

T.C.
GEBZE YÜKSEK TEKNOLOJİ ENSTİTÜSÜ
MÜHENDİSLİK VE FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

İKİ VE ÜÇ BOYUTLU NANO KOMPOZİT
MALZEMELERİN TEMEL MANYETİK
DURUMU

Ayşe BOZKURT
YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

GEBZE
2012

T.C.
GEBZE YÜKSEK TEKNOLOJİ ENSTİTÜSÜ
MÜHENDİSLİK VE FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

İKİ VE ÜÇ BOYUTLU NANO KOMPOZİT
MALZEMELERİN TEMEL MANYETİK
DURUMU

Ayşe BOZKURT
YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

DANIŞMAN: Doç. Dr. M. Hasan ASLAN

GEBZE

2012



YÜKSEK LİSANS TEZİ JÜRİ ONAY SAYFASI

G.Y.T.E. Mühendislik ve Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun 20/01/2012 tarih ve 2012/01 sayılı kararıyla oluşturulan jüri tarafından 14/02/2012 tarihinde tez savunma sınavı yapılan Ayşe BOZKURT' un tez çalışması FİZİK Anabilim Dalında YÜKSEK LİSANS tezi olarak kabul edilmiştir.

JÜRİ

ÜYE

(TEZ DANIŞMANI) : Doç. Dr. M. Hasan ASLAN

ÜYE

: Prof. Dr. Faik MİKAILZADE

ÜYE

: Prof. Dr. Recep DİMİTROV

ONAY

G.Y.T.E. Mühendislik ve Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun/...../20... tarih ve/..... sayılı kararı.

İMZA/MÜHÜR

ÖZET

TEZİN BAŞLIĞI: İKİ VE ÜÇ BOYUTLU NANO KOMPOZİT MALZEMELERİN TEMEL MANYETİK DURUMU

YAZAR ADI: AYŞE BOZKURT

Bu tez çalışmasının temel amacı sözkonusu malzemelerin temel manyetostatik özelliklerinin teorik olarak araştırılmasıdır. Bu amaç doğrultusunda araştırma grubumuzda tasarlanmış olan Monte-Carlo ve Statik Relaksasyon bilgisayar programları kullanıp iki ve üç boyutlu sistemlerle simülasyonlar gerçekleştirilmiştir. ‘Statik Relaksasyon’ algoritmasının kullanılması sureti ile manyetik dipol sistemlerinin temel durumları hesaplanmaktadır ve analitik yöntemlerle bulunan durumlarla karşılaştırılıyor.

Bu araştırmalarda iki boyutlu basit kare latıs dipol sistemin temel durumu ilk defa analitik şekilde bulunmuştur ve temel durumun enerjisi hesaplanmıştır. Sınırlı modellerde ise sınır koşulları sebebiyle dipollerin anti ferromanyetik dizilimde olduğu görülmüştür. Bu dizilimin girdap döngüsel çizgilerinden oluştuğu gözlenmektedir.

SUMMARY

TITLE OF THE THESIS: MODELLING OF THE MAGNETIC PROPERTIES OF TWO-AND THREE DIMENSIONAL NANO COMPOSITE MATERIALS

AUTHOR: AYŞE BOZKURT

The main purpose of the present study is to investigate theoretically the basic magneto static properties of nano composite magnetic materials. In the present study the nano, structured magnetic materials have been investigated by using the simulation methods of statistical physics. For this purpose, suitable Monte Carlo and Static Relaxation computer programs, which have been previously developed by our research team, have been used. Using the static relaxation algorithm, we have modeled the ground state of the two-and three dimensional magnetic dipole systems and the result has been used to compare the obtained analytical results.

In the present study, the ground state of the simple square dipole lattice model has been found and its energy has been exactly calculated. It has been shown that due to the limited sizes of the model the boundary conditions play important rule in forming the structure of finite-sized models. The ground state of the dipole system turned out to be a system of a number of meta-stable states which consist of of anti-ferromagnetic line segments frequently forming vortexes.

TEŞEKKÜR

Bu tezin hazırlanmasında bana her konuda destek olan Gebze Yüksek Teknoloji Enstitüsü Öğretim Üyesi Değerli Hocam ve Tez Danışmanım Doç. Dr. M. Hasan Aslan ve zamanını ayırıp çalışmalarımda bana yol gösteren Bahçeşehir Üniversitesi Öğretim Üyesi, Sevgili Hocam Prof. Dr. Recep Dimitrov’a sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

Ayşe BOZKURT

Ocak 2012

İÇİNDEKİLER DİZİNİ

	<u>Sayfa</u>
ÖZET	iv
SUMMARY	v
TEŞEKKÜR	vi
İÇİNDEKİLER DİZİNİ	vii
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ	viii
ŞEKİLLER DİZİNİ	x
1. GİRİŞ	1
2. NANO KOMPOZİT MALZEMELER	7
2.1. Maddenin Manyetik Özellikleri	7
2.2. Nano Manyetikler ve Nano Kompozit Manyetik Modeller	10
2.3. Kristal Yapılı Üç Boyutlu Modeller	16
3. İKİ BOYUTLU NANO KOMPOZİT MANYETİK MODELİN TEMEL DURUMU	24
3.1. Dipol Manyetik Modellerinde Sınır Koşulların Etkisi	24
3.2. İki Boyutlu Kare Dipol Modelin Temel Durumu	26
SONUÇLAR	40
KAYNAKLAR	41
ÖZGEÇMİŞ	45
EKLER	46

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

$\vec{M}$	: Mıknatıslanma
χ	: Manyetik duygunluk
$\vec{H}$	: Yardımcı alan
S	: Spin açısal momentumu
m	: Manyetik dipol momenti
B	: Manyetik alan
τ	: Tork
μ_0	: Boşluğun manyetik geçirgenliği
μ_B	: Bohr magnetonu
$\text{\AA}$	: Angstrom
nm	: nanometre
SC	: basit kübik (simple cubic)
U	: Manyetik alandaki dipolün enerjisi
H	: Hamiltonyan
k_B	: Boltzmann sabiti
T	: Sıcaklık
N	: Parçacık sayısı
h	: Planck sabiti
T_C	: Curie sıcaklığı
$\hbar$	: Planck sabiti
E	: Enerji
$\vec{r}$	: Konum vektörü
d	: Parçacık çapı
F_i	: i. Parçacığa etki eden kuvvet
$R(i)$	: Kristalin i. noktasında bulunan parçacığın konum vektörü
ε_{ij}	: i. ve j. Spinlerin arasındaki etkileşme enerjisi
e_{ij}	: i. spinden j. spine yönelik birim vektör
E_0	: Birim enerji

b : Birim manyetik alan

r_0 : En yakın spinlerin arasındaki mesafe

h : Ölçeklendirilmiş hamiltonyan

r_{ij} : i . ve j . spinlerin arasındaki uzaklık

SRM : Statik relaksasyon metodu

MD: Moleküler dinamik

ŞEKİLLER DİZİNİ

<u>Sekil</u>		<u>Sayfa</u>
2.1.	SC 20x20x20 modelin $b=0$ alanda temel durumu	17
2.2.	SC 20x20x20 modelin manyetik alanda temel durumu	18
2.3.	SC 20x20x20 modelin $T=0$ sıcaklıkta mıknatıslanma eğrisi	22
2.4.	SC 20x20x20 modelin sıfır manyetik alanda sıcaklığa bağlı olan özellikleri	22
2.5.	SC 20x20x20 modelin mıknatıslanma eğrisi	23
3.1.	20x20 dipol sistemin sıfır sıcaklıkta dipol dizilimi (periyodik sınır koşulu uygulanmamıştır)	25
3.2.	20x20 dipol sistemin sıfır sıcaklıkta dipol dizilimi (periyodik sınır koşulu uygulanmıştır)	26
3.3	2x2 Dipol sistemin temel durumu.	28
3.4	3x3 dik açı oluşturan dipol sistemin temel durumu	32
3.5	4x4 dik açı oluşturan dipol sistemin temel durumu	33
3.6	20x20 dik açı oluşturan dipol sistemin temel durumu	33
3.7	10x10 modelin temel durumu.	34
3.8	30x30 modelin temel durumu.	35
3.9	40x40 modelin temel durumu.	36
3.10	50x50 modelin temel durumu.	38
3.11	10x10x10 üçgen modelin temel durumu ($b=0$)	39
3.12	10x10x10 üçgen modelin manyetik alanda temel durumu	39

1 - GİRİŞ

Bu yüksek lisans tezi, eski Sanayi ve Ticaret Bakanlığına bağlı olan Sanayi Araştırma ve Geliştirme Genel Müdürlüğü tarafından desteklenen, ‘Elektro-Manyetik Radyasyon Soğurucu Malzeme (EMARSOM) Geliştirilmesi’ başlıklı, San_Tez Proje No 00185. STZ.2007-2’in yapılmış bir araştırmadır.

Globalleşen dünya ticareti ve ülkemizin Avrupa birliği mevzuatına uyum zorunluluğu, teknolojiye kullanılan birçok cihazın CE(Avrupa’ya Uygunluk) belgesi alabilmesi için Elektro-magnetic uyumlu (EMC) olmasını zorunlu kılmaktadır. O nedenle cihazların yaydığı EMR sinyallerinin yerine göre yeterince söğürülmesi veya ekranlanabilmesi gerekir [Bogush,2005]. Üretilen cihazların EMC uyumlu olduklarının test edilebilmesi için bile EMR den yeterince arınmış karanlık odalarla donanımlı laboratuvarlara gerek duyulmaktadır. Çünkü test edilecek cihazların yaydığı sinyallerin ortamda bulunan veya ölçüm için üretilen sinyallerin çoklu yansımaları ile oluşan çevre sinyallerinden ayırdedilmesi zorunludur.

Diğer yandan bu tür cihazların radyasyonu yansıtmaması ve özellikle de askeri amaçlar için kullanılan uçak, gemi, roket gibi cisimlerin metalik yüzeylerinin radarlardan gelen elektromanyetik radyasyona karşı ekranlanması büyük önem taşıyan teknolojik bir problemdir. Bu problemin çözümü, daha etkin EMARSOM’ların geliştirilmesinde yatmaktadır. EMARSOM’ların değeri ise ne kadar ince bir tabaka ile ve ne kadar geniş bir frekans aralığında söğürme işlemini yaptığı ile alakalıdır.

Malzemelerin EMR ile etkileşiminin nasıl olacağını belirleyen parametreler dielektrik ($\varepsilon = \varepsilon_r - i\varepsilon_i$) ve manyetik ($\mu = \mu_r - i\mu_i$) geçirgenliktir. Burada r alt indisi reel kısımları, i alt indisi de sanal (imaginary) kısımları temsil etmektedir. Dielektrik ve manyetik geçirgenliğin sanal kısımlarının büyük olması, malzemenin radyasyonu iyi söğüracağı anlamına gelmektedir.

Hali hazırda kullanılan EMARSOM’lardan tamamen dielektrik olanları bulunduğu gibi, manyetik olanları da bulunmaktadır. Bu iki malzemenin tek, çift ve çok katmanlı olarak dizaynı ile farklı frekanslarda kullanılabilecek EMARSOM’lar

yapmak mümkündür. Fakat bu tip dizayn, katman kalınlıkları üzerindeki katı şartlardan dolayı oldukça zordur. Diğer taraftan yeterince geniş bir frekans aralığına sahip değildir [Kovneristy et al,1982].

Yalnızca dielektrik soğurucu kullanıldığında, kaplama kalınlığının $\lambda/\sqrt{\epsilon_r}$ olması gerekmektedir. Burada ise şöyle bir problem ortaya çıkmaktadır: ϵ_r ne kadar küçük olursa, o kadar kalın bir kaplama kullanmak gerekmekte, kaplama kalınlığını azaltmak için ϵ_r yi büyütmek istediğimizde ise bu sefer hava ile kaplama arasındaki ara kesit yüzeyinden yansımalar çok artmaktadır. Gerçekten de elimizde $\epsilon_r = 10^3 - 10^4$ mertebesinde olan seramik ferroelektrik soğurucular bulunmasına ve bu malzemenin çok ince bir kaplaması soğurma işlemi için yeterli olmasına rağmen, empedans uyumsuzluğundan ötürü hava ile ara kesitinde meydana gelen kuvvetli yansımalar bu malzemenin tek başına kullanımını geçersiz kılmaktadır [Wright, 1977]. Bu yüzden bu malzemeler çok katmanlı yapılarda ve kompozitler şeklinde kullanılmalıdır.[Tino et al, 1976, Petrov et al, 1986, <http://www.airforce-technology.com/projects/fl117/>; <http://www.encyclopedia.com/html/s1/stealtht.asp>.]

Örneğin stealth (görünmezlik) teknolojisi ile üretilmemiş keskin köşesiz uçakların RCS değerleri 2-4 m² civarında iken, yoğunluklu olarak EMARSOM kullanılan meşhur US F-117 lerin (radar etkin kesiti (radar cross section – RCS) değerleri sadece 10-100 cm² arasındadır [<http://home.iae.nl.htm> – International defense review - January 01, 2004]. Son zamanlarda bu uçakların etkin kesitlerinin bir kuş büyüklüğüne indirgenme çalışmalarının yapıldığından bahsedilmektedir [<http://www.lowobservable.com.htm> – World Stealth Ships, 2005]. Diğer yandan Rusya stealt sınıfından sayılmayan bir uçağın RCS parametre değerini düşürme çalışmalarına hız vermiş (Theoretical and Applied Electromagnetics (ITAE) at the Russian Academy of Sciences in Moscow) ve 1 ila 1.5 mm kalınlıklı ferromagnetic EMARSOM kaplayarak SU-35 uçağının kaplanan bölgesinden yansıyan sinyali 10-15 dB düşürmüştür [<http://www.fas.org/man/dod-101/navy/docs/fun/part11.htm>]. Hatta örneğin "Seawraith" (Vosper Thornycroft LTD in England) gemisi bile bu tür malzemelerle kaplanmıştır [Amin et al, 1981].

Bu örneklerde kullanılan EMARSOM konusunda literatürde detaylı bilgi verilmemektedir. Özellikle modern savaş uçaklarında, kullanılan malzemelerin kompozisyonunun gizli tutulmuş olması anlaşılır bir durumdur. Bazı uygulamalarda radardan saklamak için objelerin yüzeyleri dielektrik malzeme arasına sandviç edilen ardışık magnetik Ni-Mn-Zn kompozisyonu ile kaplanır. Böyle bir kaplama RF sinyalinin %95 ini ısıya çevirebilir. Bu tür kaplamanın kalınlığı 1.75 cm kadar olabilir ve uçaklar için extra ağırlık nedeni olmasına rağmen gemilere uygulanmalarında bir sakınca görülmez. Devam eden diğer bir araştırma da phenolic-fiberglass sandviç malzemesi üzerinedir. Gümüş tozu ve karbon ("carbon black") ile kullanıldığında bu malzeme de 2.5 ile 12 GHz frekanslı dalganın %95 ini ısıya dönüştürebilir ancak daha düşük ve yüksek frekanslarda etkin değildir [Kunihiro, S., USA Patent 3623099, 1970].

Olabildiğince geniş frekans aralığında yeterli soğurmayı sağlayacak daha ince kaplamaların etkinliği ancak manyetik malzemelerin ve özellikle de ferritlerin kullanımı ile mümkün olabilir [Dauwen, J.M.A et al., USA Patent 5229773, 1993]. Bu yapılar manyetik tozların (demir ferrit) dielektrik malzeme ile karışımından yapılabilir. Farklı kombinasyondaki ferritler ve karbonyl Fe ve Ni tozları manyetik malzeme olarak kullanılmaktadır. Bu malzemeleri bir arada tutmak için reçine, plastik, kauçuk gibi birleştiriciler kullanılmaktadır. Soğurma bandını genişletmek için farklı manyetik malzemeler [Ichikawa Hiroshi, et al., USA Patent 4507354, 1985], kalınlığı azaltmak için ferroelektrik seramikler denenmiştir. Bu magneto-dielektrik yapıların, $\lambda / \sqrt{\epsilon_r \mu_r}$ kalınlığındaki bir tabaka önemli oranda soğurma yapabilir. Hatta, bazı manyetik malzemelerin dielektrik matriksleri içerisine yerleştirilmesi ile 10 MHz- 100 GHz arasında soğurma etkinliğinin artabileceği iddia edilmiştir [Thomson, C.F., UK Patent 1367554, 1974.]

Farklı iletken yapıların (graphit, fulleren, metal, metal oksit, yarı iletkenler) farklı oranlarda, polymer matriksler içerisine yerleştirilmesi ile ϵ_r ve ϵ_i değerleri amaçlar doğrultusunda değiştirilebilir. Bu amaçla, son zamanlarda fiberler de EMARSOM çalışmalarının ilgi sahasına girmiştir. Örneğin SiC fiberleri kullanılarak 8-16 GHz aralığında çalışan bir EMARSOM önerilmiştir [Ken Ishino et al. USA Patent 4003840, 1977].

Birçok ferrit kompozisyonu farklı frekans aralıklarında soğurucu malzeme olarak tasarlanmıştır. Örneğin, Ni-Co-Zn-Si-Fe-O maddelerinden oluşan spineller 3 GHz civarında çalışmak üzere önerilmişlerdir[Jpn. Patent 54-27556, 1979]. Diğer taraftan MFe_2O_4 (M= Mn, Co, Ni, Cu, Zn, Mg ve benzeri) olmak üzere soğurucu malzeme olarak önerilmişlerdir [O. Yalcin et al. 2004] . Bu malzemeler 0.5-12 GHz civarı için düşünülmüşlerdir. Bu yapılar parçacık boyutları 1.65-0.7 mm arasında olduğunda 0.5-1.5 GHz aralığındaki radyasyonları, 0.1 mm'den küçük parçacıklar ise 2.5-12 GHz arasındaki radyasyonları soğurmaktadır. Ferrit soğurucuların en büyük avantajı çok az bir kalınlıkta kaplama gerektirmeleridir. Diğer taraftan çalışma frekanslarının çok geniş olduğu söylenemez, bu yüzden farklı frekanslarda çalışan birkaç farklı yapı sinterleme ile bir araya getirilmelidir [Koseoglu Y et al, 2005].

Diğer yandan uygun geometrik şekillere sahip ve nano boyutlu magnetik bileşen içeren kompozitlerin daha etkin olacağı bu boyuttaki örnekler üzerinde yaptığımız FMR deneylerinden anlaşılmaktadır[Rameev, B.Z et al. 2006; Bystrzejewski et al. 2005; Ying Wang et al. 2005]. O nedenle bu projede nano boyutlu magnetik malzemelerin değişik tekniklerle üretimine ağırlık verilmiştir. Parçacıkların sonlu büyüklükleri ve yüzey etkilerinden (süperparamanyetizma, yüksek alan irreversibilitisi, zayıf doyum, extra anizotropi katkıları veya manyetik alanda soğutmadan sonraki ikincil loop) doğan yeni etkiler ortaya çıkar.

Nano-manyetik malzemeler, sergiledikleri değişik fiziksel, kimyasal ve mekanik özelliklerden ötürü, biomedikal, ilaç iletimi, çevre, bilgisayar teknolojileri, magnet yapımı, elektronik, elektromanyetik ve benzeri birçok uygulama alanı bulmaktadırlar [Ling Zhang et. al., 2006; H.A. Kolodziej, et al., UK Patent., GB 2379331A 2001; Boskovic et al., 2005]. Dolayısıyla bu konuda çok yoğun araştırmalar süre-gelmektedir ve daha da yoğunlaşarak devam edeceğinden şüphe bulunmamaktadır. Bu malzemelerin hazırlanması, karakterizasyonu için birçok teknik geliştirilmiştir. Son zamanlarda geniş bir uygulama alanına sahip olan (EMC) konusunda Kolodjez ve arkadaşları tarafından geliştirilmiş yeni bir metot birçok araştırmacı tarafından kullanılmaktadır[Stefano di Stasio and Vladimiro Dal Santo, 2006]. Yüksek kalitede nanopartiküllerin elde edilmesi hem pahalı hem de zordur. Aynı anda hem single faz hemde çok yüksek saflıkta nanotoz elde etmek çok

önemlidir. Boskovicin önermiş olduğu SPRT(self propagating rom temperature synthesis) yöntemi bu yüzden çok avantajlı yöntemlerden birisidir [J.T. Lue, 2001].

Diğer yandan, Zn prçacıkları ile tek boyutlu nanoyapıların üretimi için gaz-fazı buharlaştırma-aeroval yöntemi- yaklaşık 500⁰C sıcaklıklarda partikül elde edebilebilmesi, fiziksel ve kimyasal işlem parametrelerinin kontrol edilmesi ve diğer metotlara göre daha ucuz maliyetinin olması gibi avantajlarının yanında çekirdek büyüklüğüne sınır koymasından dolayı (20 nm'den daha büyük parçacık elde edememek gibi) bir takım zorlukları da mevcuttur [Z. Wang et al., 2006].

Sol-jel yöntemi uniform büyük alanlı ince film üretimi ve yüksek saflıkta homojen olan nanoboyutta tozların üretimi için kullanılan bir metottur. Metal alkoxideslerin hidrolizinde sol-jel metodunun kullanılması hem uzun bir zaman gerektirmekte hem de kararsız metal alkoxides veya metal tozlarının metal alkoxidelerle yüksek kaliteli organik çözücülerde çözünmesi zorunluluğundan ötürü yüksek bir maliyete sahiptir. Fakat Liu ve arkadaşları [A. Calka et al., 2003] sitrik asit kullanarak bu yöntemi basitleştirmiş ve bu yöntemle sitrik acid-gel methodu adını vermişlerdir. Yöntem bu haliyle çok daha basit olup, artık çok pahalı olan reagent ve herhangi bir contaminative (kirletici) mevcut değildir. Z. Wang ve ekibi ise bu metodu kullanarak işlem basamaklarını daha da kısa hale getirmiştir [M.Toprak, 2003].

Elektrik discharge atık işlemleri de, tozların sinterlenmesi, metalurji ve nano-malzeme madde hazırlama yöntemi olarak kullanılmaktadır. A. Calka ve arkadaşları ise nanoboyutta partikül üretmek için yeni bir yaklaşım getirerek, parçacık büyüklüğünü ve dağılımını kontrol etmeğe çalışmışlardır [Dragieva et al., 1995]. Yine nano tel hazırlamak için Touminen [Touminen et al., 2000] in kullandığı ve ve elektroliz ile di-blok co-polimer içerisindeki nano tüplere elektroliz ile metal depozisyonu yaparak nano tel üretmek verimliliğinin düşük olması nedeniyle yüksek maliyetli teknikler arasında yer almaktadır. Diğer yandan daha geniş ölçekli üretimler için ferrit tozları ile karbonyl demir bir polimer içerisinde akışkan bir karışım yapıp boyama tekniği ile ya da plakalar haline getirilip, soğurucu kaplama malzemesi olarak kullanılabileceklerdir.

Böyle bir kompozit malzemenin manyetik özelliklerini anlamak için önce basit bir manyetik dipol sistemin özelliklerini anlamak gerektir. Manyetik dipol sistemin davranışını genel bir yapıda incelemek neredeyse imkansızdır, dolayısıyla daha basit modellerin araştırmasından başlamalıyız.

Bilgisayarların kullanımının yaygınlaşması ile beraber laboratuvar ortamında deneysel olarak incelenmesi zor olan sistemlerin davranışlarını takip etmek kolaylaşmıştır. Bu tez çalışmasında yalıtkan bir maddenin içerisine çok küçük ferromanyetik parçacıkların yerleştirilmesi sureti ile üretilmiş olan kompozit bir malzemenin manyetik özellikleri bilgisayar simülasyon tekniklerinin kullanılması sureti ile incelenmiştir. Bu tez çalışması, Ertoğrul Bolcal'ın aynı San_Tez Proje No 00185. STZ.2007-2'in altında yaptığı 'NANO KOMPOZİT MALZEMELERİN MANYETİK ÖZELLİKLERİNİN MODELLENMESİ' isimli doktora tez çalışmasının [Ertuğrul Bolcal, 2011] devamıdır ve söz konusu tezin yöntemlerini ve sonuçlarını kullanarak bazı iki ve üç boyutlu nano-kompozit modellerin temel durumları bulunmuştur. Yazılımı kısaltmak için yüksek linsas tezindeki kullanan yöntemler bu doktora tezini takip ederek, özet şeklinde aşağıdaki gibi açıklanmıştır.

2. NANO KOMPOZİT MANYETİK MALZEMELER

2.1. Maddenin Manyetik Özellikleri

Tezde incelenen nano kompozit malzeme, içerisine çok küçük **tek-domainli ferromanyetik** parçacıkların yerleştirilmesi sureti ile üretilmiş olan kompozit bir malzemedir. Bu kompozit sistem her ne kadar yapay da olsa manyetik özelliklerinin klasik manyetizma yöntemleriyle incelenmesi mümkündür. Fakat nano parçacıklar arasındaki manyetik etkileşme uzun mesafeli olduğundan dolayı sistemin manyetik özelliklerinin analitik şekilde incelenmesi nerdeyse olanaksızdır. Öte yandan bilgisayar teknolojisinin ilerlemesi ile birlikte katıhal fiziği alanında gelişmiş sayısal yöntemlerin kullanılmaya başlanmasıyla malzeme mühendisliği alanında önemli ilerlemeler kaydedilmiştir[I.Zutiç et al.,2004]. Söz konusu olan doktora tezine göre nano-kompozit ferromanyetik malzemeler bir süperparamanyetik malzemeye benzemektedir. Kompozit malzeme manyetik özellikleri bakımından her ne kadar ferromanyetik bir maddeye çok benziyor olsa da ferromanyetik bir malzeme değildir [J. Xu, M. A. Howson et al.,1997; C. Kittel, 1946; L. N’eel 1949; E.C. Stoner et al., 1948; L. Lu, et al., 2000; A. Jordan et al., 1999; J.L.Dormann and D.Fiorani, 1992; S.Hariharan and J.Gass, 2005; M.F. Hansen, et al.,1998; J.L. Dormann et al., 1988; S. Morup and E. Tronc, 1994; J.L. Dormann et al., 1997; J.L. Dormann et al., 1999; F.C. Fonseca et al., 2002; A. Fnidiki et al., 2003; I.T.Iakubov et al., 2009; V.V. Samsonova et al., 2009]. Teknolojide süperparamanyetik malzemelerin geniş uygulama alanları mevcuttur [V.V. Samsonova et al., 2009; T.Neuberger et al., 2005; J.I.Martin et al., 2003; A.Heilmann, 2003; J.L.Wilson et al., 2004; D. Vollath et al., 2004].

Tez çalışması ağırlıklı olarak manyetizma ile ilgili olup tez dışındaki kaynaklara danışmaksızın da kolayca anlaşılabilmesi için malzemelerin manyetizması konusuna kısa bir giriş yapılacaktır. Bu hususta detaylı bilgilere ulaşmak için manyetizma hakkında çok sayıda kaynak mevcuttur [B. D. Cullity, 1972].

Serbest bir atomun manyetik momenti üç temel unsurdan oluşmaktadır: Elektronların doğal spin manyetik momentleri, elektronların atom çekirdeğine göre orbital manyetik momentleri ve dış manyetik alan etkisinde bulunduğu zaman atomun orbital manyetik momentinin değişimi. Bunlardan ilk ikisi *paramanyetik* özelliklerin üçüncüsü ise *diamanyetizmanın* kaynağıdır.

Bir maddenin mıknatıslanması birim hacimdeki manyetik momenti ile (mıknatıslanma vektörü **M**) ölçülür ve mıknatıslanma vektörü yardımcı alan **H** ile orantılıdır:

$$\mathbf{M} = \chi \mathbf{H} \quad (2.1)$$

Burada χ malzemenin manyetik duygunluğu (manyetik süseptibilite), **H** ise yardımcı alan vektörüdür.

Manyetik duygunluğu negatif olan maddeler *diamanyetik*, pozitif olanlar ise *paramanyetik* maddeler olarak adlandırılırlar. Diamanyetizma her maddede mevcut olmakla birlikte paramanyetik ve ferromanyetik maddelerde toplam mıknatıslanmaya katkısı çok düşük olduğundan ihmal edilebilir. Paramanyetik maddelerde atomlardan her biri sabit bir manyetik momente sahiptir fakat maddenin bir dış manyetik alan etkisi altında olmadığı durumda bu momentlerin rasgele yönlerde olmalarından dolayı her bir hacimde toplam manyetik moment sıfırdır. Madde bir manyetik alanın etkisinde olsa bile sıcaklık manyetik momentlerin yönlerini sürekli değiştirmektedir. Dolayısıyla mıknatıslanmanın ve manyetik duygunluğun değeri sıcaklığa bağlıdır. Manyetik duygunluk ise sıcaklıkla ters orantılıdır (Curie-Langevin yasası).

Ferromanyetik maddelerde elektronlar arasındaki Coulomb etkileşmesi, Pauli prensibi ve iletkenliği sağlayan serbest elektronlar komşu atomların spinlerinin arasında farklı bir tür etkileşmeye neden olmaktadır ve bu etkin etkileşmeye *exchange etkileşme* adı verilir. Exchange etkileşme maddenin türüne bağlı olarak artı ya da eksi işaretli olabilir. Bu etkileşme demir (Fe) ve kromdioksit (CrO₂) gibi maddelerde komşu atomların spinlerinin aynı yönde dizilmesine neden olurken demir oksit (FeO) ve kobalt oksit (CoO) gibi maddelerde komşu atomların spinleri zıt yönde dizilmektedir. Birinci tip maddelere *ferromanyetik*, ikinci tipten olanlara ise *anti*

ferromanyetik maddeler adı verilir. Exchange etkileşme atomların dipol-dipol etkileşmesine kıyasla çok daha etkilidir.

Maddelerde atomların manyetik momentlerinin birbirine göre dizilimleri oldukça basit fiziksel esaslara dayanır. Bir manyetik dipol ($\mathbf{m}$) bir manyetik alan ($\mathbf{B}$) içerisine yerleştirildiğinde bilindiği üzere dipole net bir kuvvet ve bir tork etki etmektedir:

$$\mathbf{F} = \nabla(\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}) \quad (2.2)$$

$$\boldsymbol{\tau} = \mathbf{m} \times \mathbf{B} \quad (2.3)$$

Atomların boyutları çok küçük olduğuna göre bir atomun bulunduğu konumda net manyetik alan homojen kabul edilebilir. Öte yandan atoma yalnızca manyetik kuvvet değil diğer kuvvetler de etki etmektedir. Dolayısıyla bir atoma etki eden manyetik kuvvet ihmal edilebilir fakat manyetik tork gözardı edilemez. Bir atomun dipol momentini yeteri kadar büyük ise bu dipolün manyetik alanının şiddeti de

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} \left(3 \frac{(\mathbf{m} \cdot \mathbf{r})\mathbf{r}}{r^2} - \mathbf{m} \right) \quad (2.4)$$

yeteri kadar büyüktür ve bu alanın komşu atomun dipol momentini üzerinde oluşturduğu tork iki komşu dipolü paralel duruma getirir.

Tabii bunun için dipoller arasındaki etkileşme enerjisinin atomların ortalama titreşim enerjisinden ($k_B T$) daha büyük olması gerekir ve bu da sıcaklığın yeteri kadar düşük olduğu durumlarda gerçekleşir. Aslına bakılırsa dipollerin paralel duruma gelmesine yalnızca dipol-dipol etkileşmesi değil exchange etkileşme de katkıda bulunur ve ferromanyetik maddelerde bu etkileşme dipol-dipol etkileşmesinden çok daha etkindir. Exchange etkileşme komşu atomların elektron orbitallerinin üst üste binmesi nedeniyle diğer dipol-dipol etkileşmelerine göre daha etkindir. Dolayısıyla ferromanyetik (veya antiferromanyetik) maddelerde dipollerin dizilimi meselesi ele alınırken komşu atomların dipol momentleri arasındaki etkileşme enerjisi ihmal

edilebilir zira bu tip maddelerde exchange etkileşme o kadar güçlüdür ki atomların dipol momentlerinin nerdeyse tamamını aynı yönde yönlendirir.

Paramanyetiklerde ise exchange etkileşme mevcut olmadığından dolayı bu tür malzemeler sürekli mıknatıslık özelliğine sahip olamazlar.

Ferromanyetik bir maddenin mıknatıslanmasının sıcaklığa bağılılığı yaklaşık olarak

$$M(T) = M(0) \left(1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{\frac{3}{2}} \right) \quad (2.5)$$

ifadesiyle verilir.

Bu ifadede $M(0)$; $T=0$ sıcaklıktaki mıknatıslanma, T_c ise bir sabittir. $T=T_c$ sıcaklıkta $M=0$ olmaktadır. Bu özel sıcaklık değerine Curie sıcaklığı adı verilir. Curie sıcaklığının mevcudiyetinin sebebi son derece açıktır zira kaotik ısı hareketler bir domain içindeki dipollerin dizilimini bozmaya çalışır fakat sıcaklık çok yüksek değilse dipollerin dizilimini bozamaz. Çok yüksek sıcaklıklarda ise yalnızca dipol düzeni değil kristal yapı da bozulabilir. Dolayısıyla düzenli durumdan düzensiz duruma geçişin gerçekleştiği bir sıcaklık kesinlikle var olmalıdır ve bu sıcaklık değeri de Curie sıcaklığı olarak isimlendirilir.

2.2 Nano Manyetikler ve Nano Kompozit

Manyetik Modeller

Nano teknoloji son yıllarda fizik, kimya, biyoloji ve mühendislik gibi bilim dallarında en çok ilgi çeken önemli konulardan biri haline gelmiş olup yakın gelecekte teknolojik gelişmelere yön verme ve geniş kullanım alanlarına yayılma konusunda ümit vaad etmektedir [C.P.Poole and Jr., F.J.Owens, 2003] .

Eğer belli sayıda molekülünden oluşan küresel bir parçacığın yarıçapı 100nm civarında ise bu parçacık nanoparçacık olarak kabul edilir ki $1\text{nm}=10^{-9}\text{m}=10\text{\AA}$ olduğuna göre bu yarıçap yaklaşık olarak $1000\text{\AA}$ 'dur. Örneğin yarıçapı 1nm olan bir

klaster yaklaşık 25 molekül içerir fakat moleküllerin çoğu klasterin yüzeyinde bulunmaktadır. Dolayısıyla nanoparçacık tanımını yalnızca klasterin boyuna bakarak yapmak isabetli bir karar olmayacaktır zira bu tanıma göre gerçekte moleküler klaster ile nanoparçacık arasındaki farkı anlamak zordur.

Bir nanoparçacığın atomların birer birer bir araya getirilmesi veya bulk bir maddenin parçalanması sureti ile üretilmesi mümkündür. Genelde büyük nanoparçacıkların moleküler yapısı maddenin bulk durumdaki yapısıyla aynıdır yalnızca kristal örgünün parametreleri ve enerji yapısı biraz farklı olabilir. Mesela, metal atomları bir kristal oluşturdıklarında enerji seviyelerinde enerji bandı adı verilen yapı ortaya çıkar (zira atom sayısı çok fazladır). Fakat maddedeki atom sayısının bir nanoparçacığın atom sayısına eşit olduğu durumda iletkenlik elektronlarının enerji bandı bulk maddenin bant yapısına göre çok farklı olmaktadır. Nanoparçacıkların elektronik yapısının bulk maddeye göre değişmesiyle birlikte manyetik özellikleri de değişmektedir. Ferromanyetik malzemelerde bulunan her bir atom bir dipol momentine sahiptir ve nanoparçacıktaki atomların momentlerinin etkileşmesi sebebiyle (exchange etkileşme) bütün atomların manyetik momentleri birbirine paralel duruma gelmekte ve nanoparçacık sürekli bir mıknatıs olmaktadır. Sonuç olarak nano kompozit malzemelerin manyetik özellikleri bulk malzemelere göre oldukça farklıdır. Nano kompozit malzemelerdeki nano manyetik parçalar tek domainden oluşmakta ve komşu domainler birbirlerinin atomik spinlerini nerdeyse hiç etkilememektedirler.

San_Tez Proje No 00185. STZ.2007-2'in çalışmasında incelenen nano kompozit manyetik malzeme manyetik olmayan bir dielektrik ortamda bulunan çok küçük (nano boyutta) ferromanyetik toz parçacıklardan oluşmaktadır. Manyetik özellikler bakımından incelendiğinde bu rastgele oluşmuş bir manyetik dipol sistemidir ve gerek parçacıkların boyutu gerekse aralarındaki mesafe parçacıktan parçacığa farklılık göstermektedir. Dış manyetik alanın sıfır olduğu durumda nano parçacıklar arasındaki etkileşmeler yalnızca yüksek seviyede anizotropik çekme veya itme türünden dipol-dipol etkileşmeleridir. Etkinin çekme veya itme şeklinde gerçekleşmesi dipollerin birbirine göre yönelimine bağlıdır. Dış manyetik alanın bulunmadığı durumlarda, Ertuğrul Bolcal'ın doktora tezinde [Ertuğrul Bolcal, 2011]

Monte Carlo (MC) [Metropolis, N. and Ulam, S., 1949; K. Binder and D.W.Heermann, 1997; J.P Hansen and I.R.McDonald, 1985; H.Möller-Krumbhaar and K.Binder, 1973], Moleküler Dinamik (MD) ve Statik Relaksasyon (SR) [G.C. Matland et al., 1985; L.Verlet, 1967; J.M. Halle, 1992; M.P.Allen and D.J. Tildesley, 1987; D.C. Rapaport, 1995] simülasyon yapılan hesaplara göre dipoller arasında kısa mesafeli düzenlerin oluştuğu gözlenmektedir. Bu düzenin şekli sıcaklığa, parçacıkların boyuna (dipol momentine) ve aralarındaki uzaklıklara bağlıdır.

Dış manyetik alan söz konusu olduğunda ise dipollerle alan arasındaki etkileşimler ilginç sonuçlara yol açmaktadır. Manyetik alan şiddetinin düşük olduğu durumlarda kompozit malzemenin manyetik özelliklerinin genel olarak homojene yakın olduğu gözlenmektedir fakat manyetik alan şiddetinin yüksek olduğu durumlarda malzemenin manyetik özellikleri homojenlikten uzaklaşmaktadır ve bu özellikler henüz pekiyi açıklanabilmiş değildir. Doğal olarak dış manyetik alan şiddetinin çok yüksek olduğu durumlarda bütün dipoller alan yönünde yönelmekte ve malzemenin mıknatıslanması doyum durumuna gelmektedir. Söz konusu olan doktora tezinin üç boyutlu modellerde bulunan bazı sonuçları, örnek olarak, aşağıdaki grafiklerde verilmiştir.

Sistemin sıcaklığının sıfır Kelvine yakın olduğu durumlarda sistemin serbest enerjisi ve iç enerjisi birbirine eşit olur. Bu nedenle sistem sıfır sıcaklıkta termodinamik dengeye geldiğinde sistemin iç enerjisi minimum duruma gelir (*temel durum*). Dolayısıyla enerjinin minimum olduğu durumu bulmak termodinamik denge durumunu da tespit etmek anlamına gelmektedir.

Tez çalışmasının temel amacı $T=0$ sıcaklıkta kompozit bir ferromanyetik-dielektrik malzemenin manyetik özelliklerinin incelenmesidir. Bu amaç doğrultusunda sadece *‘örgü’* adlı iki ve üç boyutlu basit küp ve kare modelleri kullanılmaktadır. Örgü modelinde nano parçacıklar bir küp (veya kare) kristal örgünün latis noktalarına yerleştirilirler ve her bir parçacığın manyetik momenti aynıdır (modelde bu moment birim olarak alınıyor). Bu yöntem basit olmasına rağmen dipol sistemin temel davranışını göstermektedir.

Sistemin temel durumunu tespit etmek için tez çalışmasında Statik Relaksasyon Metodu (SRM) adı verilen orijinal bir metot, Ertuğrul Bolcal ile birlikte, tasarlanmıştır.

Tez çalışmasında, model cisimlerin konumu giriş datası olarak verilmesi suretiyle oluşturulur. Dipol-dipol etkileşmesi uzun mesafeli olduğu için modelde her iki dipolün etkisi üzere alınır, dolayısıyla model boy açısından sınırlı fakat yaklaşık değildir. Çalışmada genellikle iki boyutlu, kristal yapısı kare şeklinde olan modeller incelenmiştir. Bilgisayar programı her bir nano parçacığın konumunu, manyetik momentini ve komşu dipollerin numaralarını (komşu listesi) hesaplar. Modeldeki manyetik dipollerin konumları ($\mathbf{r}_i$) ileri adımlardaki programlarda sabit data şeklinde kullanılmak üzere kayıt altına alınır. Her bir i konumda büyüklüğü m_i olan ve yönelimi tüm dipol sisteminin termodinamik durumuna bağlı olan bir manyetik dipol bulunmaktadır. Esasen dipol sistemi dinamik bir sistem olup her bir dipolün yönelimi zaman içinde kaotik bir şekilde değişmektedir ve sistemin termodinamik özelliklerini hesaplamak için istatistik fiziğin yöntemlerini kullanmak gerekir. İncelenen sistem genel durumda herhangi doğrultuda yönelmiş bulunan homojen bir manyetik alanın etkisi altında bulunmaktadır. Bu durumda i . ve j . konumlarda bulunan spinler arasındaki etkileşme potansiyel enerjisi aşağıdaki ifadeyle verilmektedir:

$$\varepsilon_{ij} = -\frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} \left[3(\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{e}_{ij})(\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{e}_{ij}) - (\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{m}_i) \right] \quad (2.6)$$

Sistemin Hamiltoniyeni ise

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} \left[3(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{e}_{ij})(\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{e}_{ij}) - (\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{m}_i) \right] - \mathbf{B} \cdot \sum_{i=1}^N \mathbf{m}_i \quad (2.7)$$

şeklinde dir. Burada, $\mathbf{m}_i$, $\mathbf{R}_i$, μ_0 ve $\mathbf{B}$ sırasıyla modelin i . noktasında bulunan spinin manyetik momenti, konum vektörü, boşluğun manyetik geçirgenliği ve dış manyetik

alandır. $r_{ij} = |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|$, i . spin ile j . spin arasındaki uzaklık, $\mathbf{e}_{ij} = \frac{\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i}{r_{ij}}$ ise i . spinden j .

spine yönelik olan birim vektördür.

Bilgisayarda hesapların daha kolay yapılması için denklem (4.3)'ün boyutsuz şekilde yazılması uygundur. $\mathbf{m}_i = m_i \mu_B \mathbf{e}_i$ ve $r'_{ij} = r_0 r_{ij}$ değişken dönüşümü yapıldığında (burada r_0 en yakın komşu spinlerin arasındaki mesafedir) Hamiltonyen $H = E_0 h$ şeklinde yazılır.

$$h = -\frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{m_i m_j}{r_{ij}^3} \left[3(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_{ij})(\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{e}_{ij}) - (\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{e}_i) \right] - \mathbf{b} \cdot \sum_{i=1}^N \mathbf{e}_i, \quad (2.8)$$

$$E_0 = \frac{\mu_0 \mu_B^2}{4\pi r_0^3}; \quad b = \frac{B \mu_B}{E_0} \quad (2.9)$$

Bu ifadelerde E_0 birim enerji, μ_B Bohr Magnetonu'dur. Yukarıdaki ifadenin birinci terimi bütün spin çiftleri arasındaki etkileşme potansiyel enerjisi, ikinci terim ise spinlerin düzgün dış manyetik alanla etkileşmesinden ileri gelen enerjidir. Dipollerin konumları $\{\mathbf{r}_i\}_{i=1}^N$ verildikten sonra i. ve j. parçacıklar arasındaki fark vektörlerinin doğrultman kosinüsleri

$$\begin{cases} \cos \alpha_{ij} = \frac{(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) \cdot \mathbf{e}_x}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|} \\ \cos \beta_{ij} = \frac{(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) \cdot \mathbf{e}_y}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|} \\ \cos \gamma_{ij} = \frac{(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) \cdot \mathbf{e}_z}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|} \end{cases} \quad (2.10)$$

ve cisimler arasındaki etkileşme parametresi

$$J_{ij} = \frac{m_j \cdot m_i}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|^3} \quad (2.11)$$

modelin sabit parametreleri olmaktadır. Yani $J_{ij} = \frac{m_j \cdot m_i}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|^3}$ ve

$\mathbf{e}_{ij} = \cos \alpha_{ij} \mathbf{e}_x + \cos \beta_{ij} \mathbf{e}_y + \cos \gamma_{ij} \mathbf{e}_z$ daha önce hesaplanan sabitlerdir.

Sıfır Kelvin sıcaklıktaki minimum enerji durumu sistemin denge durumudur. Bu duruma *temel durum* adı verilir ve sistemin özelliklerinin incelenmesi hususunda önemli bir yere sahiptir. Denge durumunda her bir dipole etki eden moment (torque),

$$\boldsymbol{\tau}_i = \mathbf{e}_i \times \left[\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{1}{r_{ij}^3} [3(\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{e}_{ij}) \mathbf{e}_{ij} - \mathbf{e}_j] + \mathbf{b} \right] \quad (2.12)$$

sıfır olmak zorundadır.

Genel olarak SR metodu çok değişkenli bir fonksiyonun maksimum (veya minimum) değerinin bulunması için kullanılan sayısal bir yöntemdir. Bir fonksiyonun bir konumda maksimum (veya minimum) olması için bu noktada gradyentinin sıfır olması gerekir.

$$\nabla f(x_1, x_2, \dots, x_N) = 0. \quad (2.13)$$

Değişken sayısı N arttıkça bu denklem çözümü hiç de kolay olmayan bir problem haline gelir. En basit durumlar haricinde bu denklemin analitik şekilde çözülmesi mümkün değildir. Fakat fizik ve matematik alanında bu tip denklemlerle çok sık karşılaşıldığından dolayı uygulamalı matematikte çözüm için farklı sayısal yöntemler oluşturulmuştur ve FORTRAN, C gibi programlama dillerinde yazılmış standart programlar bulunmaktadır. Ne var ki bu standart programlar değişken sayısı N arttıkça her denklemi çözümleyemez. Çözülse dahi elde edilen çözüm var olan birçok sayıda çözümden biridir. Programın hangi çözüme ulaşacağını önceden söylemek mümkün değildir zira bulunan çözüm değişkenlerin ilk değerleri $(x_{1i}, x_{2i}, \dots, x_{Ni}) = 0$, çözümün esası, programın algoritması gibi faktörlere bağlıdır.

N dipolden oluşan bir sistemin durumunu gösteren genelleştirilmiş koordinatlar dipollerin birim vektörleridir. SRM simülasyonunda sistemin başlangıç durumu her hangi bir rastgele durumdur ve sonrasında bir iterasyon prosedürünün başlatılması suretiyle her bir parçacığa etki eden tork Denk.(2.12)'ye göre hesaplanır. Tork hesaplandıktan sonra dipol tork boyunca bilinen (çok küçük, 0.01-0.001 gibi) bir büyüklükte açığa kadar döndürülür. Bundan sonra sırasıyla diğer parçacıkların birim vektörleri aynı şekilde değiştirilir. Bu süreçte bütün parçacıkların sırayla işleme tabi tutulması bir iterasyon adımının gerçekleşmesi anlamına gelmektedir.

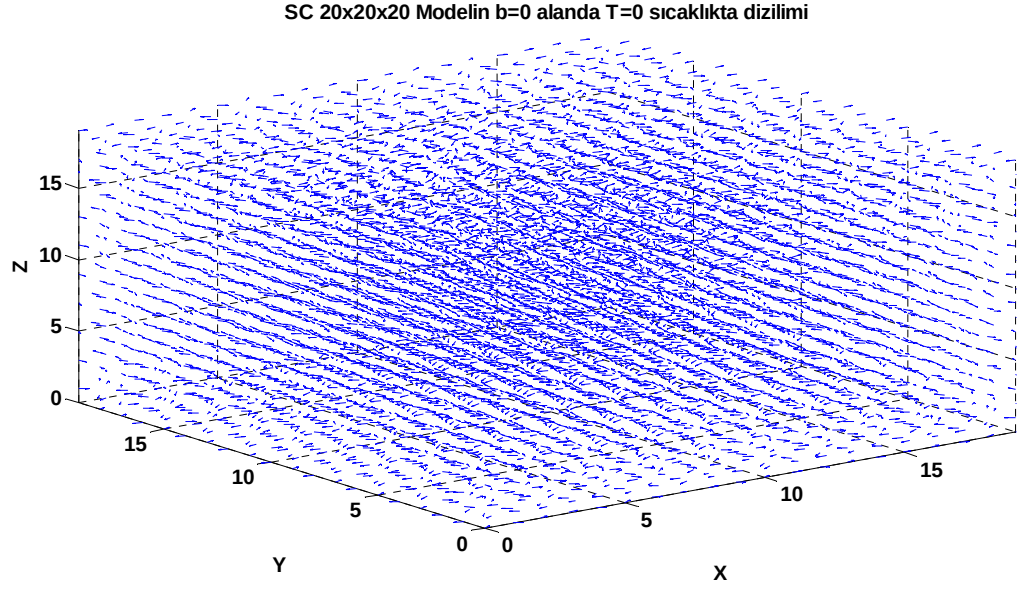
2.3. Kristal Yapılı Üç Boyutlu Modeller

Söz konusu olan doktora tezinde [Ertuğrul Bolcal, 2011] fazla sayıda farklı yapıli sistemlerin incelenmiştir ve burada örnek olarak yalnızca basit kübik (SC) kristal örnek verilmektedir.

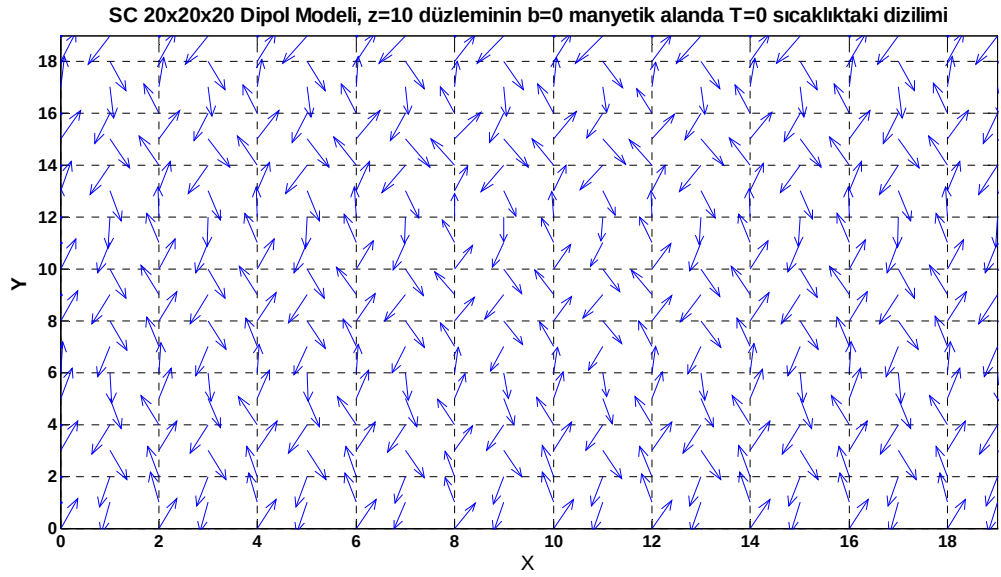
Bu sonuçlara göre dipol-dipol etkileşmesinin en büyük özelliği ferromanyetik ve antiferromanyetik olarak adlandırılan ikili davranışdır. Nanoparçacıkların bir doğrultu boyunca dizildikleri durumda dipol momentleri bu doğruya paralel (ferromanyetik düzen) birbirine paralel iki doğrultuda dizildikleri durumda ise ikinci doğrultudaki momentler zıt yöndedir (antiferromanyetik düzen).

Üç boyutlu nano manyetik sistemde ise durum oldukça karışık olmasına rağmen bir düzen mevcuttur. Hansen ve Morup'a göre [M.F. Hansen, et al.,1998] bir manyetik dipol sistemi belli bir sıcaklıkta SPM, düzensiz durumdan spin glass (SG) daha düzenli bir duruma geçiş yapmaktadır. Aynı zamanda, Dorman'a göre [J.L.Dormann and D.Fiorani, 1992; J.L. Dormann et al., 1988; S. Morup and E. Tronc, 1994; J.L. Dormann et al., 1997; J.L. Dormann et al., 1999;] manyetik dipol sisteminin düzenli bir durumunun olduğu ispatlanabilmiş değildir. Deneyde ise bir düzenin mevcut olduğu izlenimini oluşturan durumlar gözlenmektedir. Sıcaklığın

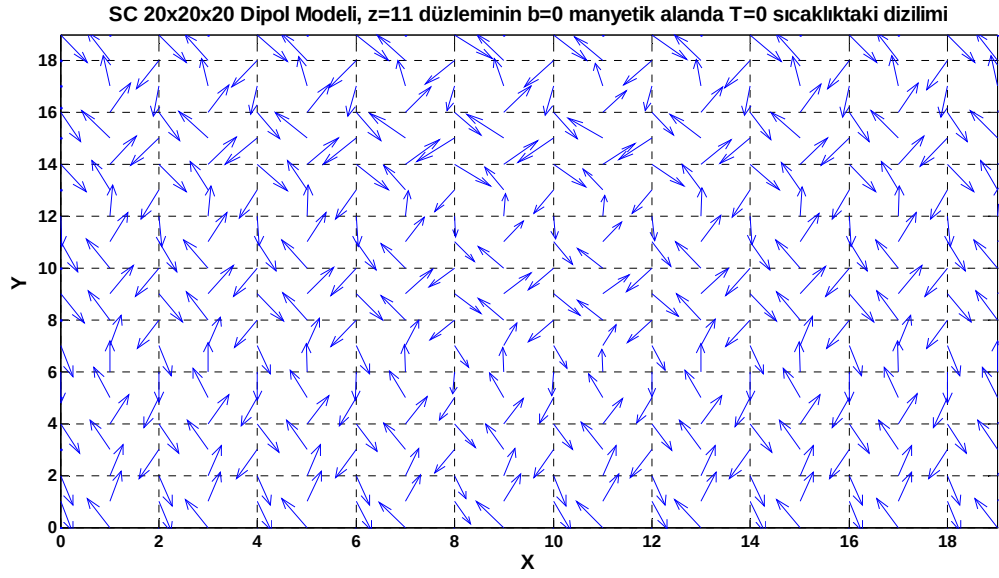
artmasıyla sistem düzensiz hale geliyor olsa da SC modeli her sıcaklıkta tam bir süper paramanyetiktir.



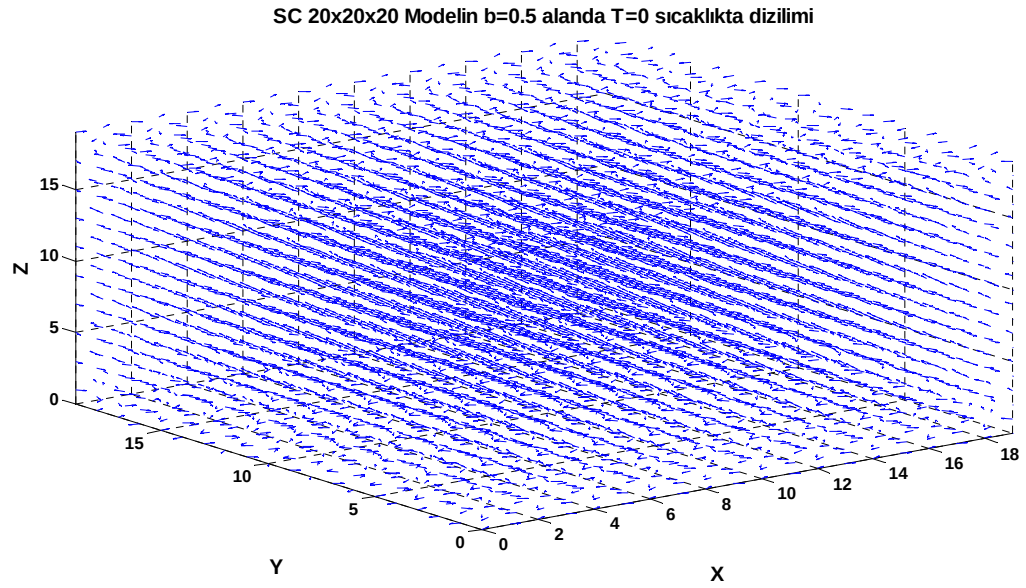
Şekil 2.1 (a-c). SC 20x20x20 modelin $b=0$ alanda temel durumu [Ertuğrul Bolcal, 2011] (a)



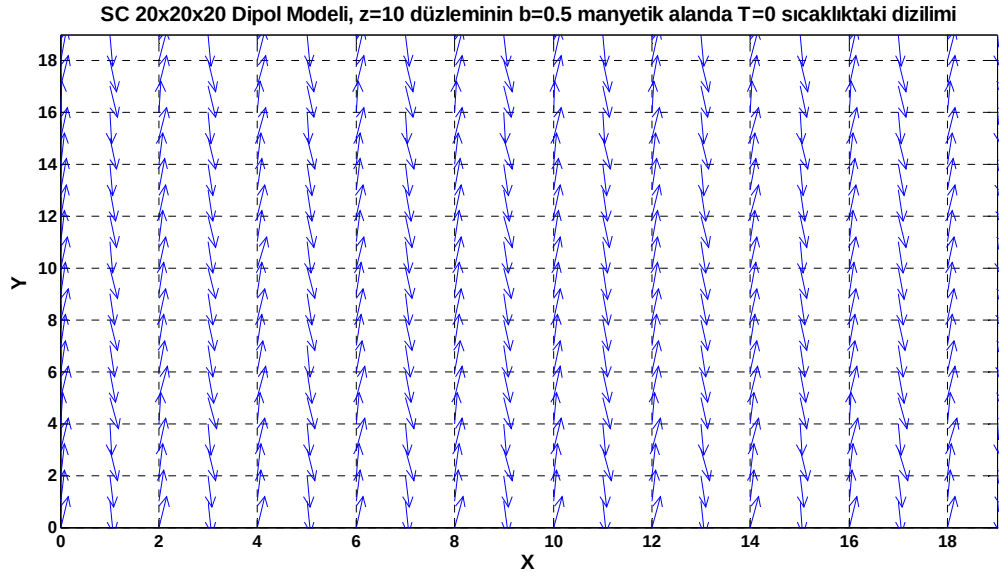
Şekil 2.1 (b)



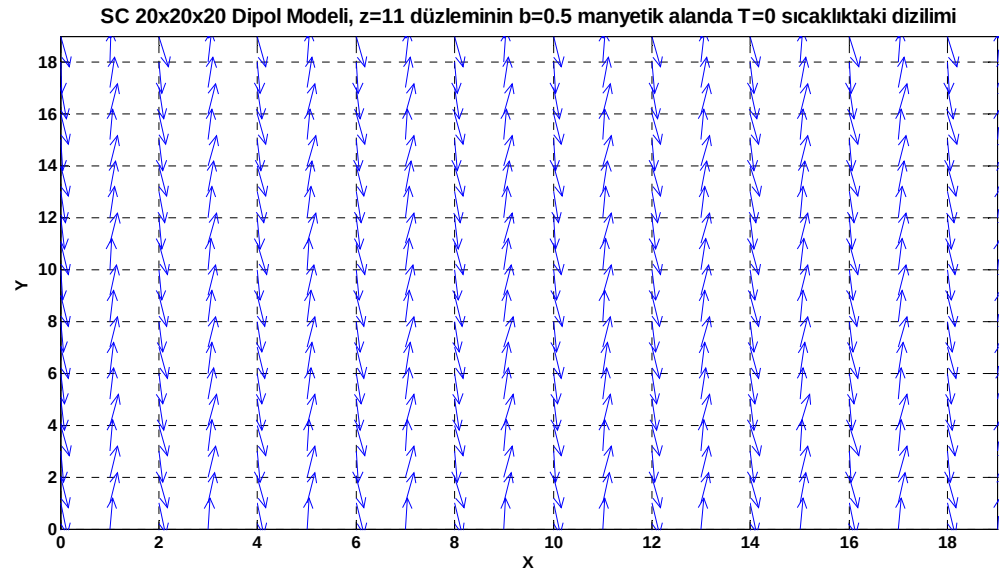
Şekil 2.1 (c)



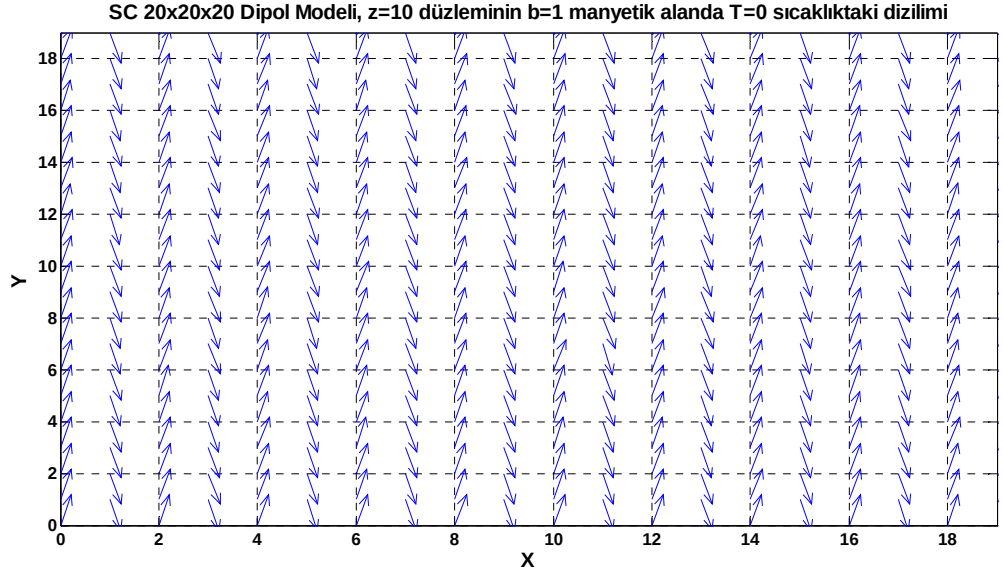
Şekil 2.2(a-g). SC 20x20x20 modelin manyetik alanda temel durumu [Ertuğrul Bolcal, 2011](a)



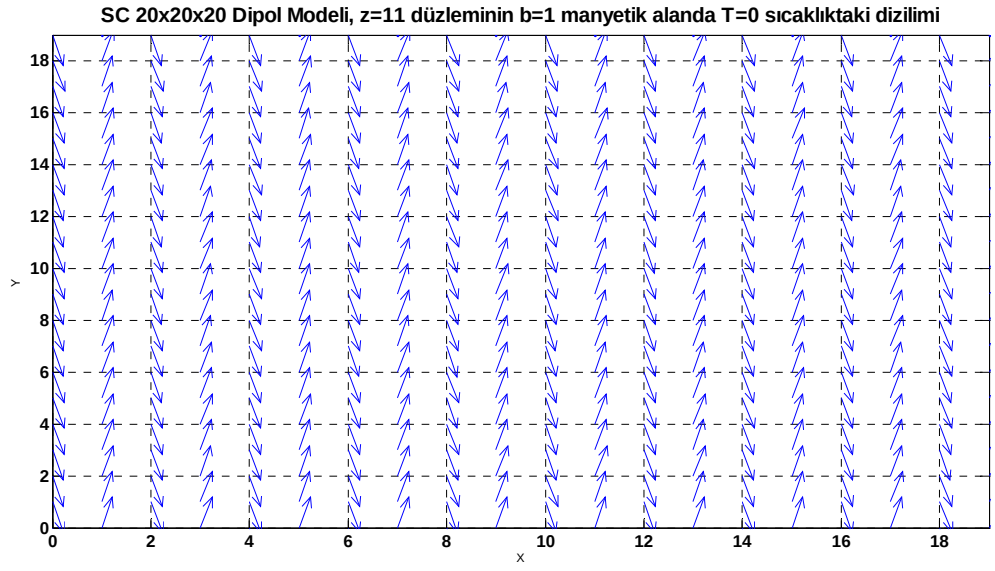
Şekil 2.2 (b)



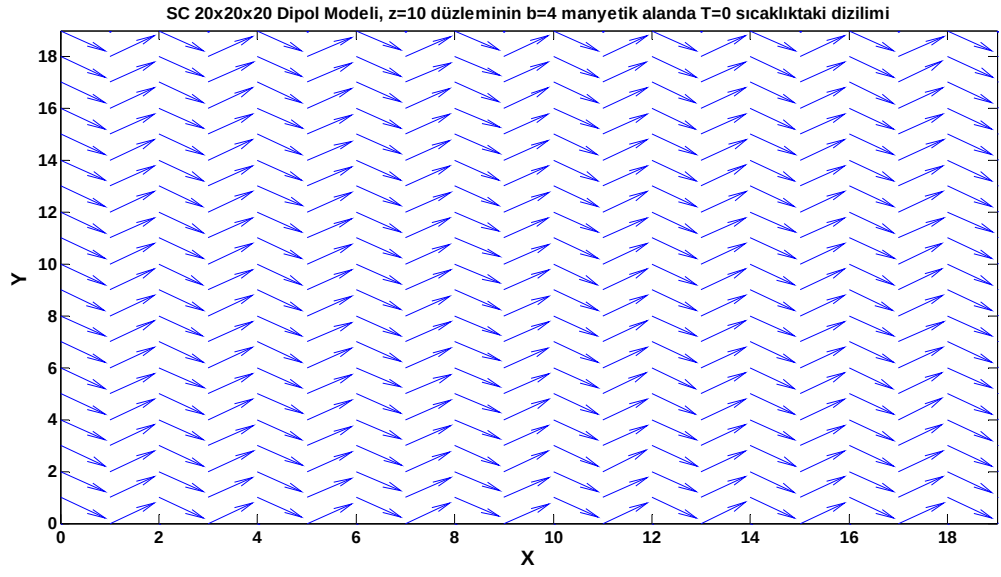
Şekil 2.2 (c)



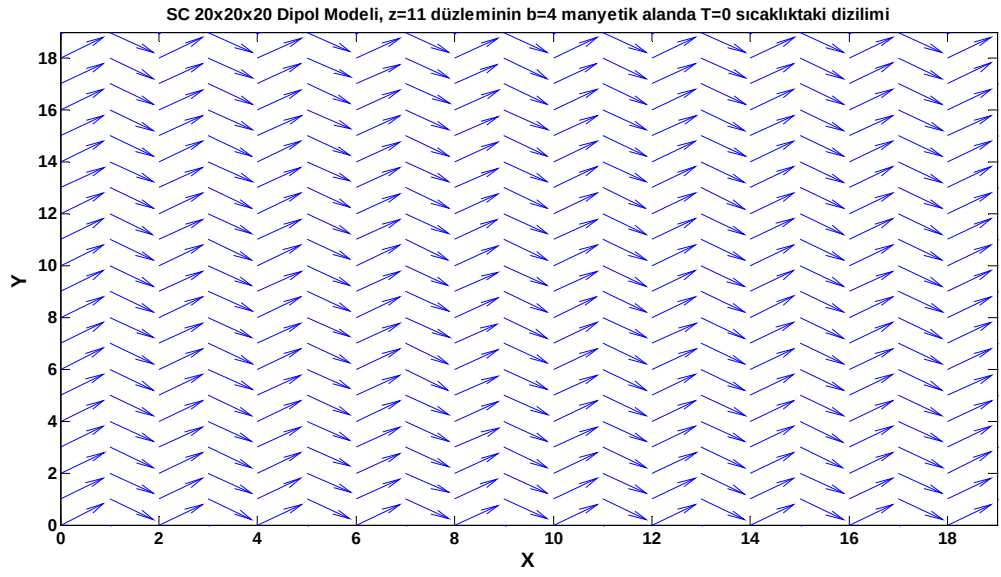
Şekil 2.2 (d)



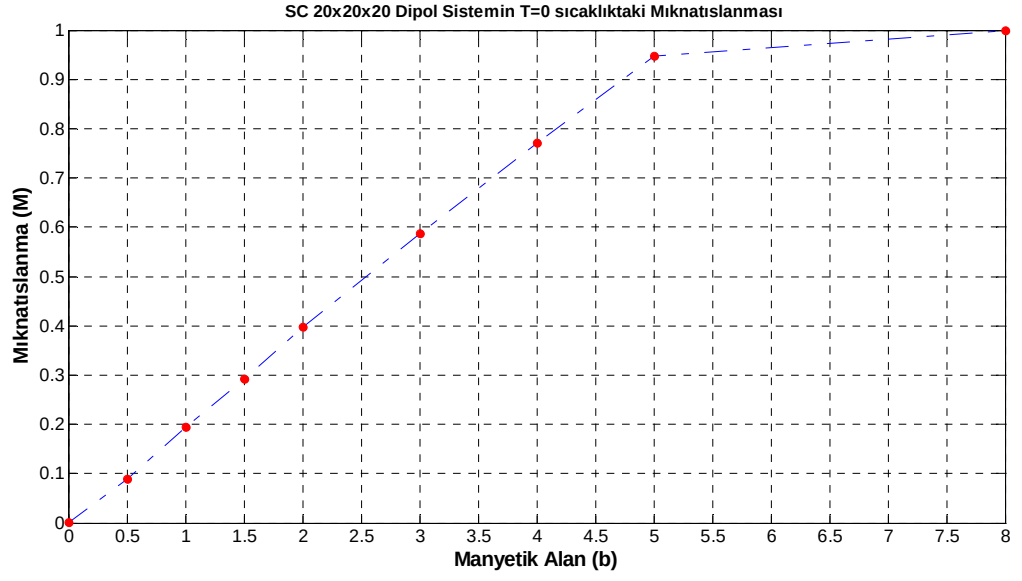
Şekil 2.2 (e)



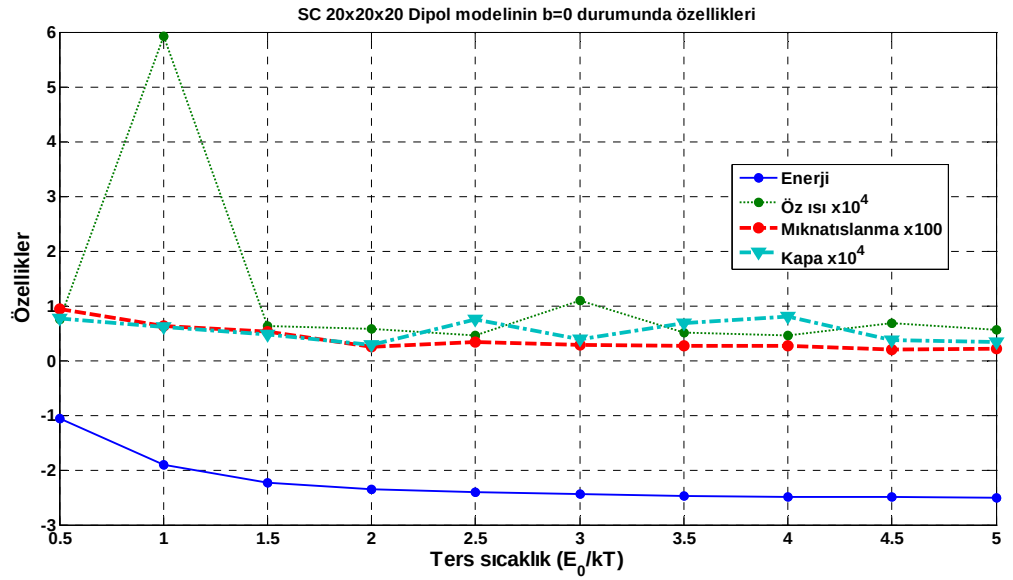
Şekil 2.2 (f)



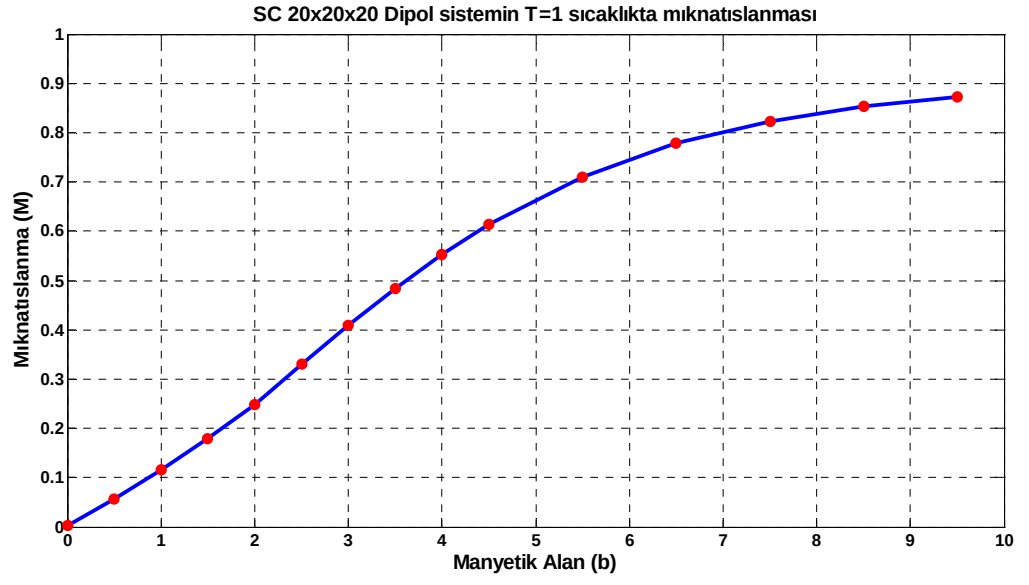
Şekil 2.2 (g)



Şekil 2.3. SC 20x20x20 modelin T=0 sıcaklıkta mıknatıslanma eğrisi [Ertuğrul Bolcal, 2011]



Şekil 2.4. SC 20x20x20 modelin sıfır manyetik alanda sıcaklığa bağlı olan özellikleri.[Ertuğrul Bolcal, 2011]



Şekil 2.5. SC 20x20x20 modelin mıknatıslanma eğrisi [Ertuğrul Bolcal, 2011]

3. İKİ BOYUTLU NANO KOMPOZİT MANYETİK MODELİN TEMEL DURUMU

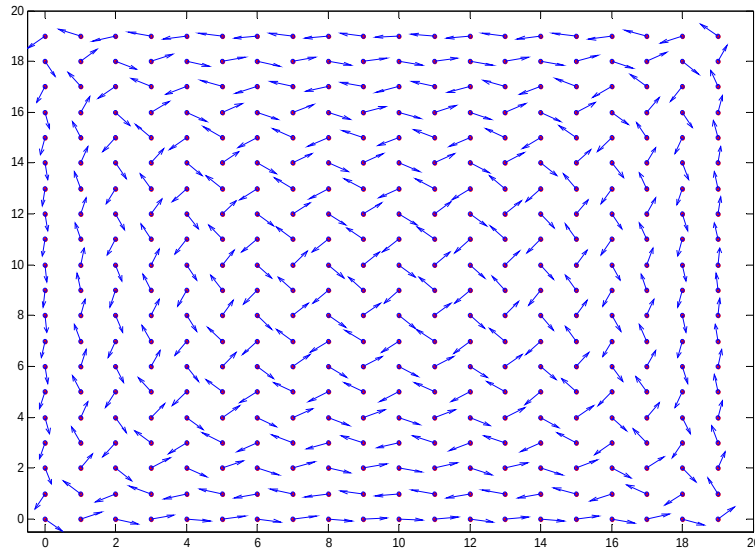
3.1. Dipol Manyetik Modellerinde Sınır Koşulların Etkisi

Nano yapılı malzemede bulunan bir nanoparçacığın manyetik momentinin davranışını daha sağlıklı anlamak için öncelikli olarak manyetik sistemin temel durumunun (sıfır Kelvin derecede) incelenmesi gerektir. Söz konusu olan doktora tezinde [Ertuğrul Bolcal, 2011] bu araştırma yapılmıştır fakat modelin boyu sınırlı olduğu için pratiğe en yakın olan periyodik koşulları kullanılmıştır. Fakat bu koşulları kullanıp ister istemez dipollerin etkileşme mesafesini modelin en fazla yarı uzunluğuna kadar alabiliriz, yani etkileşmeleri yapay olarak kısa mesafeli yapmak zorundayız. Modellerin tam çözümü olmadığı için ve modele karşı tam bir deney olmadığına göre dipol-dipol etkileşme mesafesini kısaltmak ne kadar salıklı olduğunu kimse bilemez. Dolayısıyla bu tezin esas amacı bir modelin tam çözümünü bulmak ve etkileşme mesafen en az ne kadar olduğunu öğrenmektir.

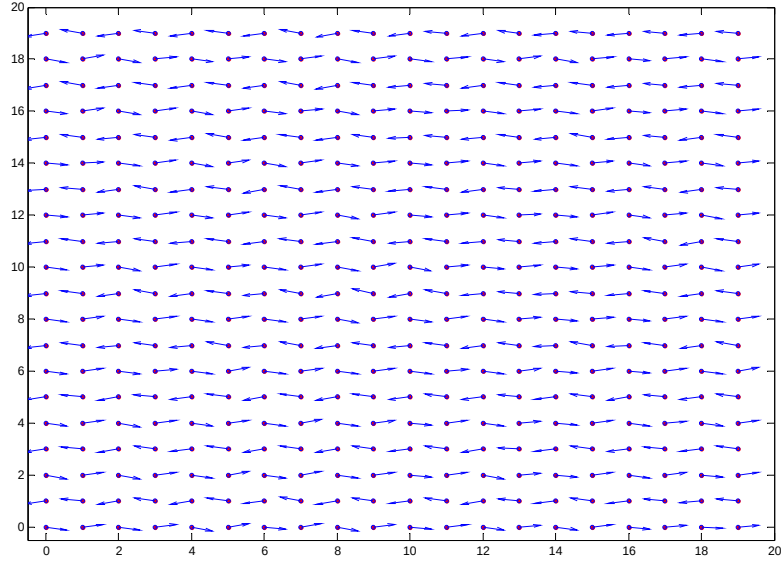
Uç boyutlu modelin dizilimini grafiksel olarak göstermek çok uygun değildir, dolayısıyla sınır koşulların etkisini daha net görmek için burada sıfır sıcaklıkta iki boyutlu model incelenmiştir. Önce, SR yöntemini kullanarak iki ‘büyük’ (20x20 dipol) modelin yapısına bakalım: Şekil 3.1 sınırları serbest ve dipol-dipol etkileşme esas olarak alınmış olan modelin yapısı verilmiştir. Bu yapı modelin temel durumudur (minimum enerji durumu), bu yapıya göre dipoller mükemmel bir girdap sistemi oluşturmaktadır. Modelin sınırından başlayıp dipoller zincir şeklinde bir döngü oluşturmaktadır. Dışardan içeriye doğru ikinci döngünün dizilim yönü dış döngünün dizilim yönüne ters, çevresi ise dış döngünün çevresinden daha küçüktür. Bu sıralama

modelin merkezine kadar sürdürülmektedir. Böyle bir yapının mükemmel dizilime rağmen mıknatıslanması sıfırdır çünkü dizilim anti ferromanyetik cinsindendir.

Modelin sınır koşulları periyodik olduğunda (ve etkileşme mesafe en fazla 10 birimdir) anti ferromanyetik dizilim korunuyor, yukarıdaki döngüler bir yönden darlaşıp sonsuza kadar uzamaktadır. Modelde bu dizilim anti paralel doğrusal zincir olarak gözlenmektedir (Şekil 3.2). Sonuçlara göre bu iki model bir birinden çok farklıdır. Sınır koşulları ne kadar etkilidir hemen ortaya çıkıyor. Dolayısıyla modelleri deney ile değil bir biriyle bile zor karşılaştırabiliriz, yani elimizde sağlam bir referans temel durumu olmalıdır ve bunu analitik ve tam bulmak tezin en büyük amacıdır ve bilime katkısıdır.



Şekil 3.1. SC 20x20 dipol sistemin sıfır sıcaklıkta dipol dizilimi (sınır koşulu uygulanmamıştır)



Şekil 3.2. SC 20x20 dipol sistemin sıfır sıcaklıkta dipol dizilimi (periyodik sınır koşulu uygulanmıştır)

3.2. İki Boyutlu Kare Dipol Modelin Esas Temel

Durumu

İlk adım olarak iki dipolden oluşan bir sistemin denge ve temel durumuna bakalım. Birinci spini koordinat sistemin başlangıç noktasında, spinlerin arasındaki mesafeyi birim olarak, x eksenin yönünü ise birinci cismin yönü boyunca, ikinci spini ise (0,1) konumda alalım: yani

$$\begin{cases} \mathbf{m}_1 = \mathbf{i} \\ \mathbf{m}_2 = \mathbf{e}_2 \\ \mathbf{e}_{12} = \mathbf{i} \end{cases} \quad (3.1)$$

Buna göre ikinci cisme etki eden tork ve bulundu konumda manyetik alan sırasıyla

$$\boldsymbol{\tau}_2 = \mathbf{e}_2 \times [3(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{i})\mathbf{i} - \mathbf{e}_1] = 2\mathbf{e}_2 \times \mathbf{i} \quad (3.2)$$

$$\mathbf{b}_2 = [3(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{i})\mathbf{i} - \mathbf{e}_1] = 2\mathbf{i} \quad (3.3)$$

eşittir. Dipolun kararlı dengede olması için yönü ve manyetik alan aynı yönde olmalıdır, yani

$$\mathbf{m}_2 = \mathbf{e}_2 = \mathbf{i} . \quad (3.4)$$

Bu durumun enerjisi

$$\varepsilon = -[3(\mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{i})(\mathbf{m}_2 \cdot \mathbf{i}) - (\mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{m}_2)] = -2 \quad (3.5)$$

İki dipoldan oluşan sistemin daha bir seçeneği bulunmaktadır:

$$\begin{cases} \mathbf{m}_1 = \mathbf{i} \\ \mathbf{m}_2 = \mathbf{e}_2 \\ \mathbf{e}_{12} = \mathbf{j} \end{cases} \quad (3.6)$$

Dolayısıyla

$$\begin{cases} \boldsymbol{\tau}_2 = \mathbf{e}_2 \times [3(\mathbf{i} \cdot \mathbf{j})\mathbf{j} - \mathbf{i}] = -\mathbf{e}_2 \times \mathbf{i} \\ \mathbf{b}_2 = [3(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{j})\mathbf{j} - \mathbf{e}_1] = -\mathbf{i} \end{cases} \Rightarrow \mathbf{m}_2 = -\mathbf{i} = -\mathbf{m}_1 \quad (3.7)$$

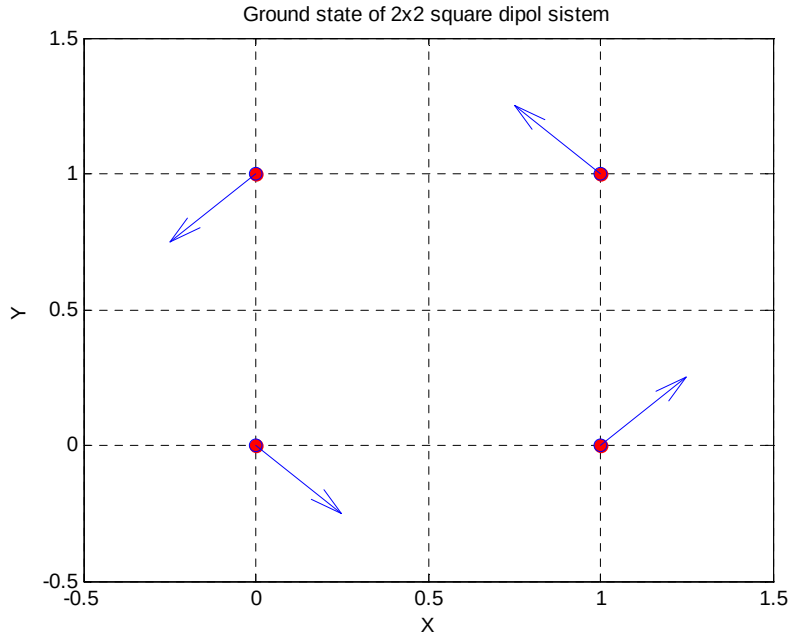
$$\varepsilon = -[3(\mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{j})(\mathbf{m}_2 \cdot \mathbf{j}) - (\mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{m}_2)] = -1 \quad (3.5)$$

Sonuç olarak iki dipolden oluşan bir sistemin iki kararlı denge durumu bulunmaktadır: paralel ve anti paralel, fakat 2.durumun enerjisi daha yüksek olarak yarı kararlı durum olarak geçecektir.

İki boyutlu kare modelin en düşük boyunu (2x2) inceleyelim. SR simülasyona göre sistemin durumu aşağıdaki Şekil 3.3 gibidir. Bu sistem kararlı denge durumunda olduğu analitik olarak ta gözlenmektedir. Bunu ispatlamak için dipolların konumlarını ve değerlerini sırasıyla yazalım:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{m}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, -1); \quad \mathbf{r}_1 = (0, 0) \\ \mathbf{m}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, 1); \quad \mathbf{r}_2 = (1, 0) \\ \mathbf{m}_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}(-1, 1); \quad \mathbf{r}_3 = (1, 1) \\ \mathbf{m}_4 = \frac{1}{\sqrt{2}}(-1, -1); \quad \mathbf{r}_4 = (0, 1) \end{array} \right. \quad (3.7)$$

Bu verilere göre 1.dipolun olduğu konumda manyetik alanını hesaplayalım:



Şekil 3.3. 2x2 Dipol sistemin temel durumu.

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= \left(\frac{3(\mathbf{m}_2 \cdot \mathbf{r}_2)\mathbf{r}_2}{r_2^5} - \frac{\mathbf{m}_2}{r_2^3} \right) + \left(\frac{3(\mathbf{m}_3 \cdot \mathbf{r}_3)\mathbf{r}_3}{r_3^5} - \frac{\mathbf{m}_3}{r_3^3} \right) + \left(\frac{3(\mathbf{m}_4 \cdot \mathbf{r}_4)\mathbf{r}_4}{r_4^5} - \frac{\mathbf{m}_4}{r_4^3} \right) \Rightarrow \\ \sqrt{2}\mathbf{b}_1 &= (2\mathbf{i} - \mathbf{j}) + \frac{1}{2\sqrt{2}}(\mathbf{i} - \mathbf{j}) + (\mathbf{i} - 2\mathbf{j}) = \left(\frac{1+6\sqrt{2}}{2\sqrt{2}} \right)(\mathbf{i} - \mathbf{j}) = \left(\frac{1+6\sqrt{2}}{2} \right)\mathbf{m}_1 \Rightarrow \\ \mathbf{b}_1 &= \left(\frac{1+6\sqrt{2}}{2\sqrt{2}} \right)\mathbf{m}_1 \end{aligned} \quad (3.8)$$

Simetriye göre

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{b}_1 = \left(\frac{1+6\sqrt{2}}{2\sqrt{2}} \right) \mathbf{m}_1 \\ \mathbf{b}_2 = \left(\frac{1+6\sqrt{2}}{2\sqrt{2}} \right) \mathbf{m}_2 \\ \mathbf{b}_3 = \left(\frac{1+6\sqrt{2}}{2\sqrt{2}} \right) \mathbf{m}_3 \\ \mathbf{b}_4 = \left(\frac{1+6\sqrt{2}}{2\sqrt{2}} \right) \mathbf{m}_4 \end{array} \right. \quad (3.9)$$

Denk.(3.9) göre her bir dipol (dolayısıyla tüm sistem de) kararlı dengede olduğu gözlenmektedir, sistemin enerjisi ise

$$E = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^4 \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{b}_i = -2 \left(\frac{1+6\sqrt{2}}{2\sqrt{2}} \right) = -\frac{1+6\sqrt{2}}{\sqrt{2}}, \text{ye} \quad (3.10)$$

Bir dipola düşen enerji

$$\varepsilon = -\frac{1+6\sqrt{2}}{4\sqrt{2}} \approx -1.67678 \quad (3.11)$$

eşittir. Benzer sonuç her bir düzgün köşegenin köşelerinde yerleştirilmiş olan dipollardan oluşan bir sistem için de bulunur.

Şimdi, sonsuz (ideal) bir kare örgüsünü göze alalım. Bu örgünün bazı:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{m}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(-1,1); \quad \mathbf{r}_1 = (0,0) \\ \mathbf{m}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(-1,-1); \quad \mathbf{r}_2 = (1,0) \\ \mathbf{m}_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,-1); \quad \mathbf{r}_3 = (1,1) \\ \mathbf{m}_4 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,1); \quad \mathbf{r}_4 = (0,1) \end{array} \right. \quad (3.12)$$

Burada temel hücrenin kenarı 2'ye eşittir, yani hücre basit bir hücre değildir. Bu verilere göre ağı her hangi bir (x,y) noktasında dipolun manyetik momenti

$$\left\{ \begin{array}{l} m_x = (-1)^{y+1}, x \in Z \text{ bir tam sayıdır} \\ m_y = (-1)^x, y \in Z \text{ bir tam sayıdır} \end{array} \right. \quad (3.13)$$

Bu verilere göre örgü iki alt örgüyle gösterebilir. Bunun için (x,y) koordinat sistemini 45° kadar pozitif yönde döndürelim. Yeni koordinat (x',y') sistemine göre dipollar iki alt küme oluşturuyor: birsinde dipollar merkezdeki diopole paralel, (Y') dipollar, diğeri ise merkezi dipe dik olanlar- (X') dipollar. Üstlü koordinat sistemde her hangi bir (x',y') noktasını alalım, bu noktada dipol moment $\mathbf{m} = (m'_x, 0)$ olsun. Simetriye göre $(x',-y')$ $(-x',-y')$ ve (x',y') noktalarında, sırasıyla dipol momentler $-\mathbf{m}$, $\mathbf{m}$ ve $-\mathbf{m}$ olacaktır. Bu dört dipol de merkezden aynı $r = \sqrt{x'^2 + y'^2}$ bulunmaktadır. Dolayısıyla bu sistemin merkezi noktada oluşturduğu manyetik alan

$$\begin{aligned}
\mathbf{b}_0 &= \frac{1}{r^3} \left(\frac{3(\mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{r}_1)\mathbf{r}_1}{r^2} - \mathbf{m}_1 + \frac{3(\mathbf{m}_2 \cdot \mathbf{r}_2)\mathbf{r}_2}{r^2} - \mathbf{m}_2 \right. \\
&\quad \left. + \frac{3(\mathbf{m}_3 \cdot \mathbf{r}_3)\mathbf{r}_3}{r^2} - \mathbf{m}_3 + \frac{3(\mathbf{m}_4 \cdot \mathbf{r}_4)\mathbf{r}_4}{r^2} - \mathbf{m}_4 \right) \\
&= \frac{1}{r^3} \left(\frac{3((\mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{r}_1)\mathbf{r}_1 + (\mathbf{m}_2 \cdot \mathbf{r}_2)\mathbf{r}_2 + (\mathbf{m}_3 \cdot \mathbf{r}_3)\mathbf{r}_3 + (\mathbf{m}_4 \cdot \mathbf{r}_4)\mathbf{r}_4)}{r^2} \right. \\
&\quad \left. - (\mathbf{m}_1 + \mathbf{m}_2 + \mathbf{m}_3 + \mathbf{m}_4) \right) \\
&= 3 \left(\frac{(\mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{r}_1)\mathbf{r}_1 + (\mathbf{m}_2 \cdot \mathbf{r}_2)\mathbf{r}_2 + (\mathbf{m}_3 \cdot \mathbf{r}_3)\mathbf{r}_3 + (\mathbf{m}_4 \cdot \mathbf{r}_4)\mathbf{r}_4}{r^5} \right) \quad (3.14) \\
&= 3 \left(\frac{(m_x \cdot x')\mathbf{r}_1 + (m_x \cdot x')\mathbf{r}_2 - (m_x \cdot x')\mathbf{r}_3 - (m_x \cdot x')\mathbf{r}_4}{r^5} \right) \\
&= 3(m_x \cdot x') \left(\frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_4}{r^5} \right) = 12 \frac{m_x x' y'}{r^5} \mathbf{e}
\end{aligned}$$

Burada $\mathbf{e} = \mathbf{j}' = \mathbf{m}_0$ merkezi noktada bulunan dipol momentin birim vektörüdür. Yani, merkezi noktada oluşan kısmi manyetik alan ve dipol aynı yöndedir. Yine, simetriye göre diğer alt örgünün merkezi noktada oluşturduğu alan bu dipolun yönüne paraleldir. Dolayısıyla merkezdeki bulunan dipol moment kararlı bir dengede bulunmaktadır. Sonsuz örgüde bu her hangi bir dipol için de geçerlidir, söz konusu olan dipol sistem tam olarak kararlı dengede bulunmaktadır. Bu şekilde dipol sistemin temel durumunu bulmuş oluyoruz.

Temel durumun bir dipola düşen enerjisi

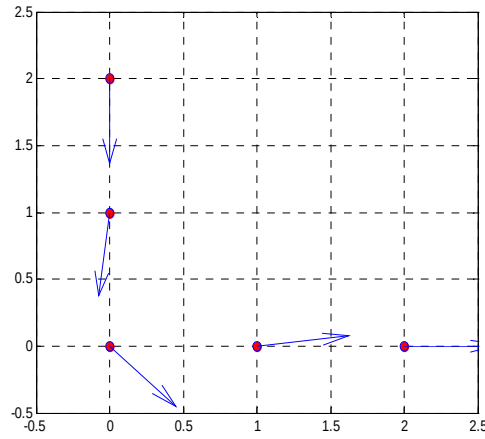
$$E = -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^{\infty} \left(3 \frac{(\mathbf{m}_0 \cdot \mathbf{r}_k)(\mathbf{m}_k \cdot \mathbf{r}_k)}{r_k^5} - \frac{\mathbf{m}_0 \cdot \mathbf{m}_k}{r_k^3} \right) \quad (3.16)$$

Burada $\mathbf{m}_0$ merkezde bulunan dipol momenti, $\mathbf{r}_k = (x_k \mathbf{i} + y_k \mathbf{j})$ k dipolun konumu, m_k ise k dipol kendisidir, x_k ve y_k tam sayıdır. Bu seri bilgisayar programı ile kolay bulunur, değeri

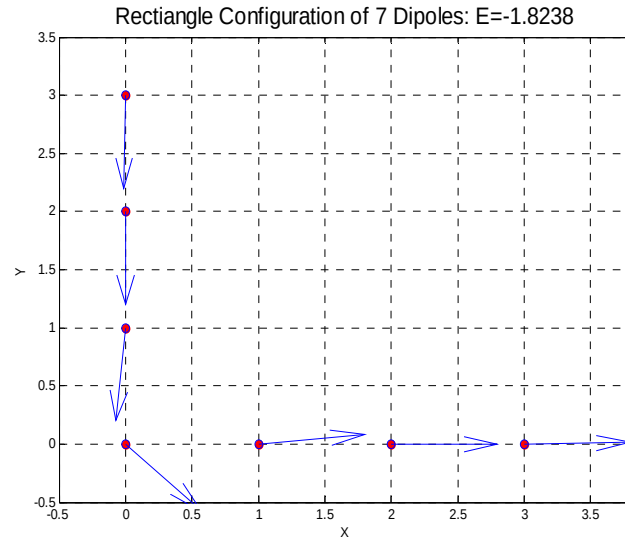
$$E = -2.549436 \quad (3.17)$$

Bu sonuç sonsuz bir örgü için geçerlidir. Yaklaşık aynı sonuç periyodik sınır koşulları uygulanan bir model için de geçerlidir, fakat bu modelin kenarı en az 10 birim uzunlukta olmalıdır. Dolayısıyla periyodik sınır koşullarını kullanıp MC yöntemiyle boyu çok büyük olan modellerde araştırılabilir.

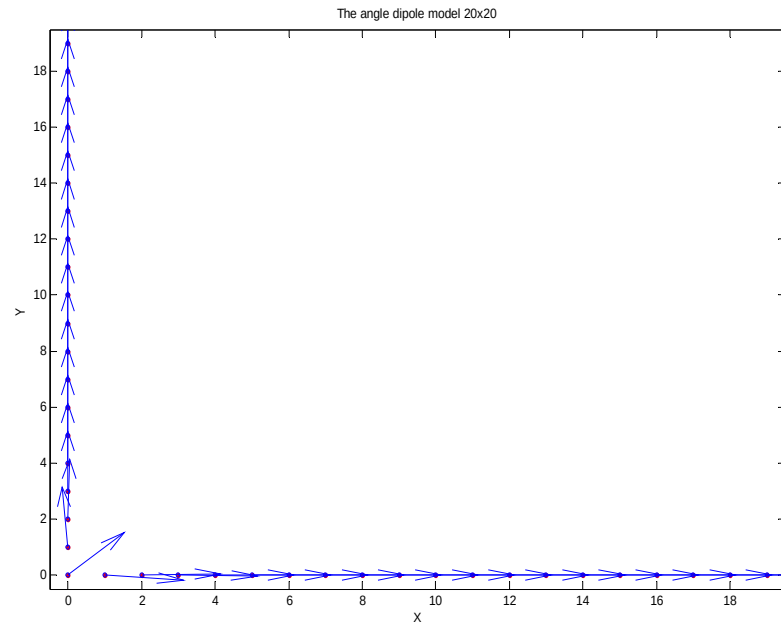
Sınır koşulları ne kadar etkili olabilir aşağıdaki örneklerden göre biliriz. Önce bir birine dik olan iki dipol diziliminin temel durumunu SR yöntemini kullanın hesaplayalım. Örnekler aşağıdaki grafiklerde verilmiştir:



Şekil 3.4. 3x3 dik açı oluşturan dipol sistemin temel durumu

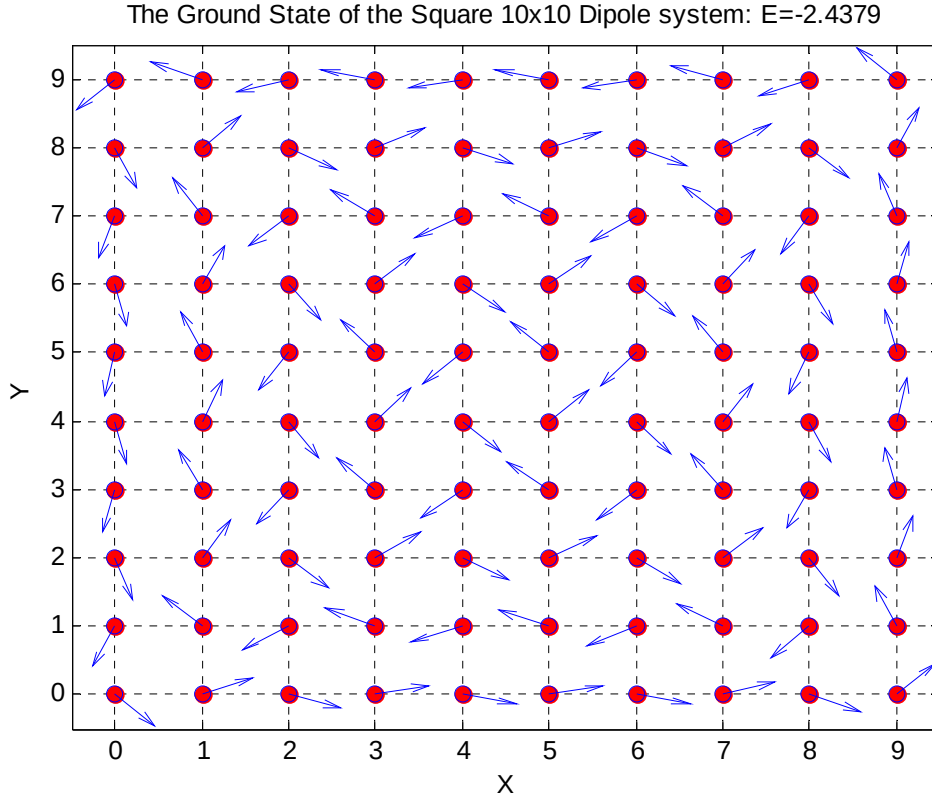


Şekil 3.5. 4x4 dik açı oluşturan dipol sistemin temel durumu

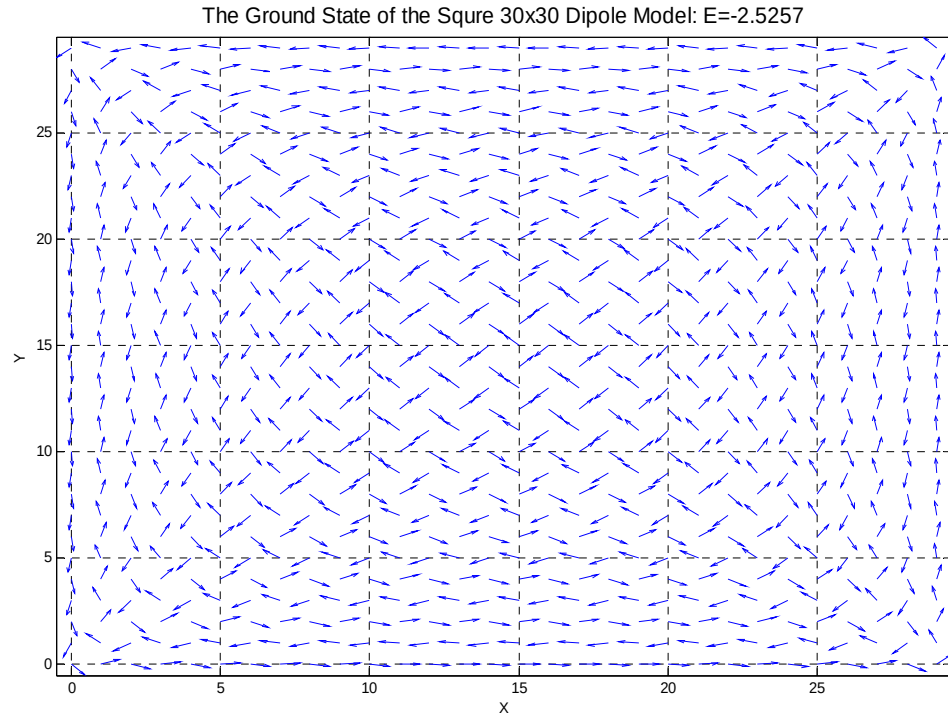


Şekil 3.6. 20x20 dik açı oluşturan dipol sistemin temel durumu

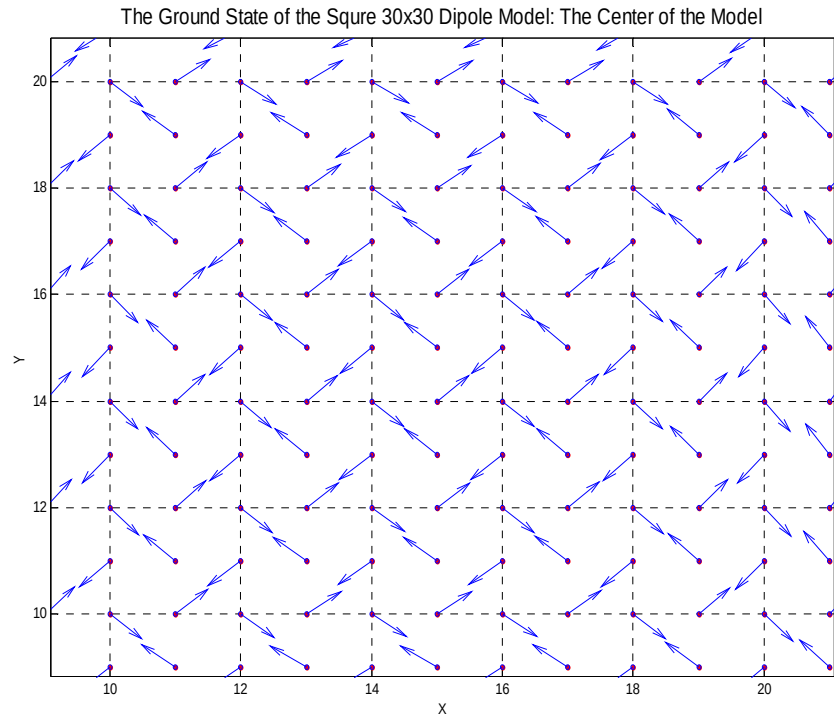
Bu sonuçlar göre modelin sınırlardaki bulunun dipollar sınıra paralel (veya anti-paralel) şeklinde diziliyor. Modelin köşesinde iki dik dizinin enerjisini azaltmak için köşedeki dipollar bilin açılara kadar sapma yapmaktadır. Bu davranış boyu sınırlı olan modellerde açıkça gözlenmektedir. Bazı modeller için bulunan temel durumlar aşağıdaki şekillerde gösterilmiştir.



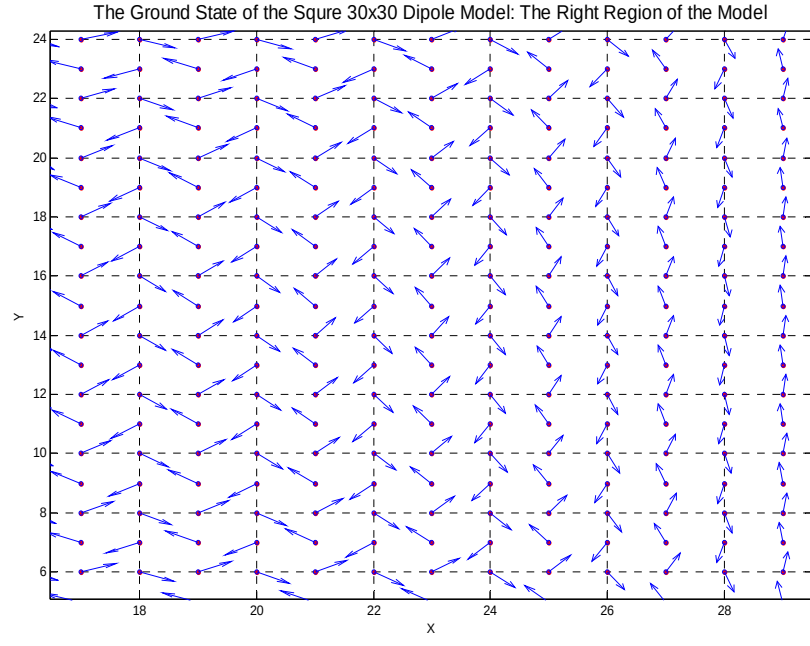
Şekil 3.7. 10x10 modelin temel durumu.



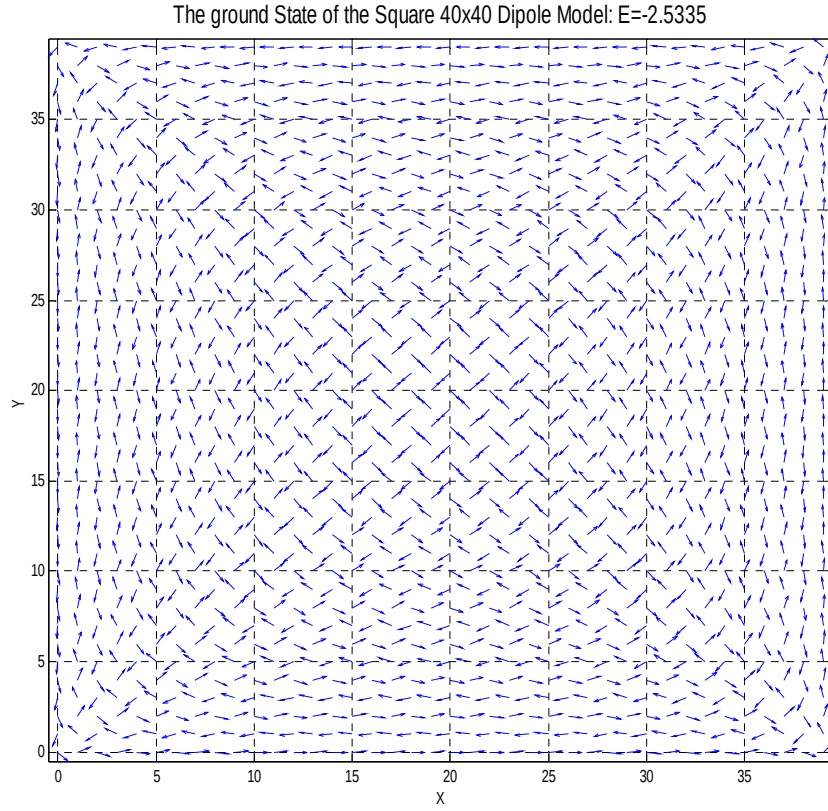
Şekil 3.8.(a-c) 30x30 modelin temel durumu.(a)



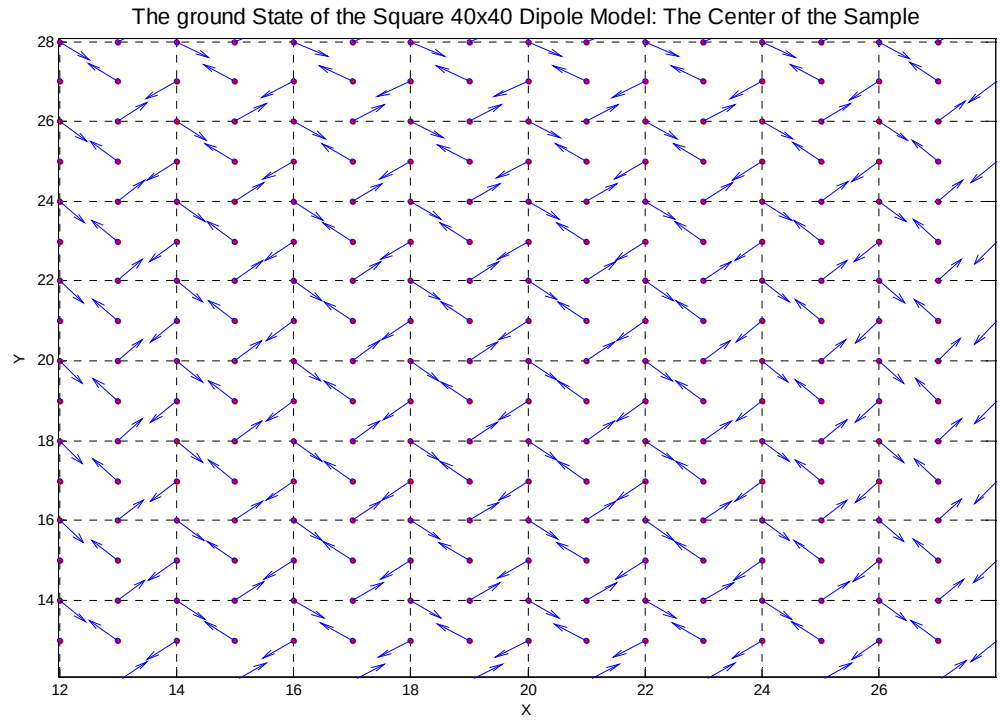
Şekil 3.8 (b)



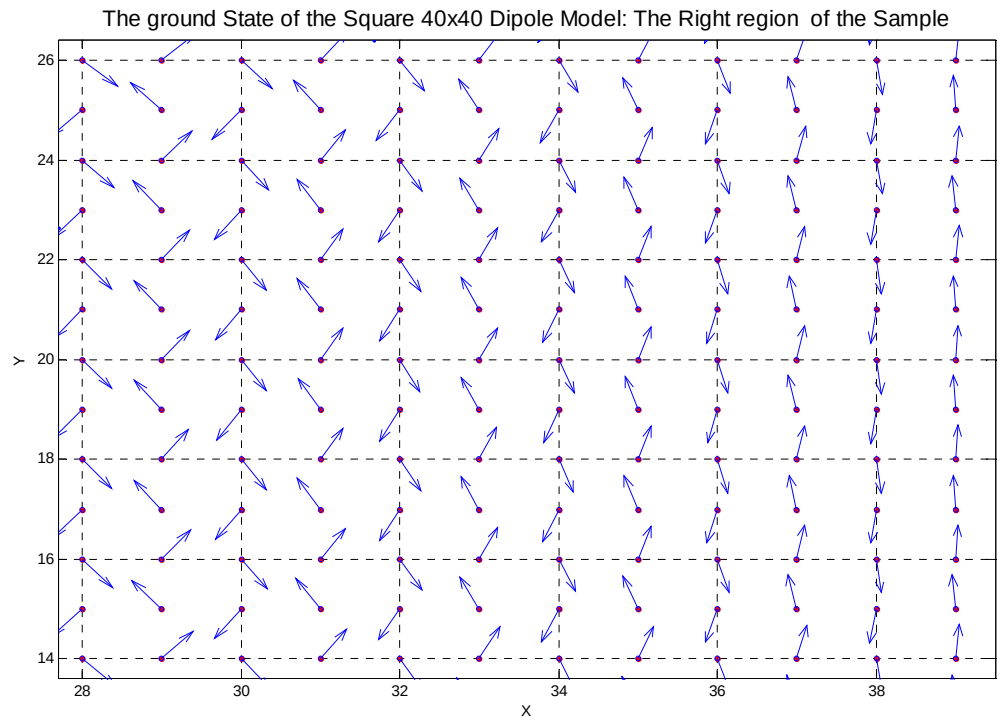
Şekil 3.8 (c)



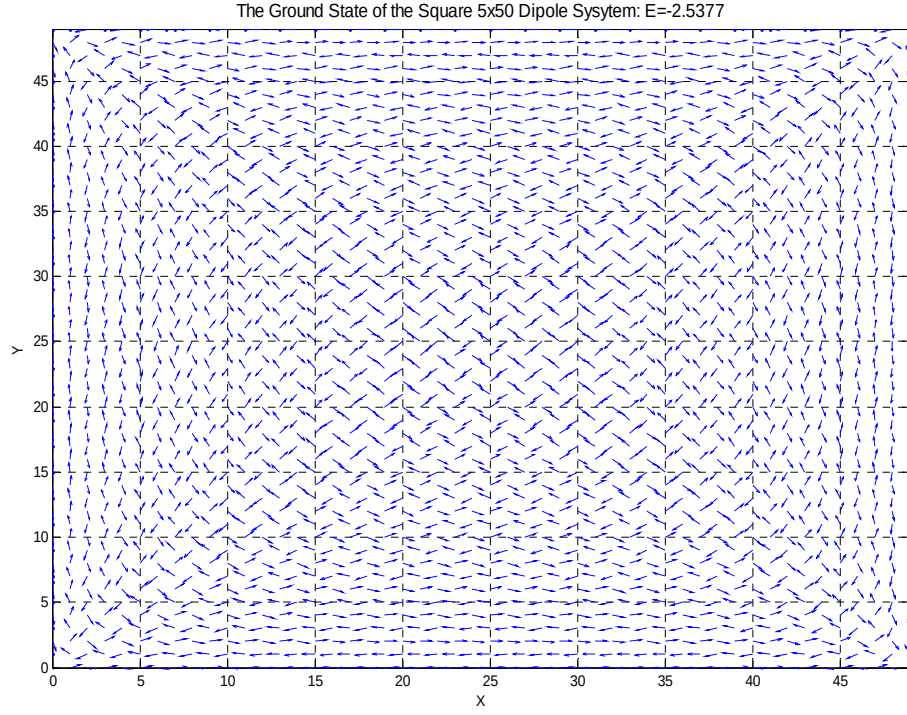
Şekil 3.9. (a-c) 40x40 modelin temel durumu. (a)



Şekil 3.9 (b)

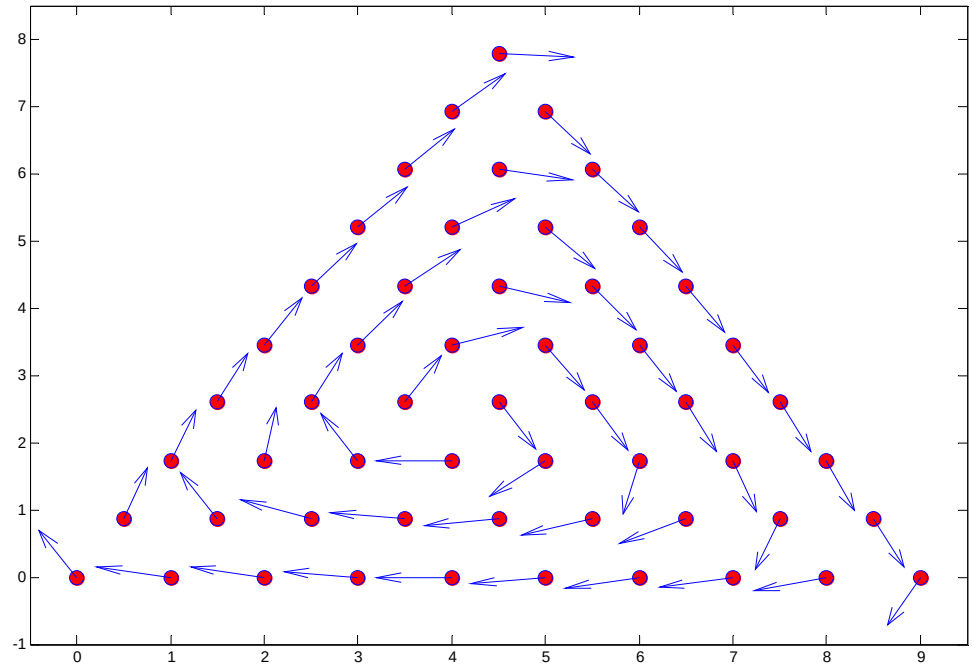


Şekil 3.9 (c)

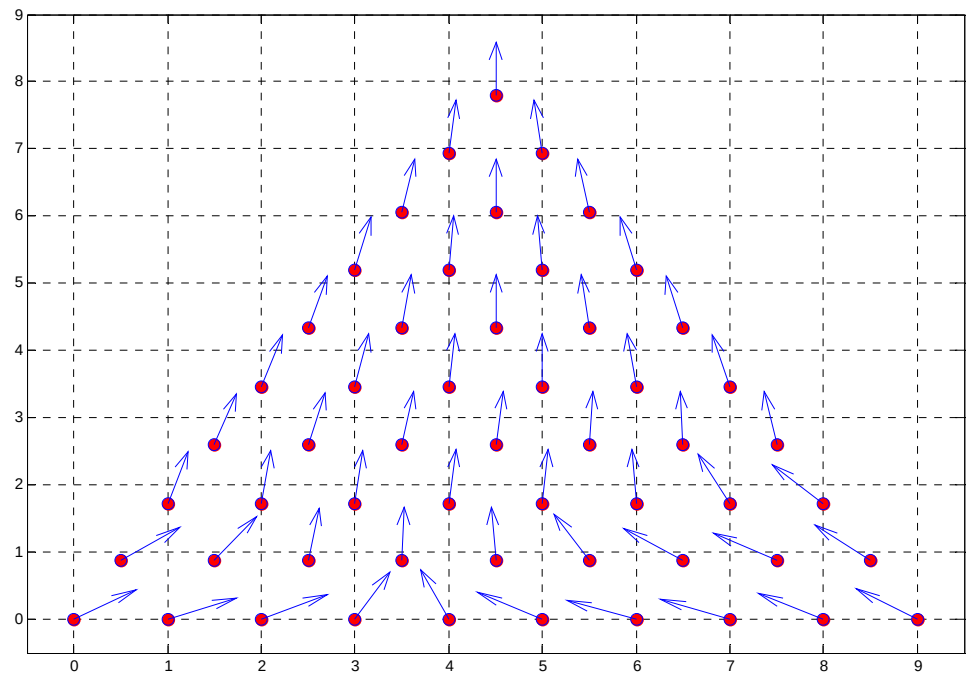


Şekil 3.10. 50x50 modelin temel durumu.

Sınırların etkisini daha net incelemek için eşkenar üçgen ağ modelini inceleyelim.
10x10x10 modelin SR hesaplarına göre dizilimi Şekil 3.11 de verilmiştir.



Şekil 3.11. 10x10x10 üçgen modelin temel durumu ($b=0$).



Şekil 3.12. 10x10x10 üçgen modelin manyetik alanda temel durumu ($b_x=0; b_y=0.75$).

SONUÇLAR

1. Manyetik dipol topluluğunda yalnızca dipol-dipol etkileşmesi gerçekleştiğinden dolayı sistem ideal bir paramanyetik davranış sergilemektedir ve sistemde histerisin olayı gözlenmemektedir.
2. Üç boyutlu dipol topluluğunda özellikle konum yapısı kristal olmayan sistemlerde lineer dipol dizileri karşı karşıya geldiğinde girdap şekilleri ortaya çıkmaktadır.
3. İki boyutlu (kare) kristal örgü yapısında olan dipol sistemlerinde temel durum her zaman mükemmel antiferromanyetik yapıdır. Modelin boyu sonsuz iken temel durumun enerjisi $E=-2.549436$ 'ya eşittir. Bu yaklaşık değil, tam bir sonuçtur.

Araştırmanın temel yöntemleri (Monte Carlo ve Statik Relaksasyon Yöntemi) ve bazı sonuçları 12-15 Mayıs 2011 tarihinde yapılan uluslararası Advances in Applied Physics & Materials Science Congress'de yer aldı ve Acta Physica Polonica dergisinde yayınlandı [E.Bolcal, et al. 2012]

KAYNAKLAR

- [1] V. Bogush , “Application of Electroless Metal Deposition for Advanced Composite Shielding Materials”, Journal of Optoelectronics and Advanced Materials Vol. 7, No. 3, 1635 – 1642, June 2005,
- [2] D. D. L. Chung Electromagnetic interference shielding effectiveness of carbon materials, Carbon 39, 279–285 (2001).
- [3] L. M. Lynkov et al. Flexible electromagnetic shields. Editor L.M. Lynkov, Minsk, BSUIR, 2000
- [4] Touminen et al. “Ultrahigh-Density Nanowire Arrays Grown in Self-Assembled Diblock Copolymer Templates” Science 290, 2126 (2000);
- [5] Kovneristyi, Yu.K., Lazareva, I.Yu., and Ravaev, A.A., Materialy, pogloshchayushchie SVCh-izluchenie (Microwave-Absorbing Materials), Moscow: Nauka, 1982. Petrov, V.M., Microwave Dielectric Properties of Ferroelectrics, in Segnetomagnitnye veshchestva (Magnetolectric Materials), Moscow: Nauka, 1990, pp. 152–164.
- [6] Wright, R.W., USA Patent 4012738, 1977.
- [7] Tino, M., Hasegawa, T., Microwave-Absorbing Coatings: 2. Prototype Design of Thin-Film Broadband 3-cm Absorber, 1976, vol. 14, no. 1/2, pp. 21–34.
- [8] Petrov, V.M., Mirovitskii, D.I., and Dobrovenskii, V.V., USSR Inventor’s Certificate no. 1447179, 1986.
- [9] <http://www.airforce-technology.com/projects/fl117/>
- [10] <http://www.encyclopedia.com/html/s1/stealtht.asp>
- [11] <http://home.iae.nl.htm> – International defense review - January 01, 2004
- [12] <http://www.lowobservable.com.htm> – World Stealth Ships, 2005
- [13] <http://www.fas.org/man/dod-101/navy/docs/fun/part11.htm>
- [14] Amin, M.B. and James, J.R., Techniques for Utilization of Hexagonal Ferrites in Radar Absorbers, Radio Electron. Eng., 1981, vol. 51, no. 5, pp. 209–225.
- [15] Kunihiro, S., USA Patent 3623099, 1970
- [16] Dauwen, J.M.A et al., USA Patent 5229773, 1993
- [17] Ichikawa Hiroshi, et al., USA Patent 4507354, 1985.
- [18] Thomson, C.F., UK Patent 1367554, 1974.

- [19] Ken Ishino, Takashi Watanabe, and Yasuo Hashimoto, USA Patent 4003840, 1977
- [20] Jpn. Patent 54-27556, 1979
- [21] O. Yalcin F. Yildiz, M.Bal, M.Toominen , B. Aktaş, “Ferromagnetic resonance studies of Co nanowire arrays”, J.Magn. Magn.Mater. 272-276, 1684-1685(2004).
- [22] Koseoglu Y, Yildiz F, Salazar-Alvarez G, Toprak M, Muhammed M, Aktas B “Synthesis, characterization and ESR measurements of CoNiO nanoparticles”, Phys. Stat. Sol. B, -BASIC SOLID STATE PHYSICS 242 (8): 1712-1718 JUL 2005.
- [23] Rameev, B.Z., Gupta, A., Yıldız, F., Tagirova, L.R., Aktas, B., “Strain-induced magnetic anisotropies in epitaxial CrO₂ thin films probed by FMR technique”, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 300, e526–e529, (2006).
- [24] Michał Bystrzejewski, Andrzej Huczko and Hubert Lange, Sen. Act. B: Chemical, 109(1), 2005, 81-85;
- [25] Ying Wang, Zhiyong Tang and Nicholas A. Kotov, Mater. Today, 8(5), 2005, 20-31;
- [26] Ling Zhang, Rong He and Hong-Chen Gu, Mater. Res. Bull., 41(2), 2006, 260-267;
- [27] H.A. Kolodziej, et al., UK Patent., GB 2379331A (2001) ve J. Vejpravova, et al., J. Magn. Magn. Mater.(2006),
- [28] S. Boskovic, D. Djurovic, Z. Dohcevic-Mitrovic, Z. Popovic, M.Zinkevich and F.Aldinger Journal of Power Sources, Volume 145, Issue 2, 18 August 2005, Pages 237-242
- [29] Stefano di Stasio and Vladimiro Dal Santo Applied Surface Science, Volume 253, Issue 5, 30 December 2006, Pages 2899-2910
- [30] J.T. Lue, J.Phys. Chem. Solids 62 (2001) 1599
- [31] Z. Wang et al., Synthesis and characterization of Ba_{1-x}Sr_xTiO₃ nanopowders by citric acid gel method, Ceram. Int. (2006)
- [32] A. Calka, D. Wexler and A.Y. Mosbah; Journal of Alloys and Compounds, In Press, Corrected Proof, Available online 13 October 2006
- [33] M.Toprak, Ph. D. Thesis “Engineered Nanostructures and Thermoelectric Nanomaterials” Royal Ins. of Tech 2003

- [34] Dragieva et al., “Mechanism of borohydride reduction process and properties of obtained nanosized ferromagnetic particles” *Journal of Mag. and Mag. Materials* 140-144 (1995) 455-45
- [35] Ertuğrul Bolcal, ‘Nano Kompozit Malzemelerin Manyetik Özelliklerinin Modellenmesi’, Doktora tezi, GYTE, 2011.
- [36] I.Zutiç , J.Fabian,S.DasSarma,Rev.Mod.Phys.**76**(2004)323.
- [37] J. Xu, M. A. Howson, B. J. Hickey, D. Greig, E. Kolb and P. Veillet, *Phys. Rev. B* **55**, 416 (1997)
- [38] C. Kittel, *Phys. Rev.* **70**, 965 (1946).
- [39] L. N’eel, *Ann. Grophys. (C.N.S.R.)* 5, 99 (1949).
- [40] E.C. Stoner, E.P. Wohlfarth. *Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. A*, **240**, 599 (1948).
- [41] L. Lu, M.L. Sui, K. Lu, *Science* **287**, 1463 (2000).
- [42] A. Jordan, R. Scholz, P. Wust, H. Fahling, R. Felix, *J. Magn. Magn. Mater.* **201**, 413 (1999).
- [43] J.L.Dormann and D.Fiorani, *Magnetic properties of fine particles* (North-Holand, Amsterdam, 1992)
- [44] S.Hariharan and J.Gass, *Rev.Adv.Mater.Sc.*, **10** (2005) 398
- [45] M.F. Hansen, S.Mørup, *J. Magn. Magn. Mater.* **184**, 262 (1998).
- [46] J.L. Dormann, L. Bessais, D. Fiorani, *J. Phys. C* **21**, 2015 (1988).
- [47] S. Morup, E. Tronc, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 3278 (1994).
- [48] J.L. Dormann, D. Fiorani, E. Tronc, *Adv. Chem. Phys.* **98**, 283 (1997).
- [49] J.L. Dormann, D. Fiorani, E. Tronc, *J. Magn. Magn. Mater.* **202**, 251(1999).
- [50] F.C. Fonseca, G.F. Gya,R.F. Jardim, R. Muccillo, N.L.V. Carreno, E. Longo, E.R. Leite, *Phys. Rev. B* **66**, 104406 (2002).
- [51] A. Fnidiki, C. Dorien, F. Richomme, J. Teillet, D. Lemarchand, N.H. Duc, J. Ben Youssef, H. Le. Gall, *J. Magn. Magn. Mater.* **262**, 368 (2003).
- [52] I.T.Iakubov, A.N.Lagarkov, S.A.Maklakov, A.V.Osipov, K.N.Rozanov, I.A.Ryzhikov, V.V. Samsonova, A.O.Sboychakov, *J. Magn. Magn. Mater.* **321**, 726 (2009).
- [53] V.V. Samsonova, A.O.Sboychakov, *J. Magn. Magn. Mater.* **321**, 2707 (2009).
- [54] T.Neuberger, B.Schopf, H.Hofmann, M.Hofmann and B.von Rechenburg, *J.Magn.Magn.Mater.* **293** (2005) 483.

- [55] J.I.Martin, J.Nogues, K.Liu, J.L.Vincent and K.Schuller, *J.Magn.Magn.Mater* 256 (2003) 449
- [56] A.Heilmann, *Polymer films with embedded metal nanoparticles* (Springer, New York, 2003)
- [57] J.L.Wilson, P.Poddar, N.A.Frey, H.Srikanth, K.Mohomed, J.P.Harmon, S.Kotha and J.Wachsmuth, *J.Appl.Phys.* **95** (2004) 1439.
- [58] D. Vollath, D.V.Szabo and S.Schlabach, *J.Nanoparticle Res.* **6** (2004) 181
- [59] B. D. Cullity, *Introduction to Magnetic Materials* (Addison-Wesley, Reading, MA, 1972), Sec. 11.6.
- [60] C.P.Poole,Jr., F.J.Owens, *Introduction to Nanotechnology* (Wiley&Sons, Inc, New Jersey, 2003)
- [61] Metropolis, N. and Ulam, S. (1949), *J.Amer.Stat.Assoc.* vol.44, p335
- [62] K. Binder and D.W.Heermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics* (Solid State Sciences vol 80, Berlin, Springer, 1997)
- [63] J.P Hansen and I.R.McDonald, *Theory of Simple Liquids* 2nd edn (London, Academic Pres, 1885)
- [64] H.Möller-Krumbhaar and K.Binder, *Dynamic properties of the Monte Carlo method in statistical mechanics*, *J.Stat.Phys.* **8** (1973) p.1-24
- [65] G.C. Matland, M.Rogby, E.B.Smith and W.A.Wakeham, *Intermolecular Forces: Their Origin and Determination* (Oxford: Clarendon)
- [66] L.Verlet, *Computer experiments on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lenard-Jones molecules*, *Phys.Rev.* 159 (1967) p.98-103
- [67] J.M. Halle, *Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods* (New York, Wiley, 1992)
- [68] M.P.Allen and D.J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids* (Oxford, Clarendon, 1987)
- [69] D.C. Rapaport, *The Art of Molecular Dynamics Simulation* (Cambridge: Cambridge University Pres, 1995)
- [70] K.Binder and A.P.Young, *Rev.Mod.Phys.*, **58** (1986) 801
- [71] E.Bolcal, V.Dimitrov, B.Aktaş, H.Aslan and A.Bozkurt, *Acta Phys.Pol.* Vol.121 (2012) 259.

ÖZGEÇMİŞ

22 Eylül 1979'da Manisa-Turgutlu'da doğdu. İlk ve ortaöğretimini Turgutlu Bozkurt İlkokulu ve Turgutlu Niyazi Üzmez Lisesi'nde tamamladıktan sonra, Marmara Üniversitesi Atatürk Eğitim Fakültesi Fizik Bölümü'nden 2005 yılında iyi derece (2,78 / 4) ile mezun oldu.

Özel bir öğretim kurumunda 2005 yılından bu yana Fizik Öğretmeni olarak görev yapmaktadır. İyi derecede İngilizce bilmektedir.

2009–2010 yıllarında ITAP (Institute of Theoretical and Applied Physics) Fizik Olimpiyat Okulunu başarılı olarak tamamladı ve Fizik Olimpiyat Formatörlüğü belgesini aldı.

Proceedings of the International Congress on Advances in Applied Physics and Materials Science, Antalya 2011

Ground State and Magnetostatic Properties of a Dipole System Arranged in Two-Dimensional Lattice

E. BOLCAL^a, V. DIMITROV^{a,*}, B. AKTAŞ^b, H. ASLAN^b AND A. BOZKURT^b

^aDepartment of Physics, Istanbul Kultur University, Atakoy Campus E5 Karayolu Uzeri

Bakirkoy 34156 Istanbul, Turkey

^bDepartment of Physics, Gebze Institute of High Technology, Gebze, Turkey

A system of nano sized modomain ferromagnetic particle arranged in two-dimensional lattice is theoretically investigated. The basic aim of the investigation is to find the ground state of these types of models where the interaction is long-ranged and anisotropic. The numerical calculations show that for some lattices there is a number of degenerated states near the zero temperature. The ground state of these systems is basically of a complicated antiferromagnetic type.

PACS:

1. Introduction

There has been recently renewed interest in the magnetic properties of nanocomposite materials that consist of very fine magnetic particles embedded in a metallic or dielectric nonmagnetic host [1–7] and in nanocomposite materials that consist of multilayers with very thin magnetic layers [8, 9] which exhibit certain superparamagnetic (SPM) properties, too. If the dimension of a magnetic particle is reduced drastically, to a few nanometers, the domains in the particle merge into a single one, creating what is known as a single-domain particle and the total magnetic moment is the sum of all moments of the atomic particle. Therefore, the total magnetic moment of a single-domain nanoparticle can be about 10,000 times greater than the atomic moments of the constituent atoms. The behavior of such single-domain nanoparticles can be very complex due to the fact that the magnetic moment of each particle disturbs the behavior of neighboring particles. In general, this interaction between particles serves to align the magnetic moments in order to also reduce the energy of the whole. It is commonly believed that the magnetic behavior of a magnetic nanocomposite material is of SPM type. The complexity of the magnetic properties of nanocomposite magnetic materials is basically due to the dual nature of magnetic dipole-dipole interactions: if the dipoles are along a line their magnetic moment orientation is along the line (ferromagnetic ordering), however, when two dipoles are parallel then their magnetic moments are antiparallel (antiferromagnetic ordering).

The situation is much more complicated in a three-dimensional ensemble of magnetic dipoles. According to Hansen and Morup [1], in an assembly of particle magnetic moments at a given ordering temperature there is a transition from a superparamagnetic state to an ordered

state resembling the spin-glass (SG) phase. However