 2\pi$ parametreleri ile farklı başlangıç koşulları için elde edildi. Bu iki şekil birlikte ele alındığında birbirlerini izleyen üç faz geçişine uğradıkları anlaşılır. Birinci faz geçişi $F_{3/2} + P$ fazından $F_{3/2}$ fazına olan geçiştir. Geçiş $T_1/zJ = 0.095$ sıcaklığında birinci-dereceden faz geçişidir. İkinci faz geçişi $F_{3/2}$ fazından $F_{3/2} + P$ fazındadır. Geçiş $T_{C1}/zJ = 1.095$ sıcaklığında ikinci-dereceden faz geçişidir. Son olarak üçüncü faz $F_{3/2} + P$ fazından P fazına geçiştir. Geçiş $T_{C2}/zJ = 1.125$ sıcaklığında ikinci-dereceden faz geçişidir.



Şekil 2.2. Spin-3/2 BC modeli için dinamik mıknatıslanmanın (M) sıcaklığa göre değişimi. **(a)** $F_{3/2}$ fazından P fazına ikinci-dereceden geçiş. **(b)** $F_{1/2}$ fazından P fazına ikinci-dereceden geçiş. **(c)** $F_{1/2}$ fazından P fazına birinci-dereceden geçiş. **(d)** P fazından P fazına birinci-dereceden geçiş. **(e)** ve **(f)** Sırasıyla, $F_{3/2} + P$ fazından $F_{3/2}$ fazına birinci-dereceden geçiş, $F_{3/2}$ fazından $F_{3/2} + P$ fazına ikinci-dereceden geçiş ve son olarak $F_{3/2} + P$ fazından P fazına ikinci-dereceden geçiş.

2.4. Dinamik Faz Diyagramları

DFG sıcaklıklarını elde ettikten sonra sistemin dinamik faz diyagramlarını (T/zJ , h/zJ) düzleminde sunabiliriz. Bu kesimde, kristal alan etkileşim parametresi (D/zJ)'nin farklı değerleri için (T/zJ , h/zJ) düzleminde elde edilen dinamik faz diyagramları Şekil 2.3' te gösterilmiştir. Şekil 2.4' te frekansın $\omega = 0.1\pi$ ve $\omega = 10\pi$ değerleri için faz diyagramları üzerindeki etkisini de ayrıca inceledik. Şekillerde kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçiş çizgilerini ve içi dolu daireler dinamik üçlü kritik noktayı göstermektedir. Faz diyagramları, Z, A, M, E, TP ve QP özel noktalarını yani sırasıyla dinamik sıfır kritik sıcaklığı, multikritik, tetrakritik, kritik son, üçlü ve kuadropol noktalarını da içermektedir. Bu kritik noktalar [151, 152] referanslarında şöyle tanımlanmıştır. Z sıfır sıcaklığını gösteren kritik noktayı, A üç tane ikinci dereceden-faz geçiş çizgisinin kesiştiği noktayı, M dört tane ikinci dereceden-faz geçiş çizgisinin kesiştiği noktayı, E ikinci-dereceden bir faz geçiş çizgisinin bir birinci-dereceden faz geçiş çizgisi üzerinde son bulunduğu noktayı, TP üç tane birinci dereceden-faz geçiş çizgisinin kesiştiği noktayı ve QP dört tane birinci dereceden-faz geçiş çizgisinin kesiştiği noktayı karakterize eder.

Şekil 2.3'te kristal alanın altı farklı değeri için altı farklı tipte dinamik faz diyagramı elde edilmiştir. Faz diyagramlarında da açıkça görüldüğü gibi kristal alanın negatif değerleri pozitif değerlerinden daha zengin ve ilginç sonuçlar vermektedir. Şimdi bu dinamik faz diyagramlarını ayrıntılı inceleyelim:

i) $D/zJ = 0.25$ değeri için elde edilen faz diyagramı Şekil 2.3(a)'da gösterilmiştir. Bu faz diyagramında, $F_{3/2}$ ve P temel fazlarının yanında $F_{3/2} + P$ karma fazı da gözlenmiştir. Ayrıca faz diyagramı birinci- ve ikinci-dereceden faz geçişlerinin yanında dinamik üçlü kritik noktayı da içerir. Düşük sıcaklık ve manyetik alan genliklerinde sistemde $F_{3/2}$ fazının olduğunu görmekteyiz. Yüksek sıcaklık ve düşük manyetik alan genliklerinde sistemde P fazı görülmektedir. Yüksek manyetik alan genlik değerlerinde bu $F_{3/2}$ ve P fazları arasında $F_{3/2} + P$ karma fazının ortaya çıktığını görmekteyiz. $F_{3/2}$ fazı ile P fazı arasındaki faz geçiş çizgisi ikinci-dereceden, $F_{3/2} + P$ fazı ile P fazı arasındaki faz geçiş çizgisi ikinci-dereceden ve $F_{3/2} + P$ fazı ile $F_{3/2}$ fazı arasındaki faz geçiş çizgisi birinci-dereceden faz geçişleridir.

ii) $D/zJ = -0.475$ değeri için elde edilen faz diyagramı Şekil 2.3(b)'de gösterilmiştir. Bu faz diyagramında, Şekil 2.3(a) gibi $F_{3/2}$ ve P temel fazlarının yanı sıra sistemde $F_{3/2} + P$ karma fazı ve dinamik üçlü kritik nokta da gözlenmiştir. Fakat Şekil 2.3(a)' dan farklı olarak Şekil 2.3(b)' de dört tane birinci-dereceden faz geçiş çizgisinin kesiştiği özel bir nokta olan QP da bulunmuştur. Sıcaklığın küçük değerlerinde manyetik alan genliğinin hem düşük hem de yüksek değerlerinde $F_{3/2} + P$ fazının ortaya çıktığını görüyoruz. Bu faz diyagramında P fazını $F_{3/2} + P$ fazından ayıran faz geçiş çizgisi birinci-dereceden iken P fazını $F_{3/2}$ fazından ayıran faz geçiş çizgisi ise ikinci-dereceden faz geçişidir.

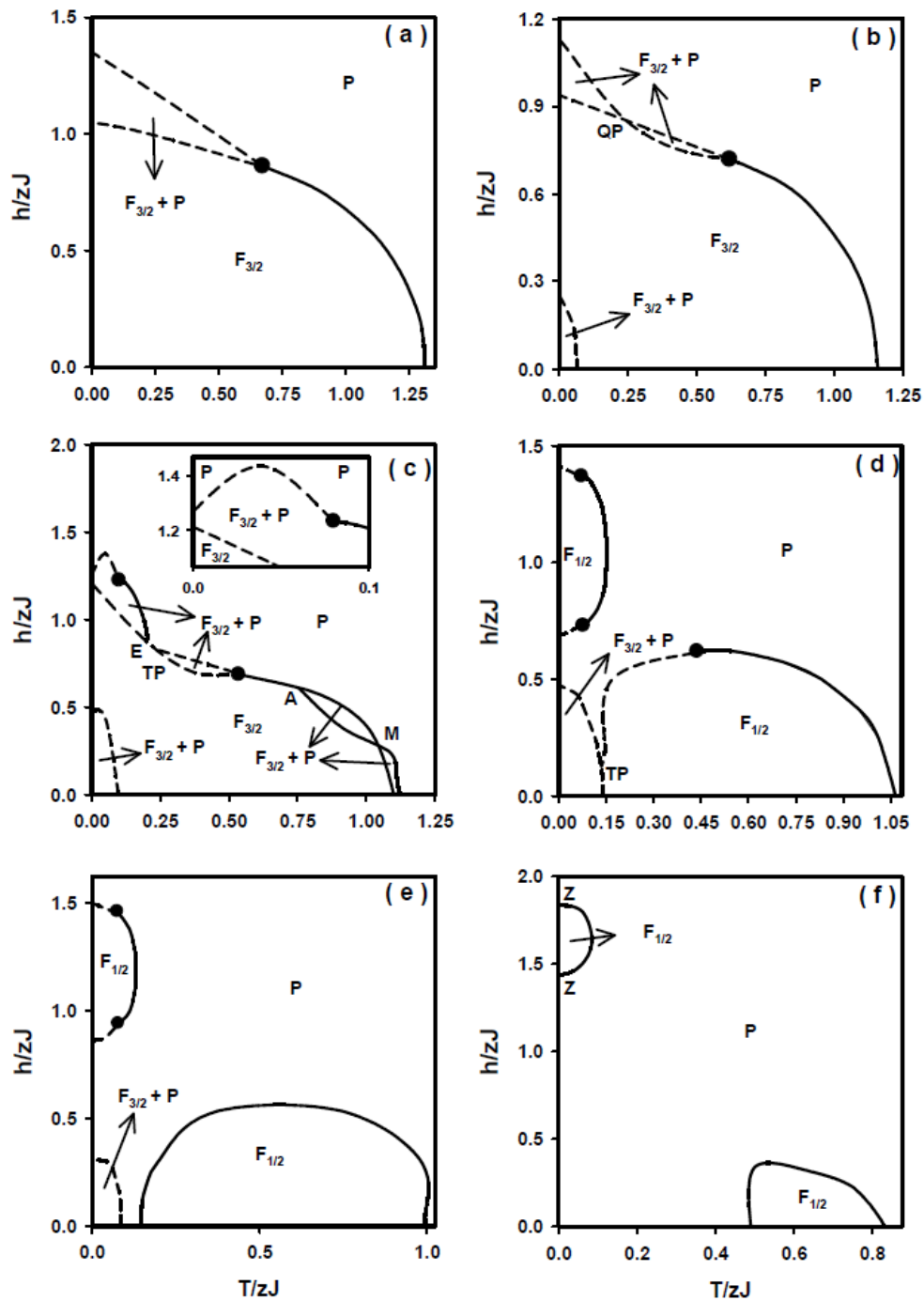
iii) $D/zJ = -0.625$ için elde edilen faz diyagramı Şekil 2.3(c)'de gösterilmiştir. Sistemde $F_{3/2}$ ve P temel fazları ile birlikte $F_{3/2} + P$ karma fazı da bulunmuştur. Sistemde iki tane dinamik üçlü kritik nokta gözlenmektedir. Ayrıca faz diyagramında M, A, TP ve E özel noktaları da gözlenmiştir. Düşük sıcaklık ve manyetik alan genlik değerlerinde değerlerinde $F_{3/2} + P$ fazının olduğunu görüyoruz. Bu faz bölgesini $F_{3/2}$ fazı ile ayıran çizginin faz geçişi birinci-dereceden faz geçişidir. BU faz diyagramında beş tane $F_{3/2} + P$ faz bölgesi mevcuttur. Son olarak faz diyagramında re-entrant olayının görüldüğünü de söylememiz gerekir. Yani, sistem sıcaklık artarken P fazından $F_{3/2} + P$ fazına ve oradan da yeniden P fazına geri döner.

iv) $D/zJ = -0.85$ için elde edilen faz diyagramı Şekil 2.3(d)'de gösterilmiştir. Sistemde $F_{1/2}$ ve P temel fazlarının yanında $F_{3/2} + P$ karma fazı da bulunmuştur. Şekil 2.3(a)-Şekil 2.3(c)' de görülen faz diyagramlarının aksine Şekil 2.3(d)' de üç tane dinamik üçlü kritik nokta gözlenmektedir. Ayrıca faz diyagramında üç tane birinci-dereceden faz geçiş çizgisinin kesiştiği nokta olan TP özel noktası da gözlenmiştir. Şekilden de açıkça görüldüğü gibi düşük sıcaklık ve manyetik alan genlik değerlerinde sistemde $F_{3/2} + P$ karma fazı vardır. Düşük manyetik alan genlik değerleri için küçük sıcaklık değerlerinde $F_{1/2}$ fazının faz geçiş çizgisi birinci-dereceden geçiş iken, yüksek sıcaklık değerlerinde bu faz geçiş çizgisi ikinci-dereceden faz geçişi olmaktadır. Son olarak sistemin re-entrant davranış gösterdiğini de söylememiz gerekir. Yani, sistem sıcaklık artarken P fazından $F_{1/2}$ fazına ve oradan da yeniden P fazına geri döner.

v) $D/zJ = -1.0$ için elde edilen faz diyagramı Şekil 2.3(e)'de gösterilmiştir. Sistemde $F_{1/2}$ ve P temel fazlarının yanında $F_{3/2} + P$ karma fazı da bulunmuştur. Şekil 2.3(e)'nin

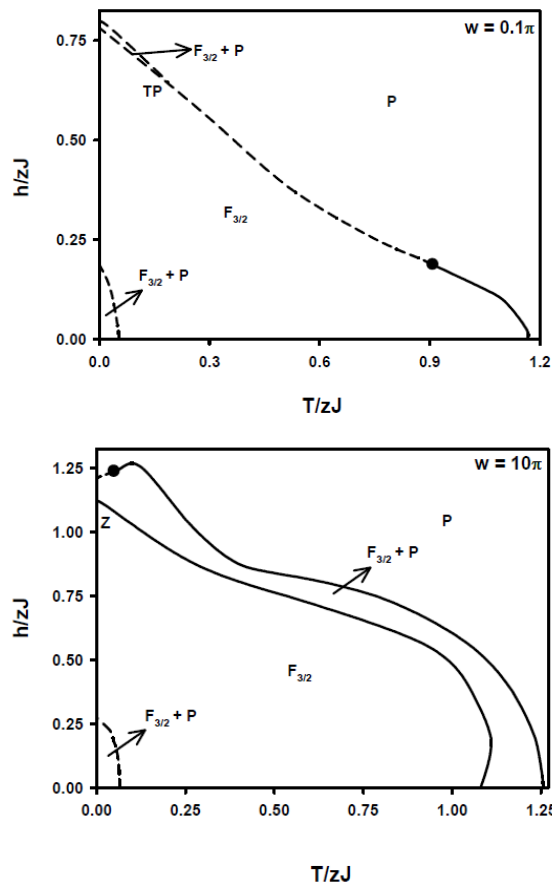
davranışı Şekil 2.3(d)' ye benzemektedir. Fakat aralarında farklılıklarda vardır. Örnek vermek gerekirse Şekil 2.3(d)'de üç tane dinamik üçlü kritik nokta gözleniyorken, Şekil 2.3(d)'de iki tane gözlenmektedir. Belirtmemiz gereken bir diğer önemli fark ise şudur: Şekil 2.3(d)'de düşük manyetik alan genlik değerlerinde $F_{1/2}$ fazının faz geçiş sınırları hem birinci- hemde ikinci dereceden faz geçiş çizgilerini gösteriyorken, Şekil 2.3(e)'de $F_{1/2}$ fazının faz geçiş sınırları tamamen ikinci-dereceden faz geçişinin göstermektedir. Ayrıca Şekil 2.3(d)'de TP özel noktası ortaya çıkarken, Şekil 2.3(e)'de herhangi bir özel nokta ortaya çıkmamıştır. Son olarak faz diyagramında re-entrant olayının görüldüğünü söylememiz gerekir. Yani, sistem sıcaklık artarken P fazından $F_{1/2}$ fazına ve oradan da yeniden P fazına geçmiştir.

vi) $D/zJ = -1.5$ için elde edilen faz diyagramı Şekil 2.3(f)'de gösterilmiştir. Sistemde sadece $F_{1/2}$ ve P temel fazları mevcuttur. Sistemdeki tüm faz geçişleri ikinci-dereceden faz geçişleridir. iki tane dinamik üçlü kritik nokta gözlenmektedir. Sistemde özel nokta olarak Z noktası gözlenmiştir. Ayrıca re-entrant olay da bulunmuştur. Yani, sistem sıcaklık artarken P fazından $F_{1/2}$ fazına ve oradan da yeniden P fazına geçmiştir.



Şekil 2.3. Spin-3/2 BC modeli için $(T/zJ, h/zJ)$ düzleminde dinamik faz diyagramları. Dinamik faz diyagramları paramanyetik (P), ferromanyetik-3/2 ($F_{3/2}$), ferromanyetik-1/2 ($F_{1/2}$) temel fazlarını ve $F_{3/2}+P$ karma fazını içerir. Kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçiş çizgilerini ve içi dolu daireler dinamik üçlü kritik noktayı göstermektedir. Z, A, M, E, TP ve QP özel noktaları sırasıyla dinamik sıfır sıcaklığı, multikritik, tetrakritik, kritik son, üçlü ve kuadropol noktalarını göstermektedir. $\omega = 2.0\pi$ ve (a) $D/zJ = 0.25$, (b) $D/zJ = -0.475$, (c) $D/zJ = -0.625$, (d) $D/zJ = -0.85$, (e) $D/zJ = -1.0$, ve (f) $D/zJ = -1.5$.

Dinamik faz diyagramları üzerinde frekansın etkisini incelemek için Şekil 2.4'ün elde edildiğini söylemiştik. Şekil 2.4' te frekansın $\omega = 0.1\pi$ ve $\omega = 10\pi$ değerleri için faz diyagramları üzerindeki etkisini de ayrıca inceledik. Şekil 2.4(a) $D/zJ = -0.475$ ve $\omega = 0.1\pi$ için, Şekil 2.4(b)' de $D/zJ = -0.475$ ve $\omega = 10\pi$ değerleri için elde edildi. Şekil 2.4, Şekil 2.3(b)'ye karşılık gelir. Çünkü Şekil 2.3(b) $D/zJ = -0.475$ ve $\omega = 2\pi$ değerleri için elde edilmişti. Şayet Şekil 2.4'ü Şekil 2.3(b) ile karşılaştıracak olursak açıkça göreceğiz ki h/zJ ' nin yüksek değerleri için $F_{3/2} + P$ karma faz bölgesi küçülür. Dinamik üçlü kritik nokta h/zJ ' nin düşük ve T/zJ 'nin yüksek değerlerinde oluşur. Ayrıca QP özel noktası yok olurken, TP özel noktası ortaya çıkar. Büyük ω değerleri için TP özel noktası ortadan kalkar ama $F_{3/2} + P$ karma faz bölgesi tekrardan yüksek T/zJ değerleri için oluşur. Z özel noktası ortaya çıkar ve $F_{3/2} + P$ ile $F_{3/2}$ fazları arasındaki faz çizgisi ikinci-dereceden faz geçiş çizgisidir. Dinamik üçlü kritik nokta h/zJ 'nin yüksek ve T/zJ 'nin küçük değerleri için oluşur ve re-entrant davranış gösterir. Bu gerçekler Şekil 2.4(b)'de açıkça görülmektedir.



Şekil 2.4. Şekil 2.3 ile aynı fakat (a) $D/zJ = -0.475$ ve $\omega = 0.1\pi$, (b) $D/zJ = -0.475$ ve $\omega = 10\pi$

2.5. Sonuç ve Özet

Bu bölümde kare örgü üzerinde spin-3/2 BC modelinin dinamik manyetik özellikleri sistemdeki fazların elde edilmesi, dinamik düzen parametrelerinin termal davranışı, dinamik faz geçiş noktaları ve dinamik faz diyagramları gibi, salınımlı dış manyetik alan varlığında Glauber-tipi stokastik dinamik temelli korelasyonlu EFT (DEFT) yaklaşımı kullanılarak detaylıca incelendi. Kristal alan değerlerine bağlı olarak dinamik faz diyagramlarının $F_{3/2}$, $F_{1/2}$ ve P temel fazlarının yanında $F_{3/2} + P$ karma fazını ve ayrıca Z, A, M, E, TP v QP özel noktalarını da içerdiğini gördük. Sistemin ayrıca dinamik üçlü kritik nokta ve re-entrant davranış gösterdiğini gözlemledik. Frekansın dinamik kritik özellikleri üzerine büyük bir etkisinin olduğunu gördük. Örneğin, yüksek frekans değerlerinde faz bölgeleri çoğunlukla ikinci-dereceden faz geçişi ile birbirinden ayırt edilirken, düşük frekans değerlerinde ise çoğunlukla birinci-dereceden faz geçiş çizgisi mevcuttur.

Bu bölümde elde edilen sonuçlar Journal of Magnetism and Magnetic Materials dergisinde yayınlanmıştır [153].

3. BÖLÜM

SİLİNDİRİK SPİN-3/2 ISING NANOTÜP SİSTEMİNİN DENGEDE OLMAYAN DURUMDAKİ (DİNAMİK) MANYETİK ÖZELLİKLERİ

3.1. Giriş

Bu bölümde silindirik spin-3/2 Ising nanotüp sisteminin dinamik düzen parametrelerinin termal davranışı, dinamik faz geçiş noktaları ve dinamik faz diyagramları gibi dinamik manyetik özellikleri salınımlı dış manyetik alan varlığında Glauber-tipi stokastik dinamik temelli korelasyonlu EFT (DEFT) yaklaşımı kullanılarak detaylıca incelenecektir. Silindirik spin-3/2 Ising nanotüp sistemi için DEFT denklemleri Glauber geçiş oranları kullanılarak elde edilecektir. Sistemlerdeki mevcut olan fazları elde etmek için, ortalama mıknatıslanmalarının zamana bağlı davranışları incelenecek. Elde edilecek olan bu diferansiyel denklemler Runge-Kutta yöntemiyle nümerik olarak çözülecek ve ortalama düzen parametrelerinin zamana göre değişimi kapsamlıca incelenerek sistemlerde oluşan fazlar tespit edilecektir. Dinamik düzen parametrelerini veren denklemler Runge-Kutta ve Romberg integrasyon yöntemleri beraber kullanılarak çözülecek ve dinamik düzen parametrelerinin indirgenmiş sıcaklığa göre değişimleri detaylıca incelenerek, sistemlerde meydana gelen dinamik faz geçişlerinin tabiatı (birinci- ve ikinci-derece) karakterize edilecek ve aynı zamanda dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıkları bulunacaktır. Sonrada, hesaplanan DFG sıcaklıkları kullanılarak sistemlerin dinamik faz diyagramları (T, h) düzleminde sunulacaktır.

3.2. Modelin Tanıtımı ve Formülasyonu

Giriş bölümünde de anlatıldığı gibi nano yapılı malzemelerde düşük spin değerlerine sahip Ising sistemleri ile ilgili birçok çalışma yapılmasına rağmen yüksek spin değerlerine sahip Ising sistemleri üzerinde yapılan çalışmalar oldukça sınırlıdır. Özellikle nano yapılı malzemelerin yüksek spin değerlerinde dinamik manyetik özellikleri hemen hemen hiç çalışılmamıştır. Sadece spin-1/2 sistemi için bazı nano yapılı malzemelerin dinamik manyetik özellikleri çalışılmıştır [76-85]. Bu bakımdan tezin bu bölümünde silindirik spin-3/2 Ising nanotüp sisteminin dinamik manyetik özellikleri çalışılacaktır. Bölüm 1’ de spin-3/2 Ising modelinin dört durumlu ve üç düzen parametrelili bir sistem olduğunu söylemiştik. Burada durumdan kastedilen şey her bir spin değerinin ortalama kesirsel değeridir ve bu durumlar $S_i = +3/2, +1/2, -1/2, -3/2$ değerlerini alabilir. Bu düzen parametrelerinin miknatıslanma (m), kuadrupol moment (q) ve oktopolar moment (r) parametreleri olduğunu Bölüm 1’ de (1.2) denkleminde sonra belirtmiştik. Bu düzen parametreleri şu temel fazları tanımlamaktadır:

- i) Paramanyetik faz (p): $m_{S1} = m_{S2} = m_C = 0$,
- ii) Ferromanyetik fazlar:
 - a) Ferromanyetik-1/2 fazı ($F_{1/2}$): $m_{S1} = m_{S2} = m_C = \pm 1/2$,
 - b) Ferromanyetik-3/2 fazı ($F_{3/2}$): $m_{S1} = m_{S2} = m_C = \pm 3/2$.

Bölüm 1’de de söylediğimiz gibi silindirik nanotüp sistemine en yakın örgü hegzagonal örgü yapısıdır. Bu nedenle nanotüp sistemini tanımlamak için yaygın olarak kullanılan basit şematik gösterim Şekil 1.1 de verilmişti. Şekil 1.1 de mavi toplar nanotüp içindeki öz (core) manyetik atomlarını, gri toplar nanotüp yüzeyindeki kabuk (shell) manyetik atomlarını gösteriyordu.

En yakın komşu etkileşmelerini, kristal alan veya tek-iyon anizotropi terimini ve zamana bağlı salınımlı dış manyetik alan terimini içeren silindirik spin-3/2 Ising nanotüp sisteminin Hamilton’ yen ifadesi,

$$H = -J_S \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - J_C \sum_{\langle nm \rangle} S_m S_n - J_1 \sum_{\langle im \rangle} S_i S_m - D \left(\sum_i (S_i)^2 + \sum_m (S_m)^2 \right) - h(t) \left(\sum_i S_i + \sum_m S_m \right) \quad (3.1)$$

şeklinde tanımlanmaktadır. Burada $\langle \dots \rangle$ toplamın en yakın komşu çiftler üzerinden olacağını göstermektedir. Spin-3/2 Ising modeli dört durumlu ve üç düzen parametrelili bir sistemdir. Burada durumdan kastedilen şey her bir spin değerinin ortalama kesirsel değeridir ve durum değişkeni olarak ta adlandırılır. Bu sebepten, Şekil 1.1' de her bir noktadaki manyetik atomlar $S_i = +3/2, +1/2, -1/2, -3/2$ değerlerini alabilir. J_s, J_c ve J_1 sırasıyla kabuk manyetik atomları arasındaki bilineer etkileşme parametresi, öz manyetik atomları arasındaki bilineer etkileşme parametresi ve kabuk ile öz atomları arasındaki bilineer etkileşme parametresidir (Şekil 1.1' e bakabilirsiniz). D kristal-alan veya tek-iyon anizotropi etkileşme terimi ve $h(t)$ ise zamana bağlı salınımlı dış manyetik alandır ve şu şekilde tanımlanmaktadır.

$$h(t) = h_0 \sin(\omega t), \quad (3.2)$$

şeklinde tanımlanır. Burada h_0 ve $\omega = 2\pi\nu$ sırasıyla salınımlı alanın genliği ve açısal frekansıdır. Sistem T mutlak sıcaklığında, izotermal ısı banyosu ile temas halindedir. Bölüm 1'de de söylediğimiz gibi nano yapıları malzemelerin fiziksel özellikleri üzerinde kabuk yüzeyindeki atomlarının etkisi çok fazla olduğundan genellikle nano yapıları malzemelerde kabuk yüzeyinde manyetik atomları arasındaki bilineer etkileşme terimi

$$J_s = J_c (1 + \Delta_s) \quad (3.3)$$

şeklinde tanımlanır. Ayrıca kolaylık olması bakımından kabuk ile öz atomları arasındaki bilineer etkileşme parametresi $r = J_1 / J_c$ şeklinde tanımlanır. $r > 0$ olduğunda öz ve kabuk yüzeyindeki spinlerin yönelimleri birbirine paraleldir ve sistem ferromanyetik spin konfigürasyonu gösterir. Şayet $r < 0$ olursa, öz ve kabuktaki spin yönelimleri birbirine zıt yönlü olur ve sistem antiferromanyetik veya ferrimanyetik spin konfigürasyonu gösterir.

3.2.1. Etkin-Alan Dinamik Denklemlerinin Elde Edilmesi

Diğer taraftan, EFT yöntemi ilk kez Honmura ve Kaneyoshi [118] ile Kaneyoshi ve arkadaşları [119] tarafından tanımlansa da, nano yapıları malzemelerde (nanotüp veya nanotel gibi) manyetik özellikleri incelemek için korelasyonlu EFT yöntemini

Kaneyoshi kullanmıştır. Korelasyonlu EFT' de, spin-3/2 Ising sistemi için ortalama mıknatıslanma ifadesi,

$$\langle S_i^k \rangle = \left\langle \prod_{i=1}^z [a_0 + a_1 S_i + a_2 S_i^2 + a_3 S_i^3] \right\rangle F_k(x+h)|_{x=0}, \quad (3.4)$$

şeklinde verilir. Bu eşitlik Callen'in 1963'te, spin-1/2 [120] için elde ettiği spin korelasyonunu ifade eden Callen eşitliği ifadesinin, spin-3/2 için genelleştirilmiş şeklidir. Burada $\langle \dots \rangle$ ifadesi kanonik küme ortalamasını göstermektedir. Spin-3/2 için $k = 1, 2$ ve 3 değerlerini alır. Burada z en yakın komşu sayısını gösterir. Denklem (1.3) kesindir ve herhangi bir örgü için geçerlidir. Denklem (1.3)'ü Ising nanotüp sisteminin düzen parametreleri için aşağıdaki gibi yazabiliriz.

$$\langle S_i \rangle = \left\langle \prod_{i=1}^2 [a_0 + a_1 S_i + a_2 S_i^2 + a_3 S_i^3] \right\rangle \left\langle \prod_{m=1}^2 [a_0 + a_1 S_m + a_2 S_m^2 + a_3 S_m^3] \right\rangle, \quad (3.5a)$$

$$\left\langle \prod_{k=1}^1 [b_0 + b_1 S_k + b_2 S_k^2 + b_3 S_k^3] \right\rangle F_1(x+h)|_{x=0}$$

$$\langle S_m \rangle = \left\langle \prod_{m=1}^2 [a_0 + a_1 S_m + a_2 S_m^2 + a_3 S_m^3] \right\rangle \left\langle \prod_{i=1}^2 [a_0 + a_1 S_i + a_2 S_i^2 + a_3 S_i^3] \right\rangle, \quad (3.5b)$$

$$\left\langle \prod_{k=1}^2 [b_0 + b_1 S_k + b_2 S_k^2 + b_3 S_k^3] \right\rangle F_1(x+h)|_{x=0}$$

$$\langle S_k \rangle = \left\langle \prod_{k=1}^4 [c_0 + c_1 S_k + c_2 S_k^2 + c_3 S_k^3] \right\rangle \left\langle \prod_{i=1}^1 [b_0 + b_1 S_i + b_2 S_i^2 + b_3 S_i^3] \right\rangle, \quad (3.5c)$$

$$\left\langle \prod_{m=1}^2 [b_0 + b_1 S_m + b_2 S_m^2 + b_3 S_m^3] \right\rangle F_1(x+h)|_{x=0}$$

$$\langle S_i^2 \rangle = \left\langle \prod_{i=1}^2 [a_0 + a_1 S_i + a_2 S_i^2 + a_3 S_i^3] \right\rangle \left\langle \prod_{m=1}^2 [a_0 + a_1 S_m + a_2 S_m^2 + a_3 S_m^3] \right\rangle, \quad (3.6a)$$

$$\left\langle \prod_{k=1}^1 [b_0 + b_1 S_k + b_2 S_k^2 + b_3 S_k^3] \right\rangle F_2(x+h)|_{x=0}$$

$$\langle S_m^2 \rangle = \left\langle \prod_{m=1}^2 [a_0 + a_1 S_m + a_2 S_m^2 + a_3 S_m^3] \right\rangle \left\langle \prod_{i=1}^2 [a_0 + a_1 S_i + a_2 S_i^2 + a_3 S_i^3] \right\rangle, \quad (3.6b)$$

$$\left\langle \prod_{k=1}^2 [b_0 + b_1 S_k + b_2 S_k^2 + b_3 S_k^3] \right\rangle F_2(x+h)|_{x=0}$$

$$\langle S_k^2 \rangle = \left\langle \prod_{k=1}^4 [c_0 + c_1 S_k + c_2 S_k^2 + c_3 S_k^3] \right\rangle \left\langle \prod_{i=1}^1 [b_0 + b_1 S_i + b_2 S_i^2 + b_3 S_i^3] \right\rangle, \quad (3.6c)$$

$$\left\langle \prod_{m=1}^2 [b_0 + b_1 S_m + b_2 S_m^2 + b_3 S_m^3] \right\rangle F_2(x+h)|_{x=0}$$

$$\langle S_i^3 \rangle = \left\langle \prod_{i=1}^2 [a_0 + a_1 S_i + a_2 S_i^2 + a_3 S_i^3] \right\rangle \left\langle \prod_{m=1}^2 [a_0 + a_1 S_m + a_2 S_m^2 + a_3 S_m^3] \right\rangle, \quad (3.7a)$$

$$\left\langle \prod_{k=1}^1 [b_0 + b_1 S_k + b_2 S_k^2 + b_3 S_k^3] \right\rangle F_3(x+h)|_{x=0}$$

$$\langle S_m^3 \rangle = \left\langle \prod_{m=1}^2 [a_0 + a_1 S_m + a_2 S_m^2 + a_3 S_m^3] \right\rangle \left\langle \prod_{i=1}^2 [a_0 + a_1 S_i + a_2 S_i^2 + a_3 S_i^3] \right\rangle, \quad (3.7b)$$

$$\left\langle \prod_{k=1}^2 [b_0 + b_1 S_k + b_2 S_k^2 + b_3 S_k^3] \right\rangle F_3(x+h)|_{x=0}$$

$$\langle S_k^3 \rangle = \left\langle \prod_{k=1}^4 [c_0 + c_1 S_k + c_2 S_k^2 + c_3 S_k^3] \right\rangle \left\langle \prod_{i=1}^1 [b_0 + b_1 S_i + b_2 S_i^2 + b_3 S_i^3] \right\rangle, \quad (3.7c)$$

$$\left\langle \prod_{m=1}^2 [b_0 + b_1 S_m + b_2 S_m^2 + b_3 S_m^3] \right\rangle F_3(x+h)|_{x=0}$$

(3.5) – (3.7) denklemlerinde bütün spin-spin korelasyonlarının tamamı ele alınırsa, problemin çözümü zorlaşır. Bu zorluğu yenmek için ilk çaba korelasyonlar arasındaki etkileşmeyi indirgeyen bağılımsızlık (decoupling) yaklaşımı

$$\langle S_i S_i' \dots S_i^n \rangle \cong \langle S_i \rangle \langle S_i' \rangle \dots \langle S_i^n \rangle, \quad (3.8)$$

şeklinde kullanılır. Aslında bu yaklaşım, esas itibariyle hacim veya yoğun (bulk) probleminde Zernike yaklaşımına [120] tekabül etmektedir ve yüzey problemlerini

içeren çok sayıda manyetik sisteme başarılı bir şekilde uygulanmıştır [121-125]. Bağılımsızlık (decoupling) yaklaşımı ve (3.5) – (3.7) denklemleri kullanılırsa, sistemin ortalama mıknatıslanmaları, kuadrupol ve oktopolar moment terimleri aşağıdaki gibi yazılır.

$$m_{S1} = \langle S_i \rangle = \left[a_0 + a_1 \langle S_i \rangle + a_2 \langle S_i^2 \rangle + a_3 \langle S_i^3 \rangle \right]^2 \left[a_0 + a_1 \langle S_m \rangle + a_2 \langle S_m^2 \rangle + a_3 \langle S_m^3 \rangle \right]^2 \times \left[b_0 + b_1 \langle S_k \rangle + b_2 \langle S_k^2 \rangle + b_3 \langle S_k^3 \rangle \right] F_1(x+h) \Big|_{x=0} , \quad (3.9a)$$

$$m_{S2} = \langle S_m \rangle = \left[a_0 + a_1 \langle S_m \rangle + a_2 \langle S_m^2 \rangle + a_3 \langle S_m^3 \rangle \right]^2 \left[a_0 + a_1 \langle S_i \rangle + a_2 \langle S_i^2 \rangle + a_3 \langle S_i^3 \rangle \right]^2 \times \left[b_0 + b_1 \langle S_k \rangle + b_2 \langle S_k^2 \rangle + b_3 \langle S_k^3 \rangle \right]^2 F_1(x+h) \Big|_{x=0} , \quad (3.9b)$$

$$m_C = \langle S_k \rangle = \left[c_0 + c_1 \langle S_k \rangle + c_2 \langle S_k^2 \rangle + c_3 \langle S_k^3 \rangle \right]^4 \left[b_0 + b_1 \langle S_i \rangle + b_2 \langle S_i^2 \rangle + b_3 \langle S_i^3 \rangle \right] \times \left[b_0 + b_1 \langle S_m \rangle + b_2 \langle S_m^2 \rangle + b_3 \langle S_m^3 \rangle \right]^2 F_1(x+h) \Big|_{x=0} , \quad (3.9c)$$

$$q_{S1} = \langle S_i^2 \rangle = \left[a_0 + a_1 \langle S_i \rangle + a_2 \langle S_i^2 \rangle + a_3 \langle S_i^3 \rangle \right]^2 \left[a_0 + a_1 \langle S_m \rangle + a_2 \langle S_m^2 \rangle + a_3 \langle S_m^3 \rangle \right]^2 \times \left[b_0 + b_1 \langle S_k \rangle + b_2 \langle S_k^2 \rangle + b_3 \langle S_k^3 \rangle \right] F_2(x+h) \Big|_{x=0} , \quad (3.10a)$$

$$q_{S2} = \langle S_m^2 \rangle = \left[a_0 + a_1 \langle S_m \rangle + a_2 \langle S_m^2 \rangle + a_3 \langle S_m^3 \rangle \right]^2 \left[a_0 + a_1 \langle S_i \rangle + a_2 \langle S_i^2 \rangle + a_3 \langle S_i^3 \rangle \right]^2 \times \left[b_0 + b_1 \langle S_k \rangle + b_2 \langle S_k^2 \rangle + b_3 \langle S_k^3 \rangle \right]^2 F_2(x+h) \Big|_{x=0} , \quad (3.10b)$$

$$q_C = \langle S_k^2 \rangle = \left[c_0 + c_1 \langle S_k \rangle + c_2 \langle S_k^2 \rangle + c_3 \langle S_k^3 \rangle \right]^4 \left[b_0 + b_1 \langle S_i \rangle + b_2 \langle S_i^2 \rangle + b_3 \langle S_i^3 \rangle \right] \times \left[b_0 + b_1 \langle S_m \rangle + b_2 \langle S_m^2 \rangle + b_3 \langle S_m^3 \rangle \right]^2 F_2(x+h) \Big|_{x=0} , \quad (3.10c)$$

$$r_{S1} = \langle S_i^3 \rangle = \left[a_0 + a_1 \langle S_i \rangle + a_2 \langle S_i^2 \rangle + a_3 \langle S_i^3 \rangle \right]^2 \left[a_0 + a_1 \langle S_m \rangle + a_2 \langle S_m^2 \rangle + a_3 \langle S_m^3 \rangle \right]^2 \times \left[b_0 + b_1 \langle S_k \rangle + b_2 \langle S_k^2 \rangle + b_3 \langle S_k^3 \rangle \right] F_3(x+h) \Big|_{x=0} , \quad (3.11a)$$

$$r_{S2} = \langle S_m^3 \rangle = \left[a_0 + a_1 \langle S_m \rangle + a_2 \langle S_m^2 \rangle + a_3 \langle S_m^3 \rangle \right]^2 \left[a_0 + a_1 \langle S_i \rangle + a_2 \langle S_i^2 \rangle + a_3 \langle S_i^3 \rangle \right]^2 \times \left[b_0 + b_1 \langle S_k \rangle + b_2 \langle S_k^2 \rangle + b_3 \langle S_k^3 \rangle \right]^2 F_3(x+h) \Big|_{x=0} , \quad (3.11b)$$

$$r_c = \langle S_k^3 \rangle = \left[c_0 + c_1 \langle S_k \rangle + c_2 \langle S_k^2 \rangle + c_3 \langle S_k^3 \rangle \right]^4 \left[b_0 + b_1 \langle S_i \rangle + b_2 \langle S_i^2 \rangle + b_3 \langle S_i^3 \rangle \right] \times \left[b_0 + b_1 \langle S_m \rangle + b_2 \langle S_m^2 \rangle + b_3 \langle S_m^3 \rangle \right]^2 F_3(x+h)|_{x=0} . \quad (3.11c)$$

(3.9)-(3.11) denklemlerindeki a_i , b_i ve c_i katsayıları silindirik spin-3/2 Ising nanotüp sistemi için yazılacak Van der Waerden [126] özdeşliğinden gelir ve aşağıdaki gibidirler.

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{1}{8} \left(9 \cosh \left[\frac{1}{2} J_s \nabla \right] - \cosh \left[\frac{3}{2} J_s \nabla \right] \right), \\ a_1 &= \frac{1}{12} \left(27 \sinh \left[\frac{1}{2} J_s \nabla \right] - \sinh \left[\frac{3}{2} J_s \nabla \right] \right), \\ a_2 &= \frac{1}{2} \left(-\cosh \left[\frac{1}{2} J_s \nabla \right] + \cosh \left[\frac{3}{2} J_s \nabla \right] \right), \\ a_3 &= \frac{1}{3} \left(-3 \sinh \left[\frac{1}{2} J_s \nabla \right] + \sinh \left[\frac{3}{2} J_s \nabla \right] \right). \\ \\ b_0 &= \frac{1}{8} \left(9 \cosh \left[\frac{1}{2} J_1 \nabla \right] - \cosh \left[\frac{3}{2} J_1 \nabla \right] \right), \\ b_1 &= \frac{1}{12} \left(27 \sinh \left[\frac{1}{2} J_1 \nabla \right] - \sinh \left[\frac{3}{2} J_1 \nabla \right] \right), \\ b_2 &= \frac{1}{2} \left(-\cosh \left[\frac{1}{2} J_1 \nabla \right] + \cosh \left[\frac{3}{2} J_1 \nabla \right] \right), \\ b_3 &= \frac{1}{3} \left(-3 \sinh \left[\frac{1}{2} J_1 \nabla \right] + \sinh \left[\frac{3}{2} J_1 \nabla \right] \right). \\ \\ c_0 &= \frac{1}{8} \left(9 \cosh \left[\frac{1}{2} J_c \nabla \right] - \cosh \left[\frac{3}{2} J_c \nabla \right] \right), \\ c_1 &= \frac{1}{12} \left(27 \sinh \left[\frac{1}{2} J_c \nabla \right] - \sinh \left[\frac{3}{2} J_c \nabla \right] \right), \\ c_2 &= \frac{1}{2} \left(-\cosh \left[\frac{1}{2} J_c \nabla \right] + \cosh \left[\frac{3}{2} J_c \nabla \right] \right), \\ c_3 &= \frac{1}{3} \left(-3 \sinh \left[\frac{1}{2} J_c \nabla \right] + \sinh \left[\frac{3}{2} J_c \nabla \right] \right). \end{aligned} \quad (3.12)$$

(3.9) - (3.11) denklemlerindeki $F_1(x+h)$, $F_2(x+h)$ and $F_3(x+h)$ fonksiyonları aşağıdaki gibi verilir.

$$F_1(x+h) = \frac{1}{2} \frac{3 \sinh[3\beta(x+h)/2] + \sinh[\beta(x+h)/2] \exp(-2\beta D)}{\cosh[3\beta(x+h)/2] + \cosh[\beta(x+h)/2] \exp(-2\beta D)}, \quad (3.13a)$$

$$F_2(x+h) = \frac{1}{2} \frac{9 \cosh[3\beta(x+h)/2] + \cosh[\beta(x+h)/2] \exp(-2\beta D)}{2 \cosh[3\beta(x+h)/2] + 2 \cosh[\beta(x+h)/2] \exp(-2\beta D)}, \quad (3.13b)$$

$$F_3(x+h) = \frac{1}{2} \frac{27 \sinh[3\beta(x+h)/2] + \sinh[\beta(x+h)/2] \exp(-2\beta D)}{4 \cosh[3\beta(x+h)/2] + 4 \cosh[\beta(x+h)/2] \exp(-2\beta D)}. \quad (3.13c)$$

Denklem (3.13)' te $\beta = 1/k_B T$, T mutlak sıcaklık ve k_B Boltzmann sabitidir ve yapılan tüm hesaplamalarda $k_B = 1.0$ olarak alınmıştır. Şunu da belirtmemiz gerekir ki Denklem (3.1)'deki Hamiltonyen ifadesi bikuadratik etkileşme parametresini (K) içermediğinden dolayı, (3.10) denklemindeki q teriminin ve termal davranışı m nin davranışına benzediğinden dolayı da (3.11) denklemindeki oktipolar moment teriminin termal davranışı bu tez çalışmasında verilmeyecektir. Böylece bu tez çalışmasında yalnızca m düzen parametresinin termal davranışı incelendi.

Sistemin ortalama etkin-alan dinamik denklemlerini elde etmek için, denklem (3.9)' da ki ortalama mıknatıslanma eşitliklerine master denklemi temelli Glauber-tipi stokastik dinamik özellikle de Glauber geçiş oranları aşağıdaki gibi uygulanır.

$$\tau \frac{dm_{S1}}{dt} = -m_{S1} + \left[a_0 + a_1 \langle S_i \rangle + a_2 \langle S_i^2 \rangle + a_3 \langle S_i^3 \rangle \right]^2 \left[a_0 + a_1 \langle S_m \rangle + a_2 \langle S_m^2 \rangle + a_3 \langle S_m^3 \rangle \right]^2 \times \left[b_0 + b_1 \langle S_k \rangle + b_2 \langle S_k^2 \rangle + b_3 \langle S_k^3 \rangle \right] F_1(x+h) \Big|_{x=0}, \quad (3.14a)$$

$$\tau \frac{dm_{S2}}{dt} = -m_{S2} + \left[a_0 + a_1 \langle S_m \rangle + a_2 \langle S_m^2 \rangle + a_3 \langle S_m^3 \rangle \right]^2 \left[a_0 + a_1 \langle S_i \rangle + a_2 \langle S_i^2 \rangle + a_3 \langle S_i^3 \rangle \right]^2 \times \left[b_0 + b_1 \langle S_k \rangle + b_2 \langle S_k^2 \rangle + b_3 \langle S_k^3 \rangle \right]^2 F_1(x+h) \Big|_{x=0}, \quad (3.14b)$$

$$\tau \frac{dm_c}{dt} = -m_c + \left[c_0 + c_1 \langle S_k \rangle + c_2 \langle S_k^2 \rangle + c_3 \langle S_k^3 \rangle \right]^4 \left[b_0 + b_1 \langle S_i \rangle + b_2 \langle S_i^2 \rangle + b_3 \langle S_i^3 \rangle \right] \times \left[b_0 + b_1 \langle S_m \rangle + b_2 \langle S_m^2 \rangle + b_3 \langle S_m^3 \rangle \right]^2 F_1(x+h) \Big|_{x=0} . \quad (3.14c)$$

Sistem Glauber-tipi stokastik dinamiğe göre birim zamanda $1/\tau$ oranında deęişim gösterir. (3.13) ve (3.14) denklemlerinden yararlanılarak (3.14) denklemlerinin saę tarafları genişletilir. Bu şekilde m_{s_1} , m_{s_2} ve m_c mıknatıslanmaları çok uzun ve karmaşık trigonometrik formdaki katsayılar cinsinden yazılmış olur. İlk olarak bu katsayıları trigonometrik formdan kurtarmamız ve Denklem (3.13)' te ki fonksiyonlar cinsinden yazmamız gerekir. Bunun için diferansiyel operatör teknięi adı verilen aşığıdaki eşıtlık kullanılır.

$$\exp(\alpha \nabla) f(x) = f(x + \alpha) \quad (3.15)$$

Burada $\nabla = \partial / \partial x$ diferansiyel operatördür. Bu şekilde (3.9) denklemindeki m mıknatıslanmaları için katsayılar hesaplanır ve çiftlenimli eşıtlıklar elde edilir. Yukarıda da belirttiğimiz gibi bu tez çalışmasında yalnızca m düzen parametresinin termal davranışı incelendi. Bu sebepten sadece mıknatıslanma ifadesini kullanacağız. m_{s_1} , m_{s_2} ve m_c mıknatıslanmaları birbirlerine baęlı fonksiyonlar şeklinde en sade halde aşığıdaki gibi yazılabilir.

$$\tau \frac{dm_{s_1}}{dt} = -m_{s_1} + F_{m_{s_1}}(b_i, m_{s_1}, m_{s_2}, m_c) \quad (3.16a)$$

$$\tau \frac{dm_{s_2}}{dt} = -m_{s_2} + F_{m_{s_2}}(c_i, m_{s_1}, m_{s_2}, m_c) \quad (3.16b)$$

$$\tau \frac{dm_c}{dt} = -m_c + F_c(a_i, m_{s_1}, m_{s_2}, m_c) \quad (3.16c)$$

Buradaki $F_{m_{s_1}}$, $F_{m_{s_2}}$ ve F_{m_c} fonksiyonlarının en açık halleri **EK-1**' de verilmiştir. Böylece sistemin ortalama etkin-alan dinamik denklemleri elde edilmiş oldu. Birbirlerine baęlı bu çiftlenimli denklemler numerik olarak çözülecek düzen parametrelerinin termal

davranışları sistem parametrelerinin çeşitli değerleri için belirlenir. Şekil 1.1' deki nanotüp sistemimiz için hem toplam m_T hem de kabuk yüzeyindeki toplam m_S dinamik miknatıslanmaları, nanotüp sisteminin her bir noktası için öz ve kabuk yüzeyindeki toplam atom sayısına bağlı olarak şu şekilde yazılır.

$$m_T = \frac{1}{18}(6m_{S1} + 6m_{S2} + 6m_C) \quad (3.17a)$$

$$m_S = \frac{1}{12}(6m_{S1} + 6m_{S2}) \quad (3.17b)$$

Bir sonraki kesimde bu denklemlerin nümerik çözümleri yapılacak ve bu çözümler tartışılacaktır.

3.3. Dinamik Faz Geçiş Noktaları ve Dinamik Faz Diyagramları

3.3.1. Ortalama Miknatıslanmaların Zamanla Değişimi

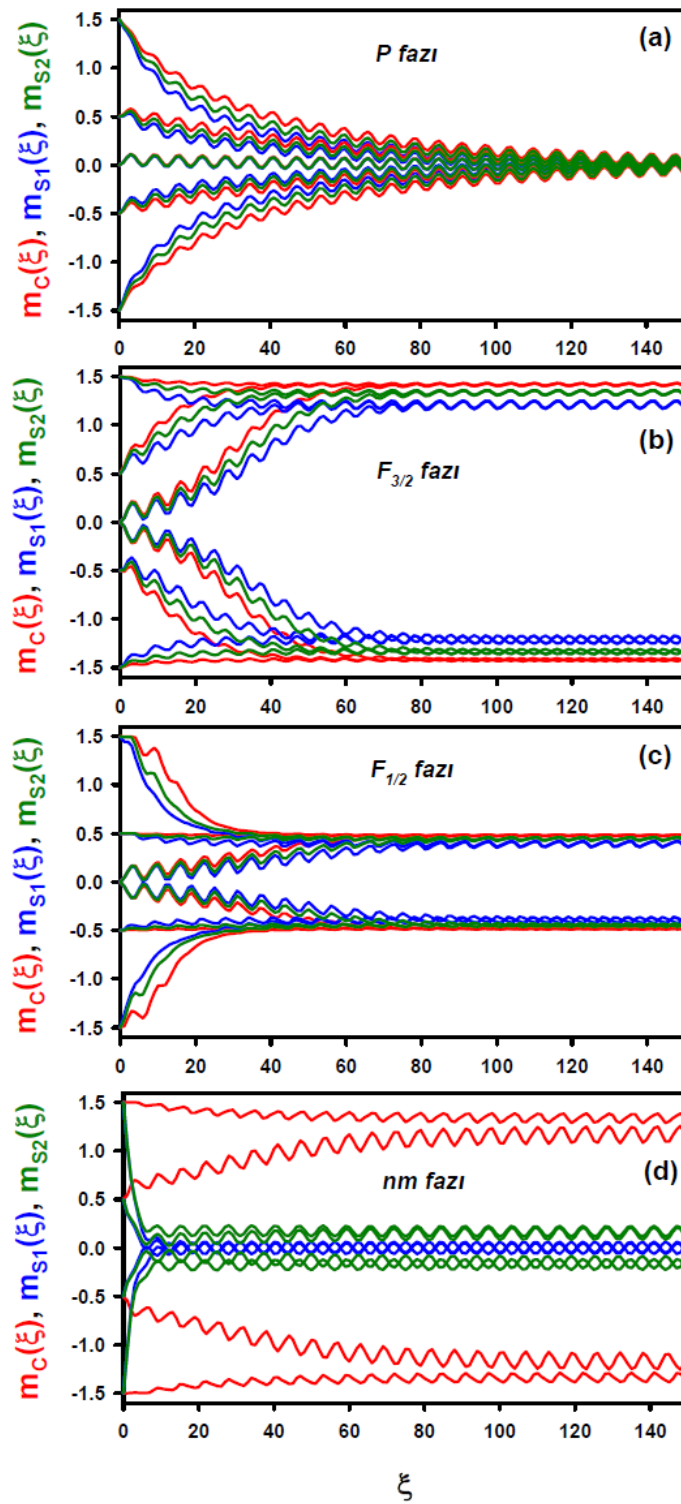
Bu kesimde, (3.16) ile verilen ortalama etkin-alan dinamik denklemlerinin Adams-Moulton kestirme ve düzeltme yöntemi kullanılarak nümerik olarak çözülmesiyle ortalama düzen parametrelerinin, yani ortalama miknatıslanmalarının $m_{S1}(\xi)$, $m_{S2}(\xi)$ ve $m_C(\xi)$ nin zamana bağlı davranışları incelenecektir.

Sistemde var olan fazları bulmak için denklem (3.16) ile verilen ortalama etkin-alan dinamik denkleminin kararlı çözümleri farklı r , Δs , D , h ve T değerleri için incelenecektir. Denklem (3.16)'un kararlı çözümleri 2π periyodu için ξ 'nin periyodik bir fonksiyonu olacaktır, yani

$$m_{S1}(\xi + \pi) = -m_{S1}(\xi), \quad (3.18a)$$

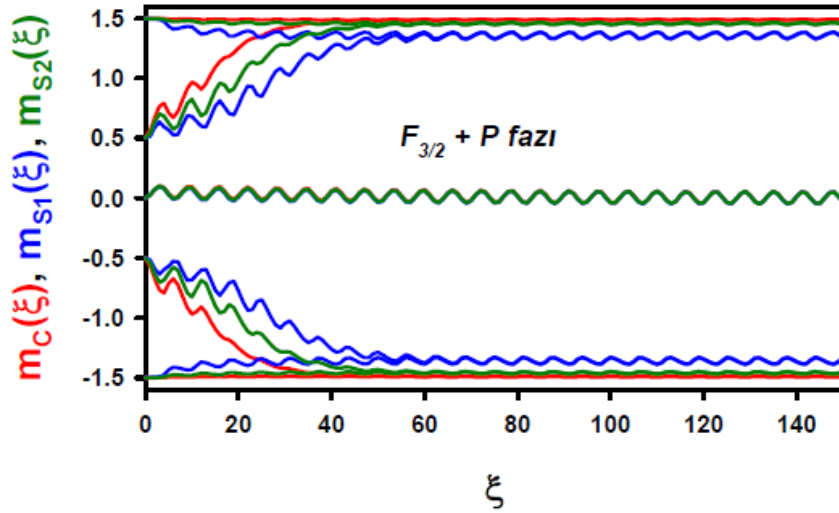
$$m_{S2}(\xi + \pi) = -m_{S2}(\xi), \quad (3.18b)$$

$$m_C(\xi + \pi) = -m_C(\xi), \quad (3.18c)$$



Şekil 3.1. Silindirik spin-3/2 Ising nanotüp sistemi için $m_{s_1}(\xi)$, $m_{s_2}(\xi)$ ve $m_c(\xi)$ ortalama mıknatıslanmaların zamanla değişimi. **(a)** Sistemde paramanyetik (P) faz mevcuttur, $r = 1.0$, $\Delta_S = 0.0$, $D = 0.0$, $h = 2.5$, $\omega = 2\pi$ ve $T = 8.5$. **(b)** Sistemde ferromanyetik-3/2 ($F_{3/2}$) faz mevcuttur, $r = 1.0$, $\Delta_S = 0.0$, $D = -2.0$, $h = 2.5$, $\omega = 2\pi$ ve $T = 2.0$. **(c)** Sistemde ferromanyetik-1/2 ($F_{1/2}$) faz mevcuttur, $r = 1.0$, $\Delta_S = 0.0$, $D = -2.0$, $h = 2.0$, $\omega = 2\pi$ ve $T = 0.5$. **(d)** Sistemde nm fazı mevcuttur, $r = 0.5$, $\Delta_S = -3.0$, $D = -2.0$, $h = 1.5$, $\omega = 2\pi$ ve $T = 0.5$.

şeklindedir. Burada $\xi = \omega t$ dir. Eğer denklem (3.16)'nın çözümü, (3.18) denklemiyle verilen özelliğe sahipse simetrik çözüm olarak adlandırılır ve bu paramanyetik (P) yada düzensiz faza karşılık gelir. Bu çözümde $m_{s1}(\xi)$, $m_{s2}(\xi)$ ve $m_c(\xi)$ başlangıç değerleri ne olursa olsun sürekli sıfır civarında salınır. İkinci çözüm ise, (3.12) denklemiyle verilen özelliğe sahip değildir ve bu simetrik olmayan çözüm olarak adlandırılır ki bu çözüm ferromanyetik (F) faza karşılık gelir. Bu çözümde $m_{s1}(\xi)$, $m_{s2}(\xi)$ ve $m_c(\xi)$ başlangıç değerleri ne olursa olsun sıfır olmayan değerler etrafında salınır. Eğer $m_{s1}(\xi) = m_{s2}(\xi) = m_c(\xi) = \pm 3/2$ değerleri etrafında salınıyorsa ferromanyetik-3/2 ($F_{3/2}$) faz ve $m_{s1}(\xi) = m_{s2}(\xi) = m_c(\xi) = \pm 1/2$ değeri etrafında salınıyorsa ferromanyetik-1/2 ($F_{1/2}$) faz olarak adlandırılır. Bu durumda ortalama mıknatıslanma dış manyetik alana uymaz. Bu çözümlerin gerçekliği açık bir şekilde (3.16) ile verilen etkin-alan dinamik denklemlerinin nümerik olarak çözülmesiyle görülür. (3.16) numaralı denklemlerin, verilen parametreler ve başlangıç değerleri için Adams-Moulton kestirme ve düzeltme yöntemi kullanılarak çözülmesiyle sistemde P, $F_{3/2}$, $F_{1/2}$, nm temel fazlarının yanında bir adet karma faz bulundu. Bu karma faz $F_{3/2}$ ve P fazlarının bir arada bulunduğu $F_{3/2} + P$ karma fazıdır. Temel fazlara karşılık gelen çözümler Şekil 3.1' te gösterilmiştir. Şekil 3.1(a) $r = 1.0$, $\Delta_S = 0.0$, $D = 0.0$, $h = 2.5$, $\omega = 2\pi$ ve $T = 8.5$ parametre değerleri için elde edildi. Şekil 3.1(a)' dan da açıkça görüldüğü gibi bu parametre değerlerinde ve farklı başlangıç koşulları için sistem daima P fazını göstermektedir. Şekil 3.1(b) farklı başlangıç koşulları ve $r = 1.0$, $\Delta_S = 0.0$, $D = -2.0$, $h = 2.5$, $\omega = 2\pi$ ve $T = 2.0$ parametre değerleri için daima $F_{3/2}$ fazını göstermektedir. Yani sistemde $m_{s1}(\xi)$, $m_{s2}(\xi)$ ve $m_c(\xi)$ mıknatıslanmalarının başlangıç değerleri ne olursa olsun sistemde ortaya $F_{3/2}$ fazı çıkacaktır. $r = 1.0$, $\Delta_S = 0.0$, $D = -2.0$, $h = 2.0$, $\omega = 2\pi$ ve $T = 0.5$. parametre değerleri ve farklı başlangıç koşulları için $F_{1/2}$ fazını Şekil 3.1(c)' de görebiliriz. Son olarak Şekil 3.1(d) $r = 0.5$, $\Delta_S = -3.0$, $D = -2.0$, $h = 1.5$, $\omega = 2\pi$ ve $T = 0.5$ parametre değerleri için elde edilmiştir ve sistemde $F_{3/2}$ ve nm teme fazları gözlenmiştir. $m_{s1}(\xi)$, $m_{s2}(\xi)$ ve $m_c(\xi)$ mıknatıslanmalarının başlangıç değerleri ne olursa olsun $m_c(\xi)$ mıknatıslanması daima $F_{3/2}$ fazına, $m_{s1}(\xi)$ ve $m_{s2}(\xi)$ mıknatıslanmaları da P fazına gider. Böylece sistemde nm fazı ortaya çıkar. Şekil 3.2' de ise $r = 1.0$, $\Delta_S = 0.0$, $D = -1.0$, $h = 2.0$, $\omega = 2\pi$ ve $T = 0.55$ parametreleri için $F_{3/2} + P$ karma fazı gözlenmiştir. Burada $m_{s1}(\xi)$, $m_{s2}(\xi)$ ve $m_c(\xi)$ mıknatıslanmalarının başlangıç değerleri $+3/2$, $+1/2$, $-1/2$, $-3/2$ olursa sistemde $F_{3/2}$ fazı, $m_{s1}(\xi)$, $m_{s2}(\xi)$ ve $m_c(\xi)$ mıknatıslanmalarının başlangıç değerleri 0.0 olursa sistemde P fazı ortaya çıkar.



Şekil 3.2. Silindirik spin-3/2 Ising nanotüp sisteminde $r = 1.0$, $\Delta_s = 0.0$, $D = -1.0$, $h = 2.0$, $\omega = 2\pi$ ve $T = 0.55$ parametreleri için $F_{3/2} + P$ karma fazını göstermektedir.

Şekil 3.1 ve 3.2’de görülen fazların karşılıkları şekil 3.4’te elde edilen faz diyagramlarında açık bir şekilde görülmektedir. Örnek vermek gerekirse, şekil 3.1(d)’de ki P fazının karşılığı şekil 3.4(a)’da veya şekil 3.1(d)’de ki nm fazının karşılığı da şekil 3.4(e)’de açıkça gözükmemektedir.

3.3.2. Dinamik Faz Geçiş Noktaları

Sistemde mevcut olan fazlar arasındaki dinamik faz sınırlarını belirleyebilmemiz için, dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıklarını hesaplamalı ve dinamik faz geçişlerinin doğasını (kesikli veya sürekli yani birinci- veya ikinci-derece faz geçişleri) karakterize etmeliyiz. Bu şekilde DFG sıcaklıklarından yararlanarak dinamik faz diyagramlarını sunabiliriz.

DFG sıcaklıkları bir periyot başına ortalama düzen parametrelerinin yani dinamik mıknatıslanmaların indirgenmiş sıcaklığın bir fonksiyonu olarak incelenmesiyle elde edilecektir. Dinamik düzen parametreleri veya salınımlı dış manyetik alanın bir periyodu üzerinden mıknatıslanmaların zaman ortalaması olarak dinamik mıknatıslanmalar,

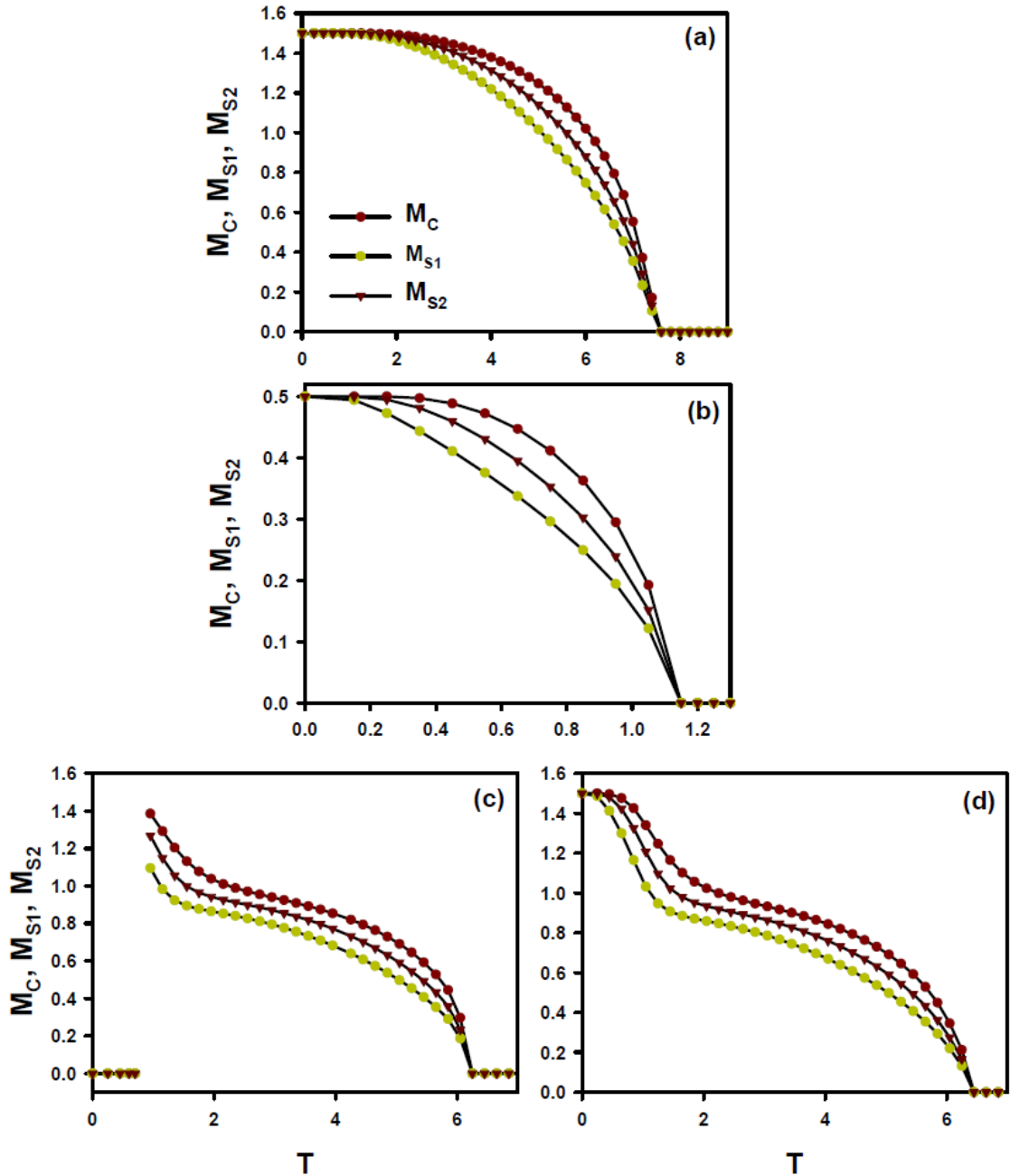
$$M_{S1} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} m_{S1}(\xi) d\xi \quad (3.19a)$$

$$M_{S2} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} m_{S2}(\xi) d\xi \quad (3.19b)$$

$$M_C = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} m_C(\xi) d\xi \quad (3.19c)$$

Denklem (3.19) r , Δ_S , D , h etkileşme parametrelerinin bir kaç değeri için sıcaklığın bir fonksiyonu olarak Adams-Moulton kestirme ve düzeltme ile Romberg integrasyon yöntemi gibi nümerik metotların birleştirilmesiyle çözüldü. M_{S1} , M_{S2} ve M_C ' den elde edilen bu termal davranışı bize DPT noktalarını ve dinamik faz geçiş tipini verecektir. Fazlar arasındaki dinamik faz sınırlarının, DFG sıcaklıklarının nasıl elde edildiği Şekil 3.3'te gösterilmektedir. Şekil 3.3(a), $r = 1.0$, $\Delta_S = 0.0$, $D = 0.0$, $h = 2.5$ ve $\omega = 2\pi$ değerleri için elde edildi. $T = 0.0$ sıcaklık değerinde M_{S1} , M_{S2} ve M_C dinamik mıknatıslanmaları 1.5 değerine eşittirler. Sıcaklık artmaya başladığında M_{S1} , M_{S2} ve M_C dinamik mıknatıslanmaları azalmaya başlayarak sıfıra doğru gider. Bu dinamik mıknatıslanmaların davranışına baktığımızda M_{S1} ve M_{S2} kabuk mıknatıslanmaları M_C öz mıknatıslanmasına göre daha çabuk sıfıra gitmektedir. M_{S1} , M_{S2} ve M_C dinamik mıknatıslanmaları $T_C = 7.56$ sıcaklık değerinde sistem ikinci-dereceden faz geçişine uğrayarak $F_{3/2}$ fazından P fazına geçmektedir. Şekil 3.3(b) $r = 1.0$, $\Delta_S = 0.0$, $D = -4.0$, $h = 2.0$ ve $\omega = 2\pi$ değerleri için elde edildi. $T = 0.0$ sıcaklık değerinde M_{S1} , M_{S2} ve M_C dinamik mıknatıslanmaları tüm başlangıç koşulları için 0.5 değerine eşittirler. Sıcaklık artışıyla birlikte M_{S1} , M_{S2} ve M_C mıknatıslanmaları azalmaya başlar ve sistem $T_C = 1.13$ sıcaklık değerinde ikinci-dereceden faz geçişine uğrayarak $F_{1/2}$ fazından P fazına geçer. Şekil 3.3(c) ve 3.3(d), $r = 1.0$, $\Delta_S = 0.0$, $D = -1.0$, $h = 2.0$ ve $\omega = 2\pi$ parametreleri ile farklı başlangıç koşulları için elde edildi. Bu iki şekil birlikte ele alındığında birbirlerini izleyen üç faz geçişine uğradıkları anlaşılır. Birinci faz geçişi M_{S1} , M_{S2} ve M_C mıknatıslanmaları için başlangıç değerlerinin 0.0 olduğu ve sistemin $F_{3/2} + P$ fazından $F_{3/2}$ fazına döndüğü geçiştir. Geçiş $T_1 = 0.71$ sıcaklığında birinci-dereceden faz geçiştir. İkinci faz geçişi $F_{3/2}$ fazından $F_{3/2} + P$ fazıdır. Bu geçiş $T_C = 6.25$ sıcaklığında ikinci-dereceden faz geçiştir. Son olarak üçüncü faz geçişi M_{S1} , M_{S2} ve M_C mıknatıslanmaları

için başlangıç değerlerinin 1.5 olduğu ve sistemin $F_{3/2} + P$ fazından P fazına döndüğü geçiştir. Geçiş $T_C = 6.45$ sıcaklığında ikinci-dereceden faz geçiştir.



Şekil 3.3. Silindirik spin-3/2 Ising nanotüp sistemi için M_{S1} , M_{S2} ve M_C dinamik mıknatıslanmaların sıcaklığa göre değişimi. **(a)** $F_{3/2}$ fazından P fazına ikinci-dereceden geçiş. **(b)** $F_{1/2}$ fazından P fazına ikinci-dereceden geçiş. **(c)** ve **(d)** Sırasıyla, $F_{3/2} + P$ fazından $F_{3/2}$ fazına birinci-dereceden geçiş, $F_{3/2}$ fazından $F_{3/2} + P$ fazına ikinci-dereceden geçiş ve son olarak $F_{3/2} + P$ fazından P fazına ikinci-dereceden geçişleri göstermektedir.

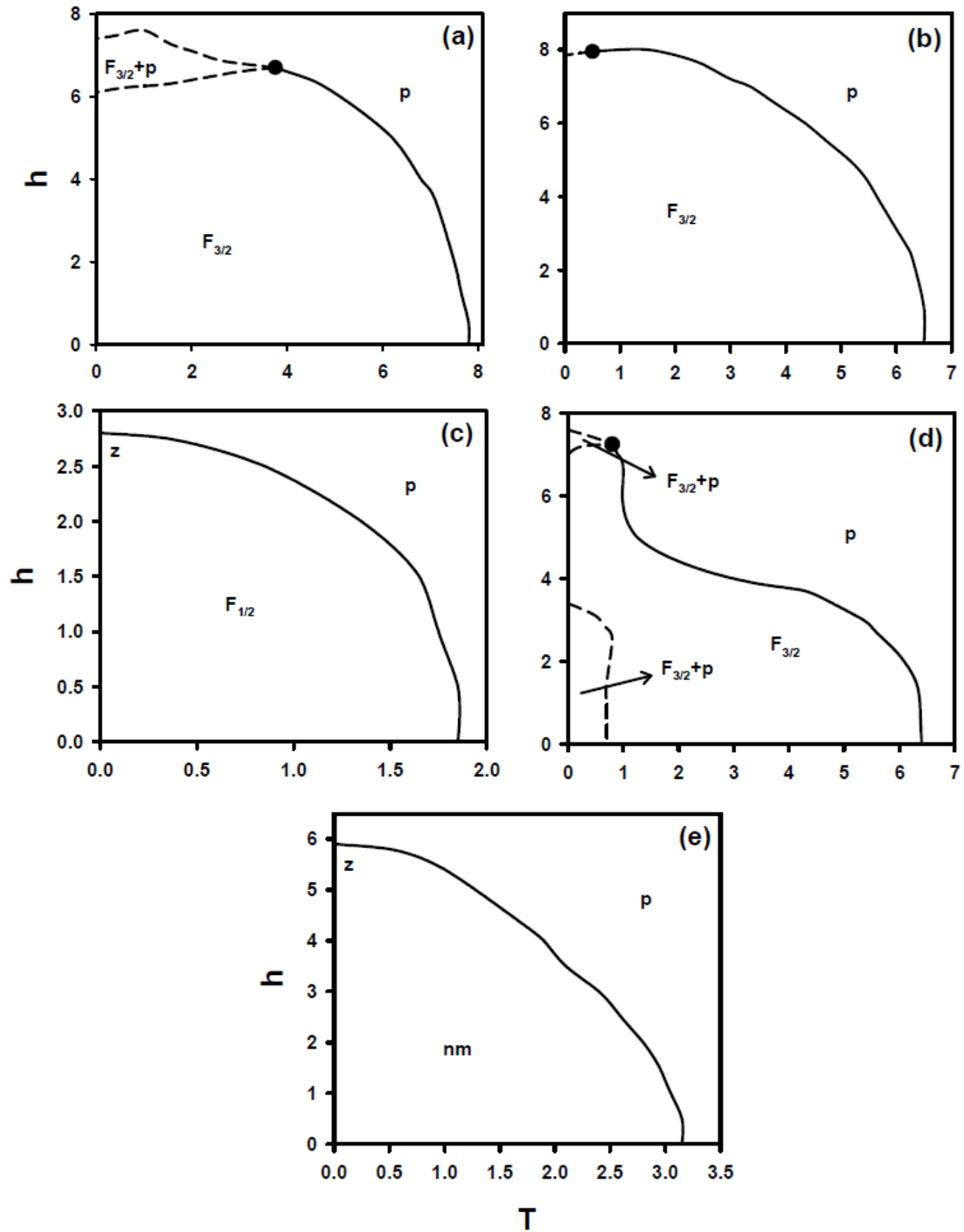
3.4. Dinamik Faz Diyagramları

DFG sıcaklıklarını elde ettikten sonra silindirik spin-3/2 Ising nanotüp sisteminin dinamik faz diyagramlarını (T, h) düzleminde sunabiliriz. Bu kesimde r, Δ_s, D, h ve ω gibi parametrelerin çeşitli değerleri için (T, h) düzleminde ele alınacaktır. (T, h) düzleminde elde edilen dinamik faz diyagramları Şekil 3.4' te gösterilmiştir. Şekil 3.4' te kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçiş çizgilerini ve içi dolu daireler dinamik üçlü kritik noktayı göstermektedir.

Şekil 3.4'te r, Δ_s, D, h ve T sistem parametrelerinin çeşitli değerleri için 5 farklı tipte dinamik faz diyagramı elde edilmiştir. Şimdi bu dinamik faz diyagramlarını ayrıntılı inceleyelim:

i) Şekil 3.4(a) $r = 1.0, \Delta_s = 0.0, D = 0.0$ ve $\omega = 2\pi$ parametre değerleri için elde edilen dinamik faz diyagramını göstermektedir. Bu faz diyagramında, $F_{3/2}$ ve P temel fazlarının yanı sıra sistemde $F_{3/2} + P$ karma fazı ve dinamik üçlü kritik nokta da özlenmiştir. $F_{3/2}$ fazı ile P fazı arasındaki faz geçiş çizgisi ikinci-dereceden ve $F_{3/2} + P$ fazı ile $F_{3/2}$ fazı ve $F_{3/2} + P$ fazı ile P fazı arasındaki faz geçiş çizgisi birinci-dereceden faz geçişleridir. Bu şekil için belirtmemiz gereken diğer bir önemli özellik re-entrant davranıştır. Yani, sistem sıcaklık artarken P fazından $F_{3/2} + P$ fazına ve oradan da yeniden P fazına geri döner. Sistem düşük sıcaklık ve yüksek manyetik alan genlik değerlerinde bu davranışı göstermektedir. Şekil 3.4(a)'da bu davranış gözükmemektedir. Şekil 3.4(a)'da elde edilen fazların karşılığı Şekil 3.1(a)'da salınım şeklinde de gözükmemektedir.

ii) $r = 1.0, \Delta_s = 0.0, D = -2.0$ ve $\omega = 2\pi$ parametre değerleri için dinamik faz diyagramı Şekil 3.4(b)'de elde edilmiştir. Bu faz diyagramında mıknatıslanmaların tüm başlangıç değerleri için sadece $F_{3/2}$ ve P temel fazları gözlenmiştir. Herhangi bir şekilde karma faz gözlenmemiştir. Ayrıca faz diyagramı birinci- ve ikinci-dereceden faz geçişlerinin yanında dinamik üçlü kritik noktayı da içermektedir. $F_{3/2}$ fazı ile P fazı arasındaki faz geçiş çizgisi genelde ikinci-dereceden faz geçiş çizgisi olmakla birlikte sadece düşük sıcaklık ve yüksek manyetik alan genlik değerlerinde $F_{3/2}$ fazı ile P fazı arasındaki faz geçiş çizgisi birinci-dereceden faz geçiş çizgisi olmaktadır. Şekil 3.4(b)'de elde edilen fazların karşılığı Şekil 3.1(b)'de salınım şeklinde de gözükmemektedir.



Şekil 3.4. Silindirik spin-3/2 Ising nanotüp sistemi için (T, h) düzleminde dinamik faz diyagramları. Dinamik faz diyagramları paramanyetik (P), ferromanyetik-3/2 ($F_{3/2}$), ferromanyetik-1/2 ($F_{1/2}$), non-manyetik (nm) temel fazlarını ve $F_{3/2}+P$ karma fazını içerir. Kesikli ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçiş çizgilerini ve içi dolu daireler dinamik üçlü kritik noktayı göstermektedir. z özel noktası dinamik sıfır sıcaklığını göstermektedir. **(a)** $r = 1.0$, $\Delta_S = 0.0$, $D = 0.0$ ve $\omega = 2\pi$, **(b)** $r = 1.0$, $\Delta_S = 0.0$, $D = -2.0$ ve $\omega = 2\pi$, **(c)** $r = 1.0$, $\Delta_S = 0.0$, $D = -4.0$ ve $\omega = 2\pi$, **(d)** $r = 1.0$, $\Delta_S = 0.0$, $D = -1.0$ ve $\omega = 2\pi$ ve **(e)** $r = 0.5$, $\Delta_S = -3.0$, $D = -2.0$ ve $\omega = 2\pi$.

iii) $r = 1.0$, $\Delta_s = 0.0$, $D = -4.0$ ve $\omega = 2\pi$ parametre değerleri için elde edilen faz diyagramı Şekil 3.4(c)'de gösterilmiştir. Sistemde sadece $F_{1/2}$ ve P temel fazları bulunmuştur. Ayrıca dinamik sıfır sıcaklığı özel noktası da gözlenmiştir. $F_{1/2}$ ve P fazlarını birbirinden ayıran faz çizgisi mıknatıslanmaların tüm başlangıç değerleri için ikinci-dereceden faz geçişidir. Şekil 3.4(c)'de elde edilen fazların karşılığı şekil 3.1(c)'de salınım şeklinde de gözükmemektedir.

iv) Şekil 3.4(d) $r = 1.0$, $\Delta_s = 0.0$, $D = -1.0$ ve $\omega = 2\pi$ parametre değerleri için elde edilen dinamik faz diyagramını göstermektedir. Bu faz diyagramında, $F_{3/2}$ ve P temel fazlarının yanı sıra sistemde $F_{3/2} + P$ karma fazı ve dinamik üçlü kritik nokta da gözlenmiştir. Bu faz diyagramında $F_{3/2} + P$ karma fazı ile $F_{3/2}$ fazını ayıran faz çizgisi tüm başlangıç değerleri için birinci-dereceden faz geçiş çizgisidir. $F_{3/2} + P$ karma fazı faz diyagramında iki ayrı bölgede de gözükmemektedir. $F_{3/2}$ ve P fazlarını birbirinden ayıran faz çizgisi yüksek sıcaklık ve düşük manyetik alan genlik değerlerinde ikinci-dereceden faz geçişi iken düşük sıcaklık ve yüksek manyetik alan genliklerinde ise birinci-dereceden faz geçiş çizgisi olmaktadır. Şekil 3.4(d)'de elde edilen fazların karşılığı şekil 3.2'de salınım şeklinde de gözükmemektedir.

v) $r = 0.5$, $\Delta_s = -3.0$, $D = -2.0$ ve $\omega = 2\pi$ parametre değerleri için dinamik faz diyagramı şekil 3.4(e)'de elde edilmiştir. Bu faz diyagramında mıknatıslanmaların tüm başlangıç değerleri için sadece nm ve P temel fazları bulunmuştur. Ayrıca dinamik sıfır sıcaklığı özel noktası da gözlenmiştir. nm ve P fazlarını birbirinden ayıran faz çizgisi mıknatıslanmaların tüm başlangıç değerleri için ikinci-dereceden faz geçişidir. Şekil 3.4(e)'de elde edilen fazların karşılığı şekil 3.1(d)'de salınım şeklinde de gözükmemektedir.

3.5. Sonuç ve Özet

Bu bölümde silindirik spin-3/2 Ising nanotüp sisteminin dinamik manyetik özellikleri, sistemdeki fazların elde edilmesi, dinamik düzen parametrelerinin termal davranışı, dinamik faz geçiş noktaları ve dinamik faz diyagramları gibi, salınımlı dış manyetik alan varlığında Glauber-tipi stokastik dinamik temelli korelasyonlu EFT (DEFT) yaklaşımı kullanılarak detaylıca incelendi. r , Δ_s , D , h ve T sistem parametrelerine bağlı

olarak dinamik faz diyagramlarının $F_{3/2}$, ve $F_{1/2}$, P ve nm temel fazlarının yanında $F_{3/2} + P$ karma fazını ve ayrıca Z özel noktasını da içerdikini gördük. Sistemin ayrıca dinamik üçlü kritik nokta ve re-entrant davranış gösterdiğini gözlemledik.

Bu bölümde elde edilen sonuçlar saygın bir dergide yayımlanması için hazırlanmaktadır.

4. BÖLÜM

SONUÇ-TARTIŞMA VE ÖNERİLER

Bu tez çalışmasında, spin-3/2 Ising nanotüp sistemi ve basit kare örgü üzerinde, denge ve dengede olmayan (dinamik) durumları için termodinamik ve manyetik özellikleri kapsamlı bir şekilde incelenmiştir. Denge durumu için korelasyonlu Etkin-Alan Teorisi (EFT) kullanılarak sistemin mıknatıslanma, iç enerji, ısı sığası, alınganlık, entropi, serbest enerji, histerezis ilmeği, faz diyagramı ve telafi davranışları gibi termodinamik ve manyetik özellikleri detaylı bir şekilde incelendi. Daha sonra Glauber tipi stokastik dinamik temelli korelasyonlu Etkin-Alan Teorisi (DEFT) kullanılarak Ising nanotüp sistemi ve basit kare örgü için spin-3/2 BC modelinin dinamik davranışları kapsamlı bir şekilde incelendi.

Giriş bölümünden sonra, Bölüm 1’de silindirik spin-3/2 Ising nanotüp sisteminin denge durumundaki mıknatıslanma, iç enerji, ısı sığası, alınganlık, entropi, serbest enerji, histerezis ilmeği, faz diyagramı ve telafi davranışları gibi termodinamik ve manyetik özellikleri korelasyonlu EFT kullanılarak kapsamlıca incelendi. İlk olarak sistemin düzen parametreleri (m_{S1} , m_{S2} ve m_C mıknatıslanmaları, q_{S1} , q_{S2} ve q_C kuadrupol momentleri ve r_{S1} , r_{S2} ve r_C oktipolar momentleri) için EFT denklemleri elde edildi. Birbirlerine bağlı bu çiftlenimli denklemler numerik olarak çözüldü ve sistemin düzen parametreleri ile termodinamik ve manyetik niceliklerinin termal davranışları sistem parametrelerinin çeşitli değerleri için elde edildi. Elde ettiğimiz bu termodinamik ve manyetik niceliklerin termal davranışlarına benzer sonuçlar spin-1 Ising nanotüp [53], karma spin (1/2-1) hegzagonal Ising nanotel [74] ve karma spin (1/2, 3/2) Ising nanotüp [75] sistemlerinde de gözlenmiştir. Sistemin faz diyagramları (D , T), (Δ_s , T) ve (r , T) düzlemlerinde sunuldu. Sistemde, Hamiltonyen parametrelerine bağlı olarak birinci- ve ikinci dereceden faz geçişlerinin yanında izole kritik son nokta da (CP) gözlendi.

Sonuçlarımız gösterdi ki sistemin termodinamik ve manyetik özellikleri öz-kabuk değiş tokuş ve kabuk yüzey değiş tokuş etkileşmesinden ve kristal alandan çok güçlü bir şekilde etkilenmektedir. Sistemin fiziksel parametrelerine bağlı olarak tekli, ikili ve üçlü histerezis ilmekleri bulundu. Elde ettiğimiz histerezis davranışlarına benzer sonuçlar deneysel olarak CoFe_2O_4 nano parçacıklarda [129], $\text{La}_{2/3}\text{Sr}_{1/3}\text{MnO}_3$ nano parçacığın monte edildiği nanotüplerde [130], Mn^+ implante edilmiş Si nanotellerde [131], karbon nanotüplerde de [132, 133], karbon nanotüpler için öz-kabuk katalizör nano parçacıklar [135] ve çok katmanlı Py/Cu, CoFeB/Cu, CoNiP/Cu, FeGa/Py, ve FeGa/CoFeB nanotellerde de gözlenmiştir. Teorik olarak ta benzer sonuçlar ferroelektrik yada ferrielektrik nanotüplerde [57], Blume–Capel model silindirik Ising nanotüpte [72], silindirik transverse spin-1 Ising nanotelde [67], karma spin Ising nanoparçacıklarda [65], BaTiO_3 nanotellerin ferromanyetik davranışlarında [134] da gözlenmiştir. Telafi davranışlarının Néel sınıflandırmasına göre, sistemimiz Q-, R-, P-, N- ve S- tipi davranışları sistem parametrelerinin uygun değerleri için gösterdi. Elde edilen sonuçların deneysel ve teorik çalışmalarla ile çok iyi bir uyum içerisinde olduğu görüldü.

Bölüm 2’de kare örgü üzerinde spin-3/2 BC modelinin dinamik manyetik özellikleri sistemdeki fazların elde edilmesi, dinamik düzen parametrelerinin termal davranışı, dinamik faz geçiş noktaları ve dinamik faz diyagramları gibi, salınımlı dış manyetik alan varlığında Glauber-tipi stokastik dinamik temelli korelasyonlu EFT (DEFT) yaklaşımı kullanılarak detaylıca incelendi. Öncelikle, sistemin dinamik davranışını açıklayan etkin-alan dinamik denklemleri, kare örgü üzerinde Glauber geçiş oranları temelli korelasyonlu etkin-alan teorisi ile elde edildi. Elde edilen bu diferansiyel denklem Adams-Moulton kestirme ve düzeltme, Runge-Kutta, vb gibi nümerik yöntemlerle çözüldü ve ortalama düzen parametresinin zamana göre değişimi kapsamlıca incelenerek sistemde oluşan fazlar tespit edildi. Kristal alan değerlerine bağlı olarak dinamik faz diyagramlarının $F_{3/2}$ ve P temel fazlarının yanında $F_{3/2} + P$ karma fazını ve ayrıca Z, A, M, E, TP v QP özel noktalarını da içerdiği görüldü. Sistemde ayrıca dinamik üçlü kritik nokta ve re-entrant davranış gösterdiğini gözlemlendi. Frekansın dinamik kritik özellikleri üzerine büyük bir etkisinin olduğunu gördük. Örneğin, yüksek frekans değerlerinde faz bölgelerini ayıran çizgi ikinci-dereceden faz geçiş çizgisi oluyorken, düşük frekans değerlerinde ise bu çizgi birinci-

dereceden faz geçiş çizgisi oluyor. Sistemde mevcut olan fazlar arasındaki dinamik faz sınırlarını (kesikli veya sürekli yani birinci- veya ikinci-derece faz geçişleri) belirleyebilmek için, dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıklarını hesaplandı. DFG sıcaklıkları bir periyot başına ortalama düzen parametresinin yani dinamik mıknatıslanmanın sıcaklığın bir fonksiyonu olarak incelenmesiyle elde edildi.

Bölüm 3'te silindirik spin-3/2 Ising nanotüp sisteminin dinamik manyetik özellikleri, sistemdeki fazların elde edilmesi, dinamik düzen parametrelerinin termal davranışı, dinamik faz geçiş noktaları ve dinamik faz diyagramları gibi, salınımlı dış manyetik alan varlığında Glauber-tipi stokastik dinamik temelli korelasyonlu EFT (DEFT) yaklaşımı kullanılarak detaylıca incelendi. Öncelikle, sistemin dinamik davranışını açıklayan etkin-alan dinamik denklemleri Ising nanotüp sistemi için Glauber geçiş oranları temelli korelasyonlu etkin-alan teorisi ile elde edildi. Elde edilen bu diferansiyel denklem Adams-Moulton kestirme ve düzeltme, Runge-Kutta, vb gibi nümerik yöntemlerle çözüldü ve $m_{S1}(\xi)$, $m_{S2}(\xi)$ ve $m_C(\xi)$ ortalama düzen parametrelerinin zamana göre değişimi kapsamlıca incelenerek sistemde oluşan fazlar tespit edildi. Sistem parametrelerine bağlı olarak dinamik faz diyagramlarının $F_{3/2}$, ve $F_{1/2}$, P ve nm temel fazlarının yanında $F_{3/2} + P$ karma fazını ve ayrıca Z özel noktasını da içerdiği görüldü. Sistemin ayrıca dinamik üçlü kritik nokta ve re-entrant davranış gösterdiği gözlemlendi. Sistemde mevcut olan fazlar arasındaki dinamik faz sınırlarını (kesikli veya sürekli yani birinci- veya ikinci-derece faz geçişleri) belirleyebilmek için, dinamik faz geçiş (DFG) sıcaklıklarını hesaplandı. DFG sıcaklıkları bir periyot başına ortalama düzen parametrelerinin yani M_{S1} , M_{S2} ve M_C dinamik mıknatıslanmalarının sıcaklığın bir fonksiyonu olarak incelenmesiyle elde edildi.

Bu tez çalışmasında elde edilen sonuçların nano yapılı malzemelerin hem denge hem de dinamik durumları için termodinamik ve manyetik özelliklerinin MC ve renormalizasyon teknikleri gibi daha duyarlı ve iyi sonuç veren yöntemlerle yüksek spin değerleri için araştırmaya temel oluşturma niteliğinde olmasını ümit etmekteyiz. Ayrıca elde edilen sonuçların nano yapılı malzemelerin termodinamik ve manyetik özellikleri üzerine yapılan deneysel çalışmalara ışık tutma potansiyelinde olduğunu düşünmekteyiz. Son olarak şunu söylememiz gerekir ki, dünyanın birçok yerinde nanobilim ve nanoteknolojiye büyük yatırımlar yapılmakta, enstitüler açılmakta,

arařtırma merkezleri kurulmakta ve bu alanda büyük alıřmalar yapılmaktadır. Temennim, bu tez kapsamında yaptıđımız alıřmaların, lkemizde nanobilim ve nanoteknoloji alanında yapılan ve yapılacak olan alıřmalara katkı sađlaması ve dnyada lkemizin bu alanda iyi noktalara gelmesine etki etmesidir.

KAYNAKLAR

1. Erkoç, Ş. 2007. Nanobilim ve Nanoteknoloji, ODTÜ / Bilim ve Toplum Dizisi, 113 pp.
2. Binns C. 2010. Introduction to Nanoscience and Nanotechnology, John Wiley & Sons, 320 pp.
3. Shong, C. W., Sow, C. H., Wee, A. T. S. 2010. Science at the Nanoscale: An Introductory Textbook, 214 pp.
4. Lindsay, S. 2010, Introduction to Nanoscience, Oxford University Press, 472 pp.
5. Nouailhat, A. 2007. An Introduction to Nanoscience and Nanotechnology, John Wiley & Sons, 240 pp.
6. Wegrowe, J.E., Kelly, D., Jaccard, Y., et. al, Current-induced magnetization reversal in magnetic nanowires, **Europhysics Letters**, **45**: 626-632, 1999.
7. Fert, A., Piraux, L., Magnetic nanowire, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **200**: 338-358, 1999.
8. O'Connor, C.J., Tang, J., Zhang, H., Nanostructured magnetic materials in magnetism: Molecules to materials III: Nanosized magnetic materials, J.S. Miller, M. Drillon (Eds.), Wiley-VCH Verlag GmbH, Weinheim, 1-36, 2002.
9. Kurlyandskaya, G.V., Sanchez, M.L., Hernando, B., Prida, V.M., Gorria, P. and Tejedor, M., Giant-magnetoimpedance-based sensitive element as a model for biosensors, **Applied Physics Letters**, **82**: 3053-3055 2003.
10. H. Zeng, J. Li, J.P. Liu, Z.L. Wang, S. Sun, Exchange-coupled nanocomposite magnets by nanoparticle self-assembly, **Nature**, **420**: 395-398 2002.
11. S. Nie, S.R. Emory, Probing single molecules and single nanoparticles by surface-enhanced Raman scattering, **Science** **275**: 1102-1106 1997.
12. D.W. Elliott, W.-X. Zhang, Field Assessment of Nanoscale Bimetallic Particles for Groundwater Treatment, **Environmental Science and Technology**, **35**: 4922-4926, 2001.
13. A.P.Y. Wong, M.H.W. Chan, Liquid-Vapor Critical Point of ^4He in Aerogel, **Physical Review Letters**, **65**: 2567-2570 1990.
14. C. Alexiou, A. Schmidt, R. Klein, P. Hullin, C. Bergemann, W. Arnold, Magnetic drug targeting: biodistribution and dependency on magnetic field strength, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **252**: 363-366 2002.

15. Bourlinos, A.B., Simopoulos, A., Boukos, N., et al., Magnetic modification of the external surfaces in the MCM-41 porous Silica: Synthesis, characterization, and functionalization, **The Journal of Physical Chemistry B**, **105**: 7432-7437 2001.
16. Gross, A.F., Diehl, M.R., Beverly, K.C., et al, Controlling magnetic coupling between Cobalt nanoparticles through nanoscale confinement in hexagonal mesoporous Silica, **The Journal of Physical Chemistry B**, **107**: 5475-5482 2003.
17. Berkowitz, A.E., Kodama, R.H., Makhlof, S.A., et al, Anomalous properties of magnetic nanoparticles, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **196**: 591-594 1999.
18. Srivastava, P., Sen, P. Density functional study of structural defects in h-BNC2 sheets, **Journal of Physics: Condensed Matter**, **25**: 025304-025314 2013.
19. Azevedo, S., Rosas, A., Machado, M., Kaschny, J. R., and Chacham, H., Effects of deformation on the electronic properties of B–C–N nanotubes, **Journal of Solid State Chemistry**, **197**: 254–260 2013.
20. Jalilian, J., Zahrabi, H., Jalilian, J., Soofivand, F., Farshadfar, S., Naderizadeh, S., and Rahimi, N., Electronic and magnetic properties of Fe, Co and Ni atomic chains encapsulated in BN nanotube bundle, **Computational and Theoretical Chemistry**, **979**: 10–16 2012.
21. Bengu, E., Marks, L. D., Ovali, R. V., and Gulseren, O., Analysis of defects on BN nano-structures using high-resolution electron microscopy and density-functional calculations, **Ultramicroscopy**, **108**: 1484–1489 2008.
22. Bengu, E., Genisel, M. F., Gulseren, O., and Ovali, R. V., Theoretical and spectroscopic investigations on the structure and bonding in B–C–N thin films, **Thin Solid Films**, **518**: 1459–1464 2009.
23. Hever, A., Bernstein, J., and and Hod, O., Structural stability and electronic properties of sp³ type silicon nanotubes, **The Journal of Chemical Physics**, **137**: 214702-214708 2012.
24. Ju, S. P., Lin, K. H., and Lin, K. F., Electronic and Structural Properties of Ultrathin SiO₂ Nanowires, **The Journal of Physical Chemistry C**, **116**: 3918–3927 2012.
25. Wang, S. F., Chen, L. Y., Zhang, J. M., and Xu, K. W., Electronic and magnetic properties of single-wall GeC nanotubes filled with iron nanowires, **Superlattices and Microstructures**, **51**: 754–764 2012.

26. Leite, V.S., Figueiredo, W., Spin-glass surface disorder on the magnetic behaviour of antiferromagnetic small particles, **Physica A**, **350**: 379–392 2005.
27. Kaneyoshi, T., Phase diagrams of a nanoparticle described by the transverse Ising model, **Physica Status Solidi (b)**, **242**: 2938–2948 2005.
28. Kaneyoshi, T., Magnetizations of a nanoparticle described by the transverse Ising model, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **321**: 3430–3435 2009.
29. Kaneyoshi, T., Magnetizations of a transverse Ising nanowire, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **322**: 3410–3415 2010.
30. Kaneyoshi, T., Phase diagrams of a transverse Ising nanowire, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **322**: 3014–3018 2010.
31. Kaneyoshi, T., Magnetic properties of a cylindrical Ising nanowire (or nanotube), **Physica Status Solidi (b)**, **248**: 250–258 2010.
32. Zaim, A., Kerouad, M., Amraoui, Y.E., Magnetic properties of a ferrimagnetic core/shell nanocube Ising model: A Monte Carlo simulation study, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **321**: 1077–1083 2009.
33. Zaim, A., Kerouad, M., Monte Carlo simulation of the compensation and critical behaviors of a ferrimagnetic core/shell nanoparticle Ising model, **Physica A**, **389**: 3435–3442 2010.
34. Liu, S.Y., Soh, A.K., Hong, L., Lateral surface induced effects on ultra-thin amorphous Co nanowire, **Journal of Physics D: Applied Physics**, **42**: 215002–215008 2009.
35. Wang, B., Chen, X., Chen, G., et al., Electronic and magnetic properties of multishell Co nanowires coated with Cu, **Solid State Communications**, **129**: 25–30 2004.
36. Wang, H., Zhou, Y., Wang, E., et al., Critical point of magnetic nanostructures in the Ising model, **Chinese Physics Letters**, **39**: 85–89 2001.
37. Wang, H., Zhou, Y., Lin, D.L., et al., Phase diagram of Ising nano-particles with cubic structures, **Physica Status Solidi (b)**, **232**: 254–263 2002.
38. Konstantinova, E., Theoretical simulations of magnetic nanotubes using Monte Carlo method, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **320**: 2721–2729 2008.

39. Iglesias, O., Labarta, A., Finite-size and surface effects in maghemite nanoparticles: Monte Carlo simulations, **Physical Review B**, **63**: 184416- 184427 2001.
40. Michael, Th., Trimper, S., Wesselinova, J.M., Size and doping effects on the coercive field of ferroelectric nanoparticles: A microscopic model, **Physical Review B**, **74**: 214113-214119 2006.
41. Scheinfein, M.R., Schmidt, K.E., Heim, K.R., Magnetic order in two-dimensional arrays of nanometer-sized superparamagnets, **Physical Review Letters**, **76**: 1541-1544 1996.
42. Bakuzis, A.F., Morais, P.C., Magnetic nanoparticle systems; an Ising model approximation, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **1161**: 272–276 2004.
43. Hanafin, R., Archer, T., Sanvito, S., Magnetism of wurtzite CoO nanoclusters, **Physical Review B**, **81**: 054441-054448 2010.
44. Rego, L.G.C., Figueiredo, W., Magnetic properties of nanoparticles in the Bethe-Peierls approximation, **Physical Review B**, **64**: 144424-144431 2001.
45. Yalçın, O., Erdem, R., Övünç, S., Spin-1 model of noninteracting nanoparticles, **Acta Physica Polonica A**, **114**: 835-844 2008.
46. Leite, V.S., Figueiredo, W., Spin-glass surface disorder on the magnetic behaviour of antiferromagnetic small particles, **Physica A**, **350**: 379–392 2005.
47. Lin, D., Nunes, A.C, Majkrzak, C.F., et al., Polarized neutron study of the magnetization density distribution within a CoFe₂O₄ colloidal particle II, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **145**: 343-348 1995.
48. Morrish, A.H., Haneda, K., Magnetic structure of small NiFe₂O₄ particles, **Journal of Applied Physics**, **52**: 2496-2498 1981.
49. Kodama, R.H., Berkowitz, A.E., E.J.McNiff, Jr., Foner, S., Surface spin disorder in NiFe₂O₄ nanoparticles, **Physical Review Letters**, **77**: 394-397 1996.
50. Keskin, M., Şarlı, N., and Deviren, B. Hysteresis behaviors in a cylindrical Ising nanowire, **Solid State Communications**, **151**: 1025-103 2011.
51. Şarlı, N., and Keskin, M., Two distinct magnetic susceptibility peaks and magnetic reversal events in a cylindrical core/shell spin-1 Ising nanowire, **Solid State Communications**, **152**: 354-359 2012.

52. Şarlı, N., Band structure of the susceptibility, internal energy and specific heat in a mixed core/shell Ising nanotube, **Physica B**, **411**: 12-25 2013.
53. Canko, O., Erdiñç, A., Taşkın, F., and Atiş, M., Some characteristic behavior of spin-1 Ising nanotube, **Physics Letter A**, **375**: 3547-3551 2011.
54. Akıncı, Ü., Effects of the randomly distributed magnetic field on the phase diagrams of Ising nanowire I: Discrete distributions, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **324**: 3951–3960 2012.
55. Akıncı, Ü., Effects of the randomly distributed magnetic field on the phase diagrams of the Ising Nanowire II: Continuous distributions, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **324**: 4237–4244 2012.
56. Yüksel, Y. Aydın, E., and Polat, H., Thermal and magnetic properties of a ferrimagnetic nanoparticle with spin-3/2 core and spin-1 shell structure, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **323**: 3168-3175 2011.
57. Zaim, A., Kerouad, M., Boughrara, M., Ainane, A. and de Miguel, JJ. Theoretical Investigations of Hysteresis Loops of Ferroelectric or Ferrielectric Nanotubes with Core/Shell Morphology, **Journal of Superconductivity and Novel Magnetism**, **25**: 2407-2414 2012.
58. Liu, LM., Jiang, W., Wang, Z., Guan, HY. and Guo, AB., Magnetization and phase diagram of a cubic nanowire in the presence of the crystal field and the transverse field, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **324**: 4034-4042 2012.
59. Kaneyoshi, T., Characteristic phenomena in nanoscaled transverse Ising thin films with diluted surfaces, **Physica B-Condensed Matter**, **407**: 4358-4364 2012.
60. Yüksel, Y., Akıncı, U. and Polat, H., Investigation of bond dilution effects on the magnetic properties of a cylindrical Ising nanowire, **Physica Status Solidi b-Basic Solid State Physics**, **250**: 196-206 2013.
61. Jiang, W., Zhang, F., Li, XX., Guan, HY., Guo, AB. And Wang, Z, Surface effects on a ferrimagnetic hexagonal nanowire with single-ion anisotropis and transverse field, **Physica E-Low-Dimensional Systems & Nanostructures**, **47**: 95-102 2013.
62. Zaim, A., Kerouad, M. and Boughrara, M., Effects of the random field on the magnetic behavior of nanowires with core/shell morphology, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **331**: 37-44 2013.

63. Masrour, R., Bahmad, L., Hamedoun, M., Benyoussef, A. and Hlil, EK., The magnetic properties of a decorated Ising nanotube examined by the use of the Monte Carlo simulations, **Solid State Communications**, **162**: 53-56 2013.
64. Magoussi, H.; Zaim, A.; Kerouad, M., Effects of the random magnetic field on the hysteresis behavior of spin-1 Ising nanotube, **Journal of Optoelectronics and Advanced Materials**, **15**: 481-486 2013.
65. Kantar, E., Deviren, B. and Keskin, M., Magnetic properties of mixed Ising nanoparticles with core-shell structure, **European Physical Journal B**, **86**: 253-266 2013.
66. Jiang, W. Li, Li, XX., Liu, LM., Surface effects on a multilayer and multisublattice cubic nanowire with core/shell, **Physica E-Low-Dimensional Systems & Nanostructures**, **53**: 29-35 2013.
67. Kocakaplan, Y., Kantar, E. and Keskin, M., Hysteresis loops and compensation behavior of cylindrical transverse spin-1 Ising nanowire with the crystal field within effective-field theory based on a probability distribution technique, **European Physical Journal B**, **86**: 420-429 2013.
68. Magoussi, H., Zaim, A. and Kerouad, M., Effects of the trimodal random field on the magnetic properties of a spin-1 Ising nanotube, **Chinese Physics B**, **22**: 116401-116409 2013.
69. Kantar, E. and Kocakaplan, Y., Hexagonal type Ising nanowire with core/shell structure: The phase diagrams and compensation behaviors, **Solid State Communications**, **177**: 1-6 2014.
70. Boughazi, B., Boughrara, M. and Kerouad, M., Phase diagrams and magnetic properties of a ferrimagnetic cylindrical core/shell spin-1 Ising nanowire, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **354**: 173-177 2014.
71. Jiang, W., Li, XX., Guo, AB., Guan, HY., Wang, Z. and Wang, K, Magnetic properties and thermodynamics in a metallic nanotube, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **355**: 309-318 2014.
72. Canko, O., Taşkın, F., Arçın, K. ve Erdinç, A., Hysteresis behavior of Blume-Capel model on a cylindrical Ising nanotube, **Solid State Communications**, **183**: 35-40 2014.

73. Boughrara, M., Kerouad, M. and Zaim, A., The phase diagrams and the magnetic properties of a ferrimagnetic mixed spin 1/2 and spin 1 Ising nanowire, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **360**: 222-228 2014.
74. Kocakaplan, Y. and Kantar, E., Thermodynamic and magnetic properties of the hexagonal type Ising nanowire, **European Physical Journal B**, **87**: 135-142 2014.
75. Taşkın, F., Canko, O., Erdinç, A. and Yıldırım, A. F., Thermal and magnetic properties of a nanotube with spin-1/2 core and spin-3/2 shell structure, **Physica A-Statistical Mechanics and Its Applications**, **407**: 287-294 2014.
76. Deviren, B. and Keskin, M., Thermal behavior of dynamic magnetizations, hysteresis loop areas and correlations of a cylindrical Ising nanotube in an oscillating magnetic field within the effective-field theory and the Glauber-type stochastic dynamics approach, **Physics Letters A**, **376**: 1011-1019 2012.
77. Deviren, B., Ertaş, M., and Keskin, M., Dynamic magnetizations and dynamic phase transitions in a transverse cylindrical Ising nanowire, **Physica Scripta**, **85**: 055001-055011 2012.
78. Deviren, B., Kantar, E. and Keskin, M., Dynamic phase transitions in a cylindrical Ising nanowire under a time-dependent oscillating magnetic field, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **324**: 2163-2170 2012.
79. Yüksel, Y., Vatansever, E., Polat, H., Dynamic phase transition properties and hysteretic behavior of a ferrimagnetic core-shell nanoparticle in the presence of a time dependent magnetic field, **Journal of Physics: Condensed Matter**, **24**: 436004-436017 2012.
80. Deviren, B., Şener, Y. and Keskin, M., Dynamic magnetic properties of the kinetic cylindrical Ising nanotube, **Physica A**, **392**: 3969-3983 2013.
81. Vatansever, E. and Polat, H., Monte Carlo investigation of a spherical ferrimagnetic core-shell nanoparticle under a time dependent magnetic field, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **343**: 221-227 2013.
82. Yüksel, Y., Monte Carlo simulations of dynamic phase transitions in ultrathin Blume-Capel films, **Physics Letters A**, **377**: 2494-2504 2013.
83. Vatansever, E. and Polat, H., Non-equilibrium dynamics of a ferrimagnetic core-shell nanocubic particle, **Physica A**, **394**: 82-89, 2014.

84. Ertaş, M. and Kocakaplan, Y., Dynamic behaviors of the hexagonal Ising nanowire, **Physics Letters A**, **378**: 845-850 2014.
85. Kantar, E., Ertaş, M. and Keskin, M., Dynamic phase diagrams of a cylindrical Ising nanowire in the presence of a time dependent magnetic field, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **361**: 61-67 2014.
86. Wang, CD., Lu, ZZ., Yuan, WX., Kwok, SY. and Teng, BH, Dynamic properties of phase diagram in cylindrical ferroelectric nanotubes, **Physics Letters A**, **375**: 3405-3409 2011.
87. Cooke, A. H., Martin, D. M., and Wells, M. R., The Specific heat of Dysprosium Vanadate, **Solid State Communications**, **8**: 689-692 1970.
88. Cooke, A. H., Martin, D. M. And Wells, M. R., Magnetic and Thermal Properties of Dyprosium vanadate, **Journal of Physics Colloquium (Paris)**, **32**: C1 488-489 1971.
89. Will, G. And Schafer, W., The Magnetic Structure of Antiferromagnetic DyVO₄, **Journal of Physics C: Solid State Physics**, **4**: 811-819 1971.
90. Sayetat, F., Boucherle, J. X., Belakhovsky, M., Kallel, A., Tcheou, F. And Fuess, H., Experimental Study of Magnetic and Crystallographic Transition in DyVO₄, **Physics Letters A**, **34**: 361-362 1971.
91. Sieger, M., Kasten, A., and paul, W., Ferrimagnetic Phase in the Metamagnet DyVO₄, **Solid State Communications**, **53**: 909-913 1985.
92. Sivardiére, J., Magnetism in S=3/2 Ising Systems: Magnetizations Jumps and Reorientations, Heat Magnetization and Tricritical Points, **Physica Status Solidi (b)**, **76**: 77-83 1976.
93. Sivardiére, J., Magnetism in S=3/2 Ising Systems: A Simple Model for a Tetracritical Point, **Physica Status Solidi (b)**, **114**: K15-K19 1982.
94. Sivardiére, J., and Blume, M. Dipolar and Quadrupolar Ordering in Spin S=3/2 Ising Systems, **Physical Review B**, **5**: 1126-1134 1972.
95. Sivardiére, J., Berker, A. N., Wortis, M., Uniaxial and Biaxial Quadrupolar Ordering in Magnetic Crystals: Moleculer Field Theory, **Physical Review B**, **7**: 343-351 1973.
96. Krinsky, S., and Mukamel, D. Spin-3/2 Ising Model for Tricritical Points in Ternary Fluid Mixtures, **Physical Review B**, **11**: 399-410 1975.

97. Scheffler, M., Bernholc, J., Lipari, N. O. and Pantelides, S.T., Electronic structure and identification of deep defects in GaP, **Physical Review B**, **29**: 3269-3282 1984.
98. Sowa, E. C., and Falicov, L. M., Many-body small-cluster theory of bcc Fe, Co, and the Fe-Co alloy, **Physical Review B**, **37**: 8707-8712 1988.
99. LaGraffe, D., and Dowben, P. A., Magnetic ordering of thin Gd overlayers, **Physical Review B**, **40**: 970-976 1989.
100. Irwin, G. M., and Sanford, E. R., Spin-relaxation model for the Mossbauer spectra of $\text{BaSn}_x\text{Ti}_{22-x}\text{Fe}_4\text{O}_{11}$: A ferric oxide spin glass, **Physical Review B**, **44**: 4423-4430 1991.
101. Lewandowski, A. C. and Wilson, T. M., Ab initio multiconfiguration self-consistent-field calculations of the excited states of a Mn impurity in CaF_2 , **Physical Review B**, **50**: 2780-2791 1994.
102. Stoddard, R. D., Conradi, M. S., and McDowell, A. F., Atomic motions in an unusual molecular semiconductor: NaSn , **Physical Review B**, **52**: 13998-14005 1995.
103. Khalifah, P., Erwin, R. W., Lynn, J. W., Huang, Q., Batlogg, B. and Cava, R. J., Magnetic and electronic characterization of quasi-one-dimensional La_3RuO_7 , **Physical Review B**, **60**: 9573-9578, 1999.
104. Horváth, D., Orendáčová, A., Orendáč, M., Jaščur, M., Brutovský, B. and Feher, A., $\text{KEr}(\text{MoO}_4)_2$: A quasi-one-dimensional $S=3/2$ Blume-Capel system, **Physical Review B**, **60**: 1167-1173 1999.
105. Kaneyoshi, T. and Jaščur, M., Critical Concentration of a Diluted Spin-3/2 Ising Ferromagnet. **Physica Status Solidi (b)**, **173**: K37–K42 1992.
106. Kaneyoshi, T. and Benyoussef, A., Correlated Effective-Field Treatment of the Blume-Capel Model with Half-Integer Spins, **Physica Status Solidi (b)**, **178**: 233-246 1993.
107. Keskin, M., et. al., Multicritical Phase Diagrams of the Antiferromagnetic Spin-3/2 Blume-Capel Model, **Physics Letters A**, **353**: 116–120 2006.
108. Albayrak, E., Keskin, M., The Spin-3/2 Blume-Capel Model on the Bethe Lattice Using the Recursion Method, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **218**: 121-127 2000.

109. Özsoy, O., Albayrak, E., Keskin, M., Statistical Mechanics of the Spin-3/2 Blume–Capel Model on the Bethe Lattice Using the Recursion Method, **Physica A**, **304**: 443-460 2002.
110. Ekiz, C., Albayrak, E., Keskin, M., Multicritical Phase Diagrams of the Spin-3/2 Blume-Emery-Griffiths Model on the Bethe Lattice Using the Recursion Method, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **256**: 311-321 2003.
111. Canko, O., Deviren, B., Keskin, M., Dynamic Phase Transition in the Spin-3/2 Blume-Emery-Griffith Model in an Oscillating Field, *Journal of Physics: Condensed Matter*, **18**: 6635-6653, 2006.
112. Keskin, M., Canko, O., Multicritical Behavior of the Antiferromagnetic Spin-3/2 Blume–Emery–Griffiths Model with Repulsive Biquadratic Coupling Including Metastable Phases: The Cluster Variation Method and the Path Probability Method with Point Distribution, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **320**: 8-24 2008.
113. Keskin, M., Canko, O., Deviren, B., Dynamic Phase Transition in the Kinetic Spin-3/2 Blume-Capel Model Under a Time-Dependent Oscillating External, **Physical Review E**, **74**: 011110-1-011120 2006.
114. Xue, F., Weber, D. P., Peddibhotla, P., and Poggio, M., Measurement of statistical nuclear spin polarization in a nanoscale GaAs sample, **Physical Review B**, **84**: 205328 –205336 2011.
115. Tomiyasu, K., Ueda, H., Matsuda, M., Yokoyama, M., Iwasa, K., and Yamada, K., Molecular spin-liquid state in the spin-3/2 frustrated spinel HgCr₂O₄, **Physical Review B**, **84**: 035115 – 035120 2011.
116. Okuda, T., Oozono, S., Kihara, T., and Tokunaga, M. Thermal Transport and Magnetotransport Properties of CuCr_{1-x}Mg_xO₂ with a Spin-3/2 Antiferromagnetic Triangular Lattice, **Journal of the Physical Society of Japan**, **82**: 014706-014803 2013.
117. Romhányi, J., Penc, K. Multiboson spin-wave theory for Ba₂CoGe₂O₇: A spin-3/2 easy-plane Neel antiferromagnet with strong single-ion anisotropy, **Physical Review B**, **86**: 174428-174437 2012.
118. Honmura, R., Kaneyoshi, T., Contribution to the new type of effective field theory of the Ising Model, **Journal of Physics C: Solid State Physics**, **12**: 3979-3992, 1979.

119. Callen, H.B., A note on Green functions and the Ising model, **Physics Letters**, **4**: 161-164 1963.
120. Zernike, F., the propagation of order in Co-Operative phenomena: part I. the AB case. **Physica** **7**: 565-585 1940.
121. Kaneyoshi, T., Fittipaldi, I.P., Honmura, R., Manabe, T., New correlated-effective-field theory in the Ising model, **Physical Review B**, **24**: 481-484 1981.
122. Kaneyoshi, T., Beyer, H., Amorphization of layered ferro- and antiferromagnetic systems, **Journal Physics Society Japan**, **49**: 1306-1317, 1980.
123. Kaneyoshi, T., et al., Amorphization of a crystalline diluted Ising ferromagnet, **Physical Review B**, **29**: 5121-5127 1984.
124. Kaneyoshi, T., Tamura, I., Sarmiento, E.F.. Surface magnetic properties of the Ising model with a diluted free surface. **Physical Review B**, **28**: 6491-6498 1983.
125. Kaneyoshi, T., Critical temperatures and the compensation temperatures of disordered and amorphous ferrimagnetic Ising systems. **Physical Review B**, **33**: 7688-7699 1986.
126. Waerden, B., L., V., Beweis einer baudetschen vermutung, **Nieuw Arch Wisk**, **15**: 212-216 1927.
127. Kocakaplan, Y. and Kantar, E., An effective-field theory study of hexagonal Ising nanowire: Thermal and magnetic properties, **Chinese Physics B**, **23**: 046801-046808 2014.
128. Kantar, E. Keskin, M. Thermal and magnetic properties of ternary mixed Ising nanoparticles with core-shell structure: Effective-field theory approach, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **349**: 165-172 2014.
129. Esir S., Topkaya R., Baykal A., Akman Ö., Toprak M. S., Magnetic properties of annealed CoFe₂O₄ nanoparticles synthesized by the PEG- assisted route, **Journal of Inorganic and Organometallic Polymers and Materials**, **24**: 424-430 2014.
130. Curiale J., Sanchez R.D., Troiani H.E., Leyva A.G., Levy P., Room-temperature ferromagnetism in La_{2/3}Sr_{1/3}MnO₃ nanoparticle assembled nanotubes, **Applied Physics Letters**, **87**: 043113-043116 2005.
131. Wu H.W., Tsai C.J., Chen L.J., Room temperature ferromagnetism in Mn⁺-implanted Si nanowires, **Applied Physics Letters**, **90**: 043121-043124 2007.

132. Peng D.L., Zhao X., Inoue S., Ando Y., Sumiyama K., Magnetic properties of Fe clusters adhering to single-wall carbon nanotubes, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **292**: 143-149 2005.
133. Garcia J.A., Bertran E., Elbaile L., Garcia-Cespedes J., Svalov A., Magnetic behaviour of non-contacting Ni nanoparticles encapsulated in vertically aligned carbon nanotubes, **Physica Status Solidi (c)**, **7**: 2679-2682 2010.
134. Hong J., Fang D., Size-dependent ferroelectric behaviors of BaTiO₃ nanowires, **Applied Physics Letters**, **92**: 012906-012909 2008.
135. Fleaca C.T., Morjan I., Alexandrescu R., Dumitrache F., Soare I., Gavrila-Florescu L., et al., Magnetic properties of core-shell catalyst nanoparticles for carbon nanotube growth, **Applied Surface Science**, **255**: 5386-5390 2009.
136. Lupu, N., Lostun, M., Chiriac, H., Surface magnetization processes in soft magnetic nanowires, **Journal of Applied Physics**, **107**: 09E315-09E318 2010.
137. Yang F. Y., Shang C. H., Chien C. L., Ambrose T., Krebs J. J., Prinz G. A., et al., Multistep magnetic switching in single-crystal (001)Co₂MnGe films, **Physical Review B**, **65**: 174410-174418 2002.
138. K. Dumesnil, C. Dufour, and Ph. Mangin, Magnetic springs in exchange-coupled DyFe₂/YFe₂ superlattices: An element-selective x-ray magnetic circular dichroism study, **Physical Review B**, **65**: 094401-094405 2002.
139. Jiang W., Lo V.C., Bai B.D., Yang J., Magnetic hysteresis loops in molecular-based magnetic materials AFe^{II}Fe^{III}(C₂O₄)₃, **Physica A**, **389**: 2227-2233 2010.
140. Bukharov A.A., Ovchinnikov A.S., Baranov N.V., Inoue K., Magnetic hysteresis and domain wall dynamics in single chain magnets with antiferromagnetic interchain coupling, **Journal of Physics: Condensed Matter**, **22**: 436003-436012 2010.
141. Néel L., **Annalen der Physik**, **3**: 137 1948.
142. Mansiripur, M., Magnetization Reversal, Coercivity, and the process of thermomagnetic recording in thin films of amorphous rare earth-transition metal alloys. **Journal Applied Physics**, **61**: 1580-1587 1987.
143. Mathoniere, C., Nuttall, C.J., Carling, S.G., Day, P., Ferrimagnetic mixed-valency and mixed-metal Tris(oxalato)iron(III) compounds: synthesis, structure, and magnetism. **Inorganic Chemistry**, **35**: 1201-1206 1996.

144. Hernando, A., Kulik, T., Exchange interactions through amorphous paramagnetic layers in ferromagnetic nanocrystals. **Physical Review B**, **49**: 7064-7067 1994.
145. Alex, M., Shono, K., Kuroda, S., Koshino, N., Ogawa, S., Ce-Substituted garnet media for magneto-optic recording. **Journal Applied Physics**, **67**: 4432-4434 1990.
146. J. Strečka, Exact results of a mixed spin-1/2 and spin-S Ising model on a bathroom tile (4–8) lattice: Effect of uniaxial single-ion anisotropy, **Physica A**, **360**: 379-390 2006.
147. Kocakaplan, Y. and Keskin, M, Hysteresis and compensation behaviors of spin-3/2 cylindrical Ising nanotube system, **Journal of Applied Physics**, **116**: 093904-093912 2014.
148. Blume, M., Theory of the First-Order Magnetic Phase Change in UO₂., **Physical Review Letters**, **141**: 517-524 1966.
149. Capel, H.W., On the possibility of first-order phase transitions in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting, **Physica**, **32**: 966-988 1966.
150. Capel, H.W., On the possibility of first-order phase transitions in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting, **Physica**, **37**: 423-441 1967.
151. Hoston W., Berker A.N., Multicritical phase diagrams of the Blume-Emery-Griffiths model with repulsive biquadratic coupling, **Physical Review Letters**, **67**: 1027-1030 1991.
152. A. Bakchich, M. El. Bouziani, Surface critical behavior of the semi-infinite Blume-Emery-Griffiths model, **Physical Review B**, **56**: 11161-11168 1997.
153. Ertaş, M., Kocakaplan, Y. and Keskin, M., Effective-field theory for dynamic phase diagrams of the kinetic spin-3/2 Blume–Capel model under a time oscillating longitudinal field, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **348**: 113–119 2013.

EKLER

EK-1

Bölüm 1’de (1.4) ve Bölüm 3’te (3.16) denklemlerinin sağ tarafında yer alan F_{ms_1} , F_{ms_2} ve F_{mc} fonksiyonlarının en açık halleri aşağıdaki gibidir.

$$\begin{aligned}
 F_{ms_1} = & b_0 + b_1 * mc + b_2 * mc^2 + b_3 * mc^3 + b_4 * ms_1 + b_5 * mc * ms_1 + b_6 * mc^2 * ms_1 + b_7 * mc^3 * \\
 & ms_1 + b_8 * ms_1^2 + b_9 * mc * ms_1^2 + b_{10} * mc^2 * ms_1^2 + b_{11} * mc^3 * ms_1^2 + b_{12} * ms_1^3 + b_{13} * \\
 & mc * ms_1^3 + b_{14} * mc^2 * ms_1^3 + b_{15} * mc^3 * ms_1^3 + b_{16} * ms_1^4 + b_{17} * mc * ms_1^4 + b_{18} * \\
 & mc^2 * ms_1^4 + b_{19} * mc^3 * ms_1^4 + b_{20} * ms_1^5 + b_{21} * mc * ms_1^5 + b_{22} * mc^2 * ms_1^5 + b_{23} * \\
 & mc^3 * ms_1^5 + b_{24} * ms_1^6 + b_{25} * mc * ms_1^6 + b_{26} * mc^2 * ms_1^6 + b_{27} * mc^3 * ms_1^6 + b_{28} * \\
 & ms_2 + b_{29} * mc * ms_2 + b_{30} * mc^2 * ms_2 + b_{31} * mc^3 * ms_2 + b_{32} * ms_1 * ms_2 + b_{33} * mc * ms_1 \\
 & * ms_2 + b_{34} * mc^2 * ms_1 * ms_2 + b_{35} * mc^3 * ms_1 * ms_2 + b_{36} * ms_1^2 * ms_2 + b_{37} * mc * ms_1^2 * \\
 & ms_2 + b_{38} * mc^2 * ms_1^2 * ms_2 + b_{39} * mc^3 * ms_1^2 * ms_2 + b_{40} * ms_1^3 * ms_2 + b_{41} * mc * ms_1 \\
 & ^3 * ms_2 + b_{42} * mc^2 * ms_1^3 * ms_2 + b_{43} * mc^3 * ms_1^3 * ms_2 + b_{44} * ms_1^4 * ms_2 + b_{45} * mc * \\
 & ms_1^4 * ms_2 + b_{46} * mc^2 * ms_1^4 * ms_2 + b_{47} * mc^3 * ms_1^4 * ms_2 + b_{48} * ms_1^5 * ms_2 + b_{49} * \\
 & mc * ms_1^5 * ms_2 + b_{50} * mc^2 * ms_1^5 * ms_2 + b_{51} * mc^3 * ms_1^5 * ms_2 + b_{52} * ms_1^6 * ms_2 + b_{53} * \\
 & mc * ms_1^6 * ms_2 + b_{54} * mc^2 * ms_1^6 * ms_2 + b_{55} * mc^3 * ms_1^6 * ms_2 + b_{56} * ms_2^2 + b_{57} * \\
 & mc * ms_2^2 + b_{58} * mc^2 * ms_2^2 + b_{59} * mc^3 * ms_2^2 + b_{60} * ms_1 * ms_2^2 + b_{61} * mc * ms_1 * m \\
 & s_2^2 + b_{62} * mc^2 * ms_1 * ms_2^2 + b_{63} * mc^3 * ms_1 * ms_2^2 + b_{64} * ms_1^2 * ms_2^2 + b_{65} * mc * m \\
 & s_1^2 * ms_2^2 + b_{66} * mc^2 * ms_1^2 * ms_2^2 + b_{67} * mc^3 * ms_1^2 * ms_2^2 + b_{68} * ms_1^3 * ms_2^2 \\
 & + b_{69} * mc * ms_1^3 * ms_2^2 + b_{70} * mc^2 * ms_1^3 * ms_2^2 + b_{71} * mc^3 * ms_1^3 * ms_2^2 + b_{72} * m \\
 & s_1^4 * ms_2^2 + b_{73} * mc * ms_1^4 * ms_2^2 + b_{74} * mc^2 * ms_1^4 * ms_2^2 + b_{75} * mc^3 * ms_1^4 * m \\
 & s_2^2 + b_{76} * ms_1^5 * ms_2^2 + b_{77} * mc * ms_1^5 * ms_2^2 + b_{78} * mc^2 * ms_1^5 * ms_2^2 + b_{79} * mc \\
 & ^3 * ms_1^5 * ms_2^2 + b_{80} * ms_1^6 * ms_2^2 + b_{81} * mc * ms_1^6 * ms_2^2 + b_{82} * mc^2 * ms_1^6 * ms \\
 & 2^2 + b_{83} * mc^3 * ms_1^6 * ms_2^2 + b_{84} * ms_2^3 + b_{85} * mc * ms_2^3 + b_{86} * mc^2 * ms_2^3 + b_{87} * \\
 & mc^3 * ms_2^3 + b_{88} * ms_1 * ms_2^3 + b_{89} * mc * ms_1 * ms_2^3 + b_{90} * mc^2 * ms_1 * ms_2^3 + b_{91} * m \\
 & c^3 * ms_1 * ms_2^3 + b_{92} * ms_1^2 * ms_2^3 + b_{93} * mc * ms_1^2 * ms_2^3 + b_{94} * mc^2 * ms_1^2 * ms_2 \\
 & ^3 + b_{95} * mc^3 * ms_1^2 * ms_2^3 + b_{96} * ms_1^3 * ms_2^3 + b_{97} * mc * ms_1^3 * ms_2^3 + b_{98} * mc^2 \\
 & * ms_1^3 * ms_2^3 + b_{99} * mc^3 * ms_1^3 * ms_2^3 + b_{100} * ms_1^4 * ms_2^3 + b_{101} * mc * ms_1^4 * ms \\
 & 2^3 + b_{102} * mc^2 * ms_1^4 * ms_2^3 + b_{103} * mc^3 * ms_1^4 * ms_2^3 + b_{104} * ms_1^5 * ms_2^3 + b_{105} * \\
 & mc * ms_1^5 * ms_2^3 + b_{106} * mc^2 * ms_1^5 * ms_2^3 + b_{107} * mc^3 * ms_1^5 * ms_2^3 + b_{108} * m \\
 & s_1^6 * ms_2^3 + b_{109} * mc * ms_1^6 * ms_2^3 + b_{110} * mc^2 * ms_1^6 * ms_2^3 + b_{111} * mc^3 * ms_1^6 \\
 & * ms_2^3 + b_{112} * ms_2^4 + b_{113} * mc * ms_2^4 + b_{114} * mc^2 * ms_2^4 + b_{115} * mc^3 * ms_2^4 + b_{116} * \\
 & ms_1 * ms_2^4 + b_{117} * mc * ms_1 * ms_2^4 + b_{118} * mc^2 * ms_1 * ms_2^4 + b_{119} * mc^3 * ms_1 * ms \\
 & 2^4 + b_{120} * ms_1^2 * ms_2^4 + b_{121} * mc * ms_1^2 * ms_2^4 + b_{122} * mc^2 * ms_1^2 * ms_2^4 + b_{123} * \\
 & mc^3 * ms_1^2 * ms_2^4 + b_{124} * ms_1^3 * ms_2^4 + b_{125} * mc * ms_1^3 * ms_2^4 + b_{126} * mc^2 * ms_1 \\
 & ^3 * ms_2^4 + b_{127} * mc^3 * ms_1^3 * ms_2^4 + b_{128} * ms_1^4 * ms_2^4 + b_{129} * mc * ms_1^4 * ms_2^4 \\
 & + b_{130} * mc^2 * ms_1^4 * ms_2^4 + b_{131} * mc^3 * ms_1^4 * ms_2^4 + b_{132} * ms_1^5 * ms_2^4 + b_{133} * \\
 & mc * ms_1^5 * ms_2^4 + b_{134} * mc^2 * ms_1^5 * ms_2^4 + b_{135} * mc^3 * ms_1^5 * ms_2^4 + b_{136} * ms_1 \\
 & ^6 * ms_2^4 + b_{137} * mc * ms_1^6 * ms_2^4 + b_{138} * mc^2 * ms_1^6 * ms_2^4 + b_{139} * mc^3 * ms_1^6 * \\
 & ms_2^4 + b_{140} * ms_2^5 + b_{141} * mc * ms_2^5 + b_{142} * mc^2 * ms_2^5 + b_{143} * mc^3 * ms_2^5 + b_{144} \\
 & * ms_1 * ms_2^5 + b_{145} * mc * ms_1 * ms_2^5 + b_{146} * mc^2 * ms_1 * ms_2^5 + b_{147} * mc^3 * ms_1 * ms_2 \\
 & ^5 + b_{148} * ms_1^2 * ms_2^5 + b_{149} * mc * ms_1^2 * ms_2^5 + b_{150} * mc^2 * ms_1^2 * ms_2^5 + b_{151} * m \\
 & c^3 * ms_1^2 * ms_2^5 + b_{152} * ms_1^3 * ms_2^5 + b_{153} * mc * ms_1^3 * ms_2^5 + b_{154} * mc^2 * ms_1^3
 \end{aligned}$$

$*ms2^5+b155*mc^3*ms1^3*ms2^5+b156*ms1^4*ms2^5+b157*mc*ms1^4*ms2^5+b$
 $158*mc^2*ms1^4*ms2^5+b159*mc^3*ms1^4*ms2^5+b160*ms1^5*ms2^5+b161*mc$
 $*ms1^5*ms2^5+b162*mc^2*ms1^5*ms2^5+b163*mc^3*ms1^5*ms2^5+b164*ms1^6$
 $*ms2^5+b165*mc*ms1^6*ms2^5+b166*mc^2*ms1^6*ms2^5+b167*mc^3*ms1^6*ms$
 $2^5+b168*ms2^6+b169*mc*ms2^6+b170*mc^2*ms2^6+b171*mc^3*ms2^6+b172*m$
 $s1*ms2^6+b173*mc*ms1*ms2^6+b174*mc^2*ms1*ms2^6+b175*mc^3*ms1*ms2^6+$
 $b176*ms1^2*ms2^6+b177*mc*ms1^2*ms2^6+b178*mc^2*ms1^2*ms2^6+b179*mc^$
 $3*ms1^2*ms2^6+b180*ms1^3*ms2^6+b181*mc*ms1^3*ms2^6+b182*mc^2*ms1^3*$
 $ms2^6+b183*mc^3*ms1^3*ms2^6+b184*ms1^4*ms2^6+b185*mc*ms1^4*ms2^6+b1$
 $86*mc^2*ms1^4*ms2^6+b187*mc^3*ms1^4*ms2^6+b188*ms1^5*ms2^6+b189*mc*$
 $ms1^5*ms2^6+b190*mc^2*ms1^5*ms2^6+b191*mc^3*ms1^5*ms2^6+b192*ms1^6*$
 $ms2^6+b193*mc*ms1^6*ms2^6+b194*mc^2*ms1^6*ms2^6+b195*mc^3*ms1^6*ms2$
 6

$F_{ms_2} = c0+c1*mc+c2*mc^2+c3*mc^3+c4*mc^4+c5*mc^5+c6*mc^6+c7*ms1+c8*mc*$
 $ms1+c9*mc^2*ms1+c10*mc^3*ms1+c11*mc^4*ms1+c12*mc^5*ms1+c13*mc^6*ms1$
 $+c14*ms1^2+c15*mc*ms1^2+c16*mc^2*ms1^2+c17*mc^3*ms1^2+c18*mc^4*ms1^$
 $2+c19*mc^5*ms1^2+c20*mc^6*ms1^2+c21*ms1^3+c22*mc*ms1^3+c23*mc^2*ms1$
 $^3+c24*mc^3*ms1^3+c25*mc^4*ms1^3+c26*mc^5*ms1^3+c27*mc^6*ms1^3+c28*$
 $ms1^4+c29*mc*ms1^4+c30*mc^2*ms1^4+c31*mc^3*ms1^4+c32*mc^4*ms1^4+c33$
 $*mc^5*ms1^4+c34*mc^6*ms1^4+c35*ms1^5+c36*mc*ms1^5+c37*mc^2*ms1^5+c3$
 $8*mc^3*ms1^5+c39*mc^4*ms1^5+c40*mc^5*ms1^5+c41*mc^6*ms1^5+c42*ms1^6$
 $+c43*mc*ms1^6+c44*mc^2*ms1^6+c45*mc^3*ms1^6+c46*mc^4*ms1^6+c47*mc^5$
 $*ms1^6+c48*mc^6*ms1^6+c49*ms2+c50*mc*ms2+c51*mc^2*ms2+c52*mc^3*ms2+$
 $c53*mc^4*ms2+c54*mc^5*ms2+c55*mc^6*ms2+c56*ms1*ms2+c57*mc*ms1*ms2+c$
 $58*mc^2*ms1*ms2+c59*mc^3*ms1*ms2+c60*mc^4*ms1*ms2+c61*mc^5*ms1*ms2$
 $+c62*mc^6*ms1*ms2+c63*ms1^2*ms2+c64*mc*ms1^2*ms2+c65*mc^2*ms1^2*ms2$
 $+c66*mc^3*ms1^2*ms2+c67*mc^4*ms1^2*ms2+c68*mc^5*ms1^2*ms2+c69*mc^6*$
 $ms1^2*ms2+c70*ms1^3*ms2+c71*mc*ms1^3*ms2+c72*mc^2*ms1^3*ms2+c73*mc^$
 $3*ms1^3*ms2+c74*mc^4*ms1^3*ms2+c75*mc^5*ms1^3*ms2+c76*mc^6*ms1^3*ms$
 $2+c77*ms1^4*ms2+c78*mc*ms1^4*ms2+c79*mc^2*ms1^4*ms2+c80*mc^3*ms1^4*$
 $ms2+c81*mc^4*ms1^4*ms2+c82*mc^5*ms1^4*ms2+c83*mc^6*ms1^4*ms2+c84*ms$
 $1^5*ms2+c85*mc*ms1^5*ms2+c86*mc^2*ms1^5*ms2+c87*mc^3*ms1^5*ms2+c88*$
 $mc^4*ms1^5*ms2+c89*mc^5*ms1^5*ms2+c90*mc^6*ms1^5*ms2+c91*ms1^6*ms2+$
 $c92*mc*ms1^6*ms2+c93*mc^2*ms1^6*ms2+c94*mc^3*ms1^6*ms2+c95*mc^4*ms1$
 $^6*ms2+c96*mc^5*ms1^6*ms2+c97*mc^6*ms1^6*ms2+c98*ms2^2+c99*mc*ms2^2$
 $+c100*mc^2*ms2^2+c101*mc^3*ms2^2+c102*mc^4*ms2^2+c103*mc^5*ms2^2+c10$
 $4*mc^6*ms2^2+c105*ms1*ms2^2+c106*mc*ms1*ms2^2+c107*mc^2*ms1*ms2^2+c$
 $108*mc^3*ms1*ms2^2+c109*mc^4*ms1*ms2^2+c110*mc^5*ms1*ms2^2+c111*mc^$
 $6*ms1*ms2^2+c112*ms1^2*ms2^2+c113*mc*ms1^2*ms2^2+c114*mc^2*ms1^2*ms$
 $2^2+c115*mc^3*ms1^2*ms2^2+c116*mc^4*ms1^2*ms2^2+c117*mc^5*ms1^2*ms2^$
 $2+c118*mc^6*ms1^2*ms2^2+c119*ms1^3*ms2^2+c120*mc*ms1^3*ms2^2+c121*mc$
 $^2*ms1^3*ms2^2+c122*mc^3*ms1^3*ms2^2+c123*mc^4*ms1^3*ms2^2+c124*mc^5$
 $*ms1^3*ms2^2+c125*mc^6*ms1^3*ms2^2+c126*ms1^4*ms2^2+c127*mc*ms1^4*m$
 $s2^2+c128*mc^2*ms1^4*ms2^2+c129*mc^3*ms1^4*ms2^2+c130*mc^4*ms1^4*ms2$
 $^2+c131*mc^5*ms1^4*ms2^2+c132*mc^6*ms1^4*ms2^2+c133*ms1^5*ms2^2+c134$
 $*mc*ms1^5*ms2^2+c135*mc^2*ms1^5*ms2^2+c136*mc^3*ms1^5*ms2^2+c137*mc$
 $^4*ms1^5*ms2^2+c138*mc^5*ms1^5*ms2^2+c139*mc^6*ms1^5*ms2^2+c140*ms1^$

$6*ms^2+c141*mc*ms^6*ms^2+c142*mc^2*ms^6*ms^2+c143*mc^3*ms^6*ms^2+c144*mc^4*ms^6*ms^2+c145*mc^5*ms^6*ms^2+c146*mc^6*ms^6*ms^2+c147*ms^2^3+c148*mc*ms^2^3+c149*mc^2*ms^2^3+c150*mc^3*ms^2^3+c151*mc^4*ms^2^3+c152*mc^5*ms^2^3+c153*mc^6*ms^2^3+c154*ms^1*ms^2^3+c155*mc*ms^1*ms^2^3+c156*mc^2*ms^1*ms^2^3+c157*mc^3*ms^1*ms^2^3+c158*mc^4*ms^1*ms^2^3+c159*mc^5*ms^1*ms^2^3+c160*mc^6*ms^1*ms^2^3+c161*ms^1^2*ms^2^3+c162*mc*ms^1^2*ms^2^3+c163*mc^2*ms^1^2*ms^2^3+c164*mc^3*ms^1^2*ms^2^3+c165*mc^4*ms^1^2*ms^2^3+c166*mc^5*ms^1^2*ms^2^3+c167*mc^6*ms^1^2*ms^2^3+c168*ms^1^3*ms^2^3+c169*mc*ms^1^3*ms^2^3+c170*mc^2*ms^1^3*ms^2^3+c171*mc^3*ms^1^3*ms^2^3+c172*mc^4*ms^1^3*ms^2^3+c173*mc^5*ms^1^3*ms^2^3+c174*mc^6*ms^1^3*ms^2^3+c175*ms^1^4*ms^2^3+c176*mc*ms^1^4*ms^2^3+c177*mc^2*ms^1^4*ms^2^3+c178*mc^3*ms^1^4*ms^2^3+c179*mc^4*ms^1^4*ms^2^3+c180*mc^5*ms^1^4*ms^2^3+c181*mc^6*ms^1^4*ms^2^3+c182*ms^1^5*ms^2^3+c183*mc*ms^1^5*ms^2^3+c184*mc^2*ms^1^5*ms^2^3+c185*mc^3*ms^1^5*ms^2^3+c186*mc^4*ms^1^5*ms^2^3+c187*mc^5*ms^1^5*ms^2^3+c188*mc^6*ms^1^5*ms^2^3+c189*ms^1^6*ms^2^3+c190*mc*ms^1^6*ms^2^3+c191*mc^2*ms^1^6*ms^2^3+c192*mc^3*ms^1^6*ms^2^3+c193*mc^4*ms^1^6*ms^2^3+c194*mc^5*ms^1^6*ms^2^3+c195*mc^6*ms^1^6*ms^2^3+c196*ms^2^4+c197*mc*ms^2^4+c198*mc^2*ms^2^4+c199*mc^3*ms^2^4+c200*mc^4*ms^2^4+c201*mc^5*ms^2^4+c202*mc^6*ms^2^4+c203*ms^1*ms^2^4+c204*mc*ms^1*ms^2^4+c205*mc^2*ms^1*ms^2^4+c206*mc^3*ms^1*ms^2^4+c207*mc^4*ms^1*ms^2^4+c208*mc^5*ms^1*ms^2^4+c209*mc^6*ms^1*ms^2^4+c210*ms^1^2*ms^2^4+c211*mc*ms^1^2*ms^2^4+c212*mc^2*ms^1^2*ms^2^4+c213*mc^3*ms^1^2*ms^2^4+c214*mc^4*ms^1^2*ms^2^4+c215*mc^5*ms^1^2*ms^2^4+c216*mc^6*ms^1^2*ms^2^4+c217*ms^1^3*ms^2^4+c218*mc*ms^1^3*ms^2^4+c219*mc^2*ms^1^3*ms^2^4+c220*mc^3*ms^1^3*ms^2^4+c221*mc^4*ms^1^3*ms^2^4+c222*mc^5*ms^1^3*ms^2^4+c223*mc^6*ms^1^3*ms^2^4+c224*ms^1^4*ms^2^4+c225*mc*ms^1^4*ms^2^4+c226*mc^2*ms^1^4*ms^2^4+c227*mc^3*ms^1^4*ms^2^4+c228*mc^4*ms^1^4*ms^2^4+c229*mc^5*ms^1^4*ms^2^4+c230*mc^6*ms^1^4*ms^2^4+c231*ms^1^5*ms^2^4+c232*mc*ms^1^5*ms^2^4+c233*mc^2*ms^1^5*ms^2^4+c234*mc^3*ms^1^5*ms^2^4+c235*mc^4*ms^1^5*ms^2^4+c236*mc^5*ms^1^5*ms^2^4+c237*mc^6*ms^1^5*ms^2^4+c238*ms^1^6*ms^2^4+c239*mc*ms^1^6*ms^2^4+c240*mc^2*ms^1^6*ms^2^4+c241*mc^3*ms^1^6*ms^2^4+c242*mc^4*ms^1^6*ms^2^4+c243*mc^5*ms^1^6*ms^2^4+c244*mc^6*ms^1^6*ms^2^4+c245*ms^2^5+c246*mc*ms^2^5+c247*mc^2*ms^2^5+c248*mc^3*ms^2^5+c249*mc^4*ms^2^5+c250*mc^5*ms^2^5+c251*mc^6*ms^2^5+c252*ms^1*ms^2^5+c253*mc*ms^1*ms^2^5+c254*mc^2*ms^1*ms^2^5+c255*mc^3*ms^1*ms^2^5+c256*mc^4*ms^1*ms^2^5+c257*mc^5*ms^1*ms^2^5+c258*mc^6*ms^1*ms^2^5+c259*ms^1^2*ms^2^5+c260*mc*ms^1^2*ms^2^5+c261*mc^2*ms^1^2*ms^2^5+c262*mc^3*ms^1^2*ms^2^5+c263*mc^4*ms^1^2*ms^2^5+c264*mc^5*ms^1^2*ms^2^5+c265*mc^6*ms^1^2*ms^2^5+c266*ms^1^3*ms^2^5+c267*mc*ms^1^3*ms^2^5+c268*mc^2*ms^1^3*ms^2^5+c269*mc^3*ms^1^3*ms^2^5+c270*mc^4*ms^1^3*ms^2^5+c271*mc^5*ms^1^3*ms^2^5+c272*mc^6*ms^1^3*ms^2^5+c273*ms^1^4*ms^2^5+c274*mc*ms^1^4*ms^2^5+c275*mc^2*ms^1^4*ms^2^5+c276*mc^3*ms^1^4*ms^2^5+c277*mc^4*ms^1^4*ms^2^5+c278*mc^5*ms^1^4*ms^2^5+c279*mc^6*ms^1^4*ms^2^5+c280*ms^1^5*ms^2^5+c281*mc*ms^1^5*ms^2^5+c282*mc^2*ms^1^5*ms^2^5+c283*mc^3*ms^1^5*ms^2^5+c284*mc^4*ms^1^5*ms^2^5+c285*mc^5*ms^1^5*ms^2^5+c286*mc^6*ms^1^5*ms^2^5+c287*ms^1^6*ms^2^5+c288*mc*ms^1^6*ms^2^5+c289*mc^2*ms^1^6*ms^2^5+c290*mc^3*ms^1^6*ms^2^5+c291*mc^4*ms^1^6*ms^2^5+c292*mc^5*ms^1^6*ms^2^5+c293*mc^6*ms^1^6*ms^2^5+c294*ms^2^6+c295*mc*ms^2^6+c296*mc^2*ms^2^6+c297*mc^3*ms^2^6+c298*mc^4*ms^2^6+c299*mc^5*ms^2^6+c300*mc^6*ms^2^6+c301*ms^1*ms^2^6+c302*mc*ms^1*ms^2^6+c303*mc^2*ms^1*ms^2^6+c304*mc^3*ms^1*ms^2^6+c305*mc^4*ms^1*ms^2^6+c306*mc^5*ms^1*ms^2^6+c307*mc^6*ms^1*ms^2^6+c308*ms^1^2*ms^2^6+c3$

$09*mc*ms1^2*ms2^6+c310*mc^2*ms1^2*ms2^6+c311*mc^3*ms1^2*ms2^6+c312*mc^4*ms1^2*ms2^6+c313*mc^5*ms1^2*ms2^6+c314*mc^6*ms1^2*ms2^6+c315*ms1^3*ms2^6+c316*mc*ms1^3*ms2^6+c317*mc^2*ms1^3*ms2^6+c318*mc^3*ms1^3*ms2^6+c319*mc^4*ms1^3*ms2^6+c320*mc^5*ms1^3*ms2^6+c321*mc^6*ms1^3*ms2^6+c322*ms1^4*ms2^6+c323*mc*ms1^4*ms2^6+c324*mc^2*ms1^4*ms2^6+c325*mc^3*ms1^4*ms2^6+c326*mc^4*ms1^4*ms2^6+c327*mc^5*ms1^4*ms2^6+c328*mc^6*ms1^4*ms2^6+c329*ms1^5*ms2^6+c330*mc*ms1^5*ms2^6+c331*mc^2*ms1^5*ms2^6+c332*mc^3*ms1^5*ms2^6+c333*mc^4*ms1^5*ms2^6+c334*mc^5*ms1^5*ms2^6+c335*mc^6*ms1^5*ms2^6+c336*ms1^6*ms2^6+c337*mc*ms1^6*ms2^6+c338*mc^2*ms1^6*ms2^6+c339*mc^3*ms1^6*ms2^6+c340*mc^4*ms1^6*ms2^6+c341*mc^5*ms1^6*ms2^6+c342*mc^6*ms1^6*ms2^6$

$F_{mc} = a0+a1*mc+a2*mc^2+a3*mc^3+a4*mc^4+a5*mc^5+a6*mc^6+a7*mc^7+a8*mc^8+a9*mc^9+a10*mc^{10}+a11*mc^{11}+a12*mc^{12}+a13*ms1+a14*mc*ms1+a15*mc^2*ms1+a16*mc^3*ms1+a17*mc^4*ms1+a18*mc^5*ms1+a19*mc^6*ms1+a20*mc^7*ms1+a21*mc^8*ms1+a22*mc^9*ms1+a23*mc^{10}*ms1+a24*mc^{11}*ms1+a25*mc^{12}*ms1+a26*ms1^2+a27*mc*ms1^2+a28*mc^2*ms1^2+a29*mc^3*ms1^2+a30*mc^4*ms1^2+a31*mc^5*ms1^2+a32*mc^6*ms1^2+a33*mc^7*ms1^2+a34*mc^8*ms1^2+a35*mc^9*ms1^2+a36*mc^{10}*ms1^2+a37*mc^{11}*ms1^2+a38*mc^{12}*ms1^2+a39*ms1^3+a40*mc*ms1^3+a41*mc^2*ms1^3+a42*mc^3*ms1^3+a43*mc^4*ms1^3+a44*mc^5*ms1^3+a45*mc^6*ms1^3+a46*mc^7*ms1^3+a47*mc^8*ms1^3+a48*mc^9*ms1^3+a49*mc^{10}*ms1^3+a50*mc^{11}*ms1^3+a51*mc^{12}*ms1^3+a52*ms2+a53*mc*ms2+a54*mc^2*ms2+a55*mc^3*ms2+a56*mc^4*ms2+a57*mc^5*ms2+a58*mc^6*ms2+a59*mc^7*ms2+a60*mc^8*ms2+a61*mc^9*ms2+a62*mc^{10}*ms2+a63*mc^{11}*ms2+a64*mc^{12}*ms2+a65*ms1*ms2+a66*mc*ms1*ms2+a67*mc^2*ms1*ms2+a68*mc^3*ms1*ms2+a69*mc^4*ms1*ms2+a70*mc^5*ms1*ms2+a71*mc^6*ms1*ms2+a72*mc^7*ms1*ms2+a73*mc^8*ms1*ms2+a74*mc^9*ms1*ms2+a75*mc^{10}*ms1*ms2+a76*mc^{11}*ms1*ms2+a77*mc^{12}*ms1*ms2+a78*ms1^2*ms2+a79*mc*ms1^2*ms2+a80*mc^2*ms1^2*ms2+a81*mc^3*ms1^2*ms2+a82*mc^4*ms1^2*ms2+a83*mc^5*ms1^2*ms2+a84*mc^6*ms1^2*ms2+a85*mc^7*ms1^2*ms2+a86*mc^8*ms1^2*ms2+a87*mc^9*ms1^2*ms2+a88*mc^{10}*ms1^2*ms2+a89*mc^{11}*ms1^2*ms2+a90*mc^{12}*ms1^2*ms2+a91*ms1^3*ms2+a92*mc*ms1^3*ms2+a93*mc^2*ms1^3*ms2+a94*mc^3*ms1^3*ms2+a95*mc^4*ms1^3*ms2+a96*mc^5*ms1^3*ms2+a97*mc^6*ms1^3*ms2+a98*mc^7*ms1^3*ms2+a99*mc^8*ms1^3*ms2+a100*mc^9*ms1^3*ms2+a101*mc^{10}*ms1^3*ms2+a102*mc^{11}*ms1^3*ms2+a103*mc^{12}*ms1^3*ms2+a104*ms2^2+a105*mc*ms2^2+a106*mc^2*ms2^2+a107*mc^3*ms2^2+a108*mc^4*ms2^2+a109*mc^5*ms2^2+a110*mc^6*ms2^2+a111*mc^7*ms2^2+a112*mc^8*ms2^2+a113*mc^9*ms2^2+a114*mc^{10}*ms2^2+a115*mc^{11}*ms2^2+a116*mc^{12}*ms2^2+a117*ms1*ms2^2+a118*mc*ms1*ms2^2+a119*mc^2*ms1*ms2^2+a120*mc^3*ms1*ms2^2+a121*mc^4*ms1*ms2^2+a122*mc^5*ms1*ms2^2+a123*mc^6*ms1*ms2^2+a124*mc^7*ms1*ms2^2+a125*mc^8*ms1*ms2^2+a126*mc^9*ms1*ms2^2+a127*mc^{10}*ms1*ms2^2+a128*mc^{11}*ms1*ms2^2+a129*mc^{12}*ms1*ms2^2+a130*ms1^2*ms2^2+a131*mc*ms1^2*ms2^2+a132*mc^2*ms1^2*ms2^2+a133*mc^3*ms1^2*ms2^2+a134*mc^4*ms1^2*ms2^2+a135*mc^5*ms1^2*ms2^2+a136*mc^6*ms1^2*ms2^2+a137*mc^7*ms1^2*ms2^2+a138*mc^8*ms1^2*ms2^2+a139*mc^9*ms1^2*ms2^2+a140*mc^{10}*ms1^2*ms2^2+a141*mc^{11}*ms1^2*ms2^2+a142*mc^{12}*ms1^2*ms2^2+a143*ms1^3*ms2^2+a144*mc*ms1^3*ms2^2+a145*mc^2*ms1^3*ms2^2+a146*mc^3*ms1^3*ms2^2+a147*mc^4*ms1^3*ms2^2+a148*mc^5*ms1^3*ms2^2+a149*mc^6*ms1^3*ms2^2+a150*$

$mc^7*ms1^3*ms2^2+a151*mc^8*ms1^3*ms2^2+a152*mc^9*ms1^3*ms2^2+a153*mc^{10}*ms1^3*ms2^2+a154*mc^{11}*ms1^3*ms2^2+a155*mc^{12}*ms1^3*ms2^2+a156*ms2^3+a157*mc*ms2^3+a158*mc^2*ms2^3+a159*mc^3*ms2^3+a160*mc^4*ms2^3+a161*mc^5*ms2^3+a162*mc^6*ms2^3+a163*mc^7*ms2^3+a164*mc^8*ms2^3+a165*mc^9*ms2^3+a166*mc^{10}*ms2^3+a167*mc^{11}*ms2^3+a168*mc^{12}*ms2^3+a169*ms1*ms2^3+a170*mc*ms1*ms2^3+a171*mc^2*ms1*ms2^3+a172*mc^3*ms1*ms2^3+a173*mc^4*ms1*ms2^3+a174*mc^5*ms1*ms2^3+a175*mc^6*ms1*ms2^3+a176*mc^7*ms1*ms2^3+a177*mc^8*ms1*ms2^3+a178*mc^9*ms1*ms2^3+a179*mc^{10}*ms1*ms2^3+a180*mc^{11}*ms1*ms2^3+a181*mc^{12}*ms1*ms2^3+a182*ms1^2*ms2^3+a183*mc*ms1^2*ms2^3+a184*mc^2*ms1^2*ms2^3+a185*mc^3*ms1^2*ms2^3+a186*mc^4*ms1^2*ms2^3+a187*mc^5*ms1^2*ms2^3+a188*mc^6*ms1^2*ms2^3+a189*mc^7*ms1^2*ms2^3+a190*mc^8*ms1^2*ms2^3+a191*mc^9*ms1^2*ms2^3+a192*mc^{10}*ms1^2*ms2^3+a193*mc^{11}*ms1^2*ms2^3+a194*mc^{12}*ms1^2*ms2^3+a195*ms1^3*ms2^3+a196*mc*ms1^3*ms2^3+a197*mc^2*ms1^3*ms2^3+a198*mc^3*ms1^3*ms2^3+a199*mc^4*ms1^3*ms2^3+a200*mc^5*ms1^3*ms2^3+a201*mc^6*ms1^3*ms2^3+a202*mc^7*ms1^3*ms2^3+a203*mc^8*ms1^3*ms2^3+a204*mc^9*ms1^3*ms2^3+a205*mc^{10}*ms1^3*ms2^3+a206*mc^{11}*ms1^3*ms2^3+a207*mc^{12}*ms1^3*ms2^3+a208*ms2^4+a209*mc*ms2^4+a210*mc^2*ms2^4+a211*mc^3*ms2^4+a212*mc^4*ms2^4+a213*mc^5*ms2^4+a214*mc^6*ms2^4+a215*mc^7*ms2^4+a216*mc^8*ms2^4+a217*mc^9*ms2^4+a218*mc^{10}*ms2^4+a219*mc^{11}*ms2^4+a220*mc^{12}*ms2^4+a221*ms1*ms2^4+a222*mc*ms1*ms2^4+a223*mc^2*ms1*ms2^4+a224*mc^3*ms1*ms2^4+a225*mc^4*ms1*ms2^4+a226*mc^5*ms1*ms2^4+a227*mc^6*ms1*ms2^4+a228*mc^7*ms1*ms2^4+a229*mc^8*ms1*ms2^4+a230*mc^9*ms1*ms2^4+a231*mc^{10}*ms1*ms2^4+a232*mc^{11}*ms1*ms2^4+a233*mc^{12}*ms1*ms2^4+a234*ms1^2*ms2^4+a235*mc*ms1^2*ms2^4+a236*mc^2*ms1^2*ms2^4+a237*mc^3*ms1^2*ms2^4+a238*mc^4*ms1^2*ms2^4+a239*mc^5*ms1^2*ms2^4+a240*mc^6*ms1^2*ms2^4+a241*mc^7*ms1^2*ms2^4+a242*mc^8*ms1^2*ms2^4+a243*mc^9*ms1^2*ms2^4+a244*mc^{10}*ms1^2*ms2^4+a245*mc^{11}*ms1^2*ms2^4+a246*mc^{12}*ms1^2*ms2^4+a247*ms1^3*ms2^4+a248*mc*ms1^3*ms2^4+a249*mc^2*ms1^3*ms2^4+a250*mc^3*ms1^3*ms2^4+a251*mc^4*ms1^3*ms2^4+a252*mc^5*ms1^3*ms2^4+a253*mc^6*ms1^3*ms2^4+a254*mc^7*ms1^3*ms2^4+a255*mc^8*ms1^3*ms2^4+a256*mc^9*ms1^3*ms2^4+a257*mc^{10}*ms1^3*ms2^4+a258*mc^{11}*ms1^3*ms2^4+a259*mc^{12}*ms1^3*ms2^4+a260*ms2^5+a261*mc*ms2^5+a262*mc^2*ms2^5+a263*mc^3*ms2^5+a264*mc^4*ms2^5+a265*mc^5*ms2^5+a266*mc^6*ms2^5+a267*mc^7*ms2^5+a268*mc^8*ms2^5+a269*mc^9*ms2^5+a270*mc^{10}*ms2^5+a271*mc^{11}*ms2^5+a272*mc^{12}*ms2^5+a273*ms1*ms2^5+a274*mc*ms1*ms2^5+a275*mc^2*ms1*ms2^5+a276*mc^3*ms1*ms2^5+a277*mc^4*ms1*ms2^5+a278*mc^5*ms1*ms2^5+a279*mc^6*ms1*ms2^5+a280*mc^7*ms1*ms2^5+a281*mc^8*ms1*ms2^5+a282*mc^9*ms1*ms2^5+a283*mc^{10}*ms1*ms2^5+a284*mc^{11}*ms1*ms2^5+a285*mc^{12}*ms1*ms2^5+a286*ms1^2*ms2^5+a287*mc*ms1^2*ms2^5+a288*mc^2*ms1^2*ms2^5+a289*mc^3*ms1^2*ms2^5+a290*mc^4*ms1^2*ms2^5+a291*mc^5*ms1^2*ms2^5+a292*mc^6*ms1^2*ms2^5+a293*mc^7*ms1^2*ms2^5+a294*mc^8*ms1^2*ms2^5+a295*mc^9*ms1^2*ms2^5+a296*mc^{10}*ms1^2*ms2^5+a297*mc^{11}*ms1^2*ms2^5+a298*mc^{12}*ms1^2*ms2^5+a299*ms1^3*ms2^5+a300*mc*ms1^3*ms2^5+a301*mc^2*ms1^3*ms2^5+a302*mc^3*ms1^3*ms2^5+a303*mc^4*ms1^3*ms2^5+a304*mc^5*ms1^3*ms2^5+a305*mc^6*ms1^3*ms2^5+a306*mc^7*ms1^3*ms2^5+a307*mc^8*ms1^3*ms2^5+a308*mc^9*ms1^3*ms2^5+a309*mc^{10}*ms1^3*ms2^5+a310*mc^{11}*ms1^3*ms2^5+a311*mc^{12}*ms1^3*ms2^5+a312*ms2^6+a313*mc*ms2^6+a314*mc^2*ms2^6+a315*mc^3*ms2^6+a316*mc^4*ms2^6+a317*mc^5*ms2^6+a318*mc^6*ms2^6+a31$

$$\begin{aligned}
& 9*mc^7*ms2^6+a320*mc^8*ms2^6+a321*mc^9*ms2^6+a322*mc^10*ms2^6+a323* \\
& mc^11*ms2^6+a324*mc^12*ms2^6+a325*ms1*ms2^6+a326*mc*ms1*ms2^6+a327* \\
& mc^2*ms1*ms2^6+a328*mc^3*ms1*ms2^6+a329*mc^4*ms1*ms2^6+a330*mc^5*ms \\
& 1*ms2^6+a331*mc^6*ms1*ms2^6+a332*mc^7*ms1*ms2^6+a333*mc^8*ms1*ms2^6 \\
& +a334*mc^9*ms1*ms2^6+a335*mc^10*ms1*ms2^6+a336*mc^11*ms1*ms2^6+a337 \\
& *mc^12*ms1*ms2^6+a338*ms1^2*ms2^6+a339*mc*ms1^2*ms2^6+a340*mc^2*ms1 \\
& ^2*ms2^6+a341*mc^3*ms1^2*ms2^6+a342*mc^4*ms1^2*ms2^6+a343*mc^5*ms1^2 \\
& *ms2^6+a344*mc^6*ms1^2*ms2^6+a345*mc^7*ms1^2*ms2^6+a346*mc^8*ms1^2* \\
& ms2^6+a347*mc^9*ms1^2*ms2^6+a348*mc^10*ms1^2*ms2^6+a349*mc^11*ms1^2* \\
& ms2^6+a350*mc^12*ms1^2*ms2^6+a351*ms1^3*ms2^6+a352*mc*ms1^3*ms2^6+a3 \\
& 53*mc^2*ms1^3*ms2^6+a354*mc^3*ms1^3*ms2^6+a355*mc^4*ms1^3*ms2^6+a356 \\
& *mc^5*ms1^3*ms2^6+a357*mc^6*ms1^3*ms2^6+a358*mc^7*ms1^3*ms2^6+a359* \\
& mc^8*ms1^3*ms2^6+a360*mc^9*ms1^3*ms2^6+a361*mc^10*ms1^3*ms2^6+a362* \\
& mc^11*ms1^3*ms2^6+a363*mc^12*ms1^3*ms2^6
\end{aligned}$$

EK-2

Bölüm 2’de (2.9) denkleminde yer alan a_i katsayıları aşağıdaki gibidir.

$$\begin{aligned}
a_0 = & 8871/16384 F1[0]+F1[-6 J]/65536-(9 F1[-5 J])/16384+(225 F1[-4 J])/32768-(485 \\
& F1[-3 J])/16384-(1809 F1[-2 J])/65536+(2295 F1[-J])/8192+(2295 F1[J])/8192- \\
& (1809 F1[2 J])/65536-(485 F1[3 J])/16384+(225 F1[4 J])/32768-(9 F1[5 \\
& J])/16384+F1[6 J]/65536
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_1 = & -(F1[-6 J]/24576)+(9 F1[-5 J])/4096-(81 F1[-4 J])/2048+(3401 F1[-3 J])/12288- \\
& (3447 F1[-2 J])/8192-(3771 F1[-J])/2048+(3771 F1[J])/2048+(3447 F1[2 J])/8192- \\
& (3401 F1[3 J])/12288+(81 F1[4 J])/2048-(9 F1[5 J])/4096+F1[6 J]/24576
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_2 = & -(39983 F1[0])/6144-(5 F1[-6 J])/24576+1/256 F1[-5 J]+(61 F1[-4 J])/4096- \\
& 169/256 F1[-3 J]+(26535 F1[-2 J])/8192+(21 F1[-J])/32+(21 F1[J])/32+(26535 \\
& F1[2 J])/8192-169/256 F1[3 J]+(61 F1[4 J])/4096+1/256 F1[5 J]-(5 F1[6 J])/24576
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_3 = & (35 F1[-6 J])/55296-(79 F1[-5 J])/3072+(457 F1[-4 J])/1536-(16973 F1[-3 J])/27648- \\
& (10979 F1[-2 J])/2048+(5887 F1[-J])/512-(5887 F1[J])/512+(10979 F1[2 \\
& J])/2048+(16973 F1[3 J])/27648-(457 F1[4 J])/1536+(79 F1[5 J])/3072-(35 F1[6 \\
& J])/55296
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_4 = & (678371 F1[0])/27648+(271 F1[-6 J])/331776+(7 F1[-5 J])/1024-(3107 F1[-4 \\
& J])/6144+(339227 F1[-3 J])/82944-(53485 F1[-2 J])/12288-(17675 F1[-J])/1536- \\
& (17675 F1[J])/1536-(53485 F1[2 J])/12288+(339227 F1[3 J])/82944-(3107 F1[4 \\
& J])/6144+(7 F1[5 J])/1024+(271 F1[6 J])/331776
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_5 = & -(25 F1[-6 J])/6912+(335 F1[-5 J])/3456-(755 F1[-4 J])/1728-(11099 F1[-3 \\
& J])/3456+(35489 F1[-2 J])/2304-(11455 F1[-J])/576+(11455 F1[J])/576-(35489 \\
& F1[2 J])/2304+(11099 F1[3 J])/3456+(755 F1[4 J])/1728-(335 F1[5 J])/3456+(25 \\
& F1[6 J])/6912
\end{aligned}$$

$$a_6 = -((58001 F1[0])/1728) - F1[-6 J]/20736 - 91/864 F1[-5 J] + (5449 F1[-4 J])/3456 - (10597 F1[-3 J])/2592 - (3991 F1[-2 J])/2304 + (3043 F1[-J])/144 + (3043 F1[J])/144 - (3991 F1[2 J])/2304 - (10597 F1[3 J])/2592 + (5449 F1[4 J])/3456 - 91/864 F1[5 J] - F1[6 J]/20736$$

$$a_7 = 5/576 F1[-6 J] - 29/288 F1[-5 J] - 97/144 F1[-4 J] + 1633/288 F1[-3 J] - 911/64 F1[-2 J] + (701 F1[-J])/48 - (701 F1[J])/48 + 911/64 F1[2 J] - 1633/288 F1[3 J] + 97/144 F1[4 J] + 29/288 F1[5 J] - 5/576 F1[6 J]$$

$$a_8 = (12145 F1[0])/576 - (43 F1[-6 J])/6912 + 125/576 F1[-5 J] - (1081 F1[-4 J])/1152 + (1051 F1[-3 J])/1728 + 3779/768 F1[-2 J] - (491 F1[-J])/32 - (491 F1[J])/32 + 3779/768 F1[2 J] + (1051 F1[3 J])/1728 - (1081 F1[4 J])/1152 + 125/576 F1[5 J] - (43 F1[6 J])/6912$$

$$a_9 = -(5/864) F1[-6 J] - 11/144 F1[-5 J] + 59/72 F1[-4 J] - 1291/432 F1[-3 J] + 527/96 F1[-2 J] - (39 F1[-J])/8 + (39 F1[J])/8 - 527/96 F1[2 J] + 1291/432 F1[3 J] - 59/72 F1[4 J] + 11/144 F1[5 J] + 5/864 F1[6 J]$$

$$a_{10} = -((1351 F1[0])/216) + (25 F1[-6 J])/2592 - 1/18 F1[-5 J] + 5/144 F1[-4 J] + 95/162 F1[-3 J] - 235/96 F1[-2 J] + 5 F1[-J] + 5 F1[J] - 235/96 F1[2 J] + 95/162 F1[3 J] + 5/144 F1[4 J] - 1/18 F1[5 J] + (25 F1[6 J])/2592$$

$$a_{11} = -(1/216) F1[-6 J] + 5/108 F1[-5 J] - 11/54 F1[-4 J] + 55/108 F1[-3 J] - 55/72 F1[-2 J] + (11 F1[-J])/18 - (11 F1[J])/18 + 55/72 F1[2 J] - 55/108 F1[3 J] + 11/54 F1[4 J] - 5/108 F1[5 J] + 1/216 F1[6 J]$$

$$a_{12} = (77 F1[0])/108 + F1[-6 J]/1296 - 1/108 F1[-5 J] + 11/216 F1[-4 J] - 55/324 F1[-3 J] + 55/144 F1[-2 J] - (11 F1[-J])/18 - (11 F1[J])/18 + 55/144 F1[2 J] - 55/324 F1[3 J] + 11/216 F1[4 J] - 1/108 F1[5 J] + F1[6 J]/1296$$

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı, Soyadı: Yusuf Kocakaplan

Uyruğu: Türkiye (TC)

Doğum Tarihi ve Yeri: 2 Mart 1984, Silopi/ŞIRNAK

Medeni Durumu: Evli

Tel: +90 352 207 66 66#33139

Fax: +90 352 437 49 33

E-mail: yusufkocakaplan@gmail.com

Yazışma Adresi: Erciyes Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü Talas/KAYSERİ

EĞİTİM

Derece	Kurum	Mezuniyet Tarihi
Yüksek Lisans	Erciyes Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Bölümü	2011
Lisans	Dokuz Eylül Üniversitesi, Fen- Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü	2008
Lise	Cizre Lisesi, Cizre/ŞIRNAK	2002

YABANCI DİL

İngilizce

BİLİMSEL İLGİLERİ ve ARAŞTIRMA ALANLARI

- Yoğun Madde Fiziği, Denge ve Denge Dışı İstatistiksel Fizik
- Nanotüp, Nanotel ve Nanoparçacıkların Termodinamik, Manyetik ve Elektriksel özellikleri ve Nanobilim
- Yenilenebilir Enerji Kaynakları ve Güneş Enerjisi
- Faz Dönüşümleri ve Kritik Olaylar, Düzenli ve Düzensiz Sistemler, Model ve Yaklaşımlar

- Sosyo/Ekonofizik
- Karmaşıklık, Kompleks Sistemler ve Kaos

YAYINLARI

1. **Y. Kocakaplan** and M. Keskin, *Magnetizations and phase diagrams of a cylindrical spin-3/2 Ising nanotube with core-shell morphology examined by using the effective-field theory*, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, Gönderildi (2014).
2. **Y. Kocakaplan** and M. Keskin, *Hysteresis and compensation behaviors of spin-3/2 cylindrical Ising nanotube system*, **Journal of Applied Physics**, **116**: 093904-093912 (2014).
3. **Y. Kocakaplan** and E. Kantar, *Thermodynamic and magnetic properties of the hexagonal type Ising nanowire*, **European Physical Journal B**, **87**: 135-142 (2014).
4. B. Deviren, **Y. Kocakaplan** and M. Keskin, M. Balçılar, Z. A. Özdemir, E. Ersoy *Analysis of bubbles and crashes in the TRY/USD, TRY/EUR, TRY/JPY and TRY/CHF exchange rate within the scope of econophysics*, **Physica A**, **410**: 414-420 (2014).
5. **Y. Kocakaplan** and E. Kantar, *An effective-field theory study of hexagonal Ising nanowire: Thermal and magnetic behaviors*, **Chinese Physics B**, **23**: 046801-046808 (2014).
6. M. Ertaş and **Y. Kocakaplan**, *Dynamic behaviors of the hexagonal Ising nanowire*, **Physics Letters A**, **378**: 845-850 (2014).
7. E. Kantar and **Y. Kocakaplan**, *Hexagonal type Ising nanowire with core/shell structure: The phase diagrams and compensation behaviors*, **Solid State Communications**, **177**: 1-6 (2014).
8. **Y. Kocakaplan**, E. Kantar and M. Keskin, *Hysteresis loops and compensation behavior of cylindrical transverse spin-1 Ising nanowire within effective-field theory based on a probability distribution technique*, **European Physical Journal B**, **86**: 420-429 (2013).
9. M. Ertaş, **Y. Kocakaplan** and M. Keskin, *Effective-field theory for dynamic phase diagrams of the kinetic spin-3/2 Blume-Capel model under a time oscillating longitudinal field*, **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, **348**: 113-119 (2013).

10. **Y. Kocakaplan**, Ş. Doğan, B. Deviren and M. Keskin, *Correlations, hierarchies and networks of the world's automotive companies*, **Physica A**, **392**: 2736-2774 (2013).
11. **Y. Kocakaplan**, B. Deviren and M. Keskin, *Hierarchical structures of correlations networks among Turkey's exports and imports by currencies*, **Physica A**, **391**: 6509-6518 (2012).
12. M. Keskin, B. Deviren and **Y. Kocakaplan**, *Topology of the correlation networks among major currencies using hierarchical structure*, **Physica A**, **390**: 719-730 (2011).

SUNUMLARI

1. M. Keskin, B. Deviren, and **Y. Kocakaplan**, “*Topology of the correlation networks among major currencies using hierarchical structure methods*”, **103rd Statistical Mechanics Conference, Rutgers University, Hill Center, ABD, 9-11 May 2010. (Sözlü Sunum)**
2. M. Keskin, B. Deviren and **Y. Kocakaplan**, “*Topology of the major foreign exchange markets using hierarchical structure methods*”, **Turkish Physical Society, 27th International Physics Congress, Istanbul University, Istanbul, 13–17 September 2010. (Sözlü Sunum)**
3. M. Keskin, B. Deviren and **Y. Kocakaplan**, “*Topology of the correlation networks among major currencies using hierarchical structure methods*”, **International School on Multidisciplinary Approaches to Economic and Social Complex Systems, Università degli Studi di Siena, Siena, Italy, 27 June-3 July 2010. (Poster Sunum)**
4. **Y. Kocakaplan**, B. Deviren ve M. Keskin, “*Hierarchical Structures of Exchange rates based on Turkey's export and import*”, **18. İstanbul İstatistiksel Fizik Günleri, Sabancı Üniversitesi, İstanbul, Türkiye, 30 Haziran- 2 Temmuz 2011. (Sözlü Sunum)**
5. B. Deviren, **Y. Kocakaplan** ve M. Keskin, “*Analysis of bubbles and crashes in the Turkish Lira based on the USD and EUR within the scope of econophysics*”, **19. İstanbul İstatistiksel Fizik Günleri, Sabancı Üniversitesi, İstanbul, Türkiye, 28–30 Haziran 2012. (Sözlü Sunum)**
6. **Y. Kocakaplan**, Ş. Doğan, B. Deviren ve M. Keskin, “*Correlations, hierarchies and networks of the World's Automotive Companies*”, **19. İstanbul İstatistiksel Fizik Günleri, Sabancı Üniversitesi, İstanbul, Türkiye, 28–30 Haziran 2012. (Sözlü Sunum)**
7. M. Ertaş, **Y. Kocakaplan** and M. Keskin “*The dynamic phase transitions and dynamic phase diagrams in the spin-3/2 Blume-Capel Model: Effective-field theory*”

and Glauber-type stochastic dynamic approaches”, **International Journal of Arts & Sciences, Harvard University, ABD, 18 Haziran 2013 (Sözlü Sunum)**

8. **Y. Kocakaplan**, E. Kantar ve M. Keskin “*Hysteresis loops and compensation behavior of cylindrical transverse spin-1 Ising nanowire within effective-field theory*”, **20. İstatistiksel Fizik Günleri, Erciyes Üniversitesi, Kayseri, Türkiye, 27–29 Haziran 2013. (Sözlü Sunum)**
9. E. Kantar, **Y. Kocakaplan** ve M. Keskin “*Investigation of topological structure of tourism based on foreigners visiting Turkey via hierarchical methods*”, **Turkish Physical Society, 30th International Physics Congress, Istanbul University, Istanbul, 2–5 September 2013. (Sözlü Sunum)**
10. **Y. Kocakaplan** ve E. Kantar “*Hexagonal type Ising nanowire with core/shell structure: The phase diagrams and compensation behaviors*”, **19. Yoğun Madde Fiziği Ankara Toplantısı, Bilkent Üniversitesi, Ankara, Türkiye, 20 Aralık 2013. (Poster Sunum)**
11. **Y. Kocakaplan** and M. Keskin, Hysteresis and compensation behaviors of spin- 3/2 cylindrical Ising nanotube system, **21. İstatistiksel Fizik Günleri, Erciyes Üniversitesi, Kayseri-TÜRKİYE, 19-21 Haziran 2014. (Sözlü Sunum)**

KATILDIĞI YAZ ve KIŞ OKULLARI

1. 3. Yenilenebilir Enerji Sistemleri Kış Okulu, **Afyon Kocatepe Üniversitesi, Mühendislik Fakültesi, Afyon-TÜRKİYE, 21-25 Ocak 2014.**
2. Fizikçilere yönelik araştırma projesi hazırlama ve uygulama eğitimi, **Erciyes Üniversitesi, Erciyes Teknopark, Kayseri-TÜRKİYE, 15-17 Aralık 2013.**
3. International Summer School and Workshop on Physics and Chemistry of Solar Energy, **Institute of Theoretical and Applied Physics (ITAP), Dereözü Kampüsü, Turunç, Marmaris-TÜRKİYE, 24-30 Ağustos 2013.**
4. International Summer School and research workshop on Complexity, **TÜBİTAK-Feza Gürsey Institute-Imperial College, İstanbul-TÜRKİYE, 5-10 Eylül 2011.**

ARAŞTIRMA PROJELERİ

1. **TÜBİTAK Projesi, Proje Kodu: 114F008**, Gerçek manyetik materyallere prototipik model oluşturan triangular örgü üzerinde saf ve karma spin Ising sistemlerinin dinamik davranışlarının incelenmesi, **2014-Devam Ediyor, (Araştırmacı ve Bursiyer).**

2. **Erciyes Üniversitesi BAP Birimi Projesi, Proje Kodu: FDK-2013-4397**, Silindirik spin-3/2 Ising nanotüp sisteminin dengede ve dengede olmayan manyetik özellikleri, **2013-Devam Ediyor, (Araştırmacı)**.
3. **Erciyes Üniversitesi BAP Birimi Projesi, Proje Kodu: FBA-2012-4121**, Zamana bağlı çift yaklaşık yöntemi kullanılarak spin-1/2 ve spin-1 Ising sistemlerindeki dinamik faz geçişleri ve dinamik faz diyagramları, **2012-Devam Ediyor, (Araştırmacı)**.
4. **TÜBİTAK Projesi, Proje Kodu: 109T133**, Para Birimleri, Türkiye'deki Büyük Şirketler Dahil Bazı Uluslararası Şirketler ve Türkiye'deki Büyük Şirketler Arasındaki Korelasyon Ağ Örgüleri; Türk Lirasındaki Ani Çıkış ve İnişlerin Analizi, **2010-2012, (Araştırmacı ve Bursiyer)**.
5. **Erciyes Üniversitesi BAP Birimi Projesi, Proje Kodu: FBY-10-3318**, Hiyerarşik yapı yöntemleri kullanılarak önemli para birimleri arasındaki ilişkilerin topolojik analizi, **2010-2011, (Araştırmacı)**.

BİLİMSEL FAALİYETLERİ

- 21. İstatistiksel Fizik Günleri, Organizasyon Planlamacısı, **19-21 Haziran 2014 Kayseri-TÜRKİYE**.
- 20. İstatistiksel Fizik Günleri, Organizasyon Planlamacısı, **27-29 Haziran 2013 Kayseri- TÜRKİYE**.

KAZANDIĞI ÖDÜL ve BAŞARILAR

- 2014- TÜBİTAK 2214-A Yurt Dışı Doktora Sırası Araştırma Bursu
- 2009-2011 Erciyes Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Bölümü, Yüksek Lisans, 1.lık derecesi ile mezuniyet
- 2004-2008 Dokuz Eylül Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Lisans, 2.lık derecesi ile mezuniyet

BİLGİSAYAR BECERİLERİ

- **İşletim Sistemleri:** Microsoft Windows XP/Vista/7/8, Linux

- **Programlama Dilleri:** Fortran, C++
- **Bilimsel Paket Programları:** Mathematica, Matlab
- **Grafik ve Çizim Programları:** Sigmaplot, Origin, Autocad
- **Ofis Otomasyonu:** Microsoft Office, TEX, LATEX

HOBİLERİ ve DİĞER İLGİ ALANLARI

Seyahat Etme, Bilim ve Teknoloji, Kitap Okuma, Yüzme, Futbol, Motor Sporları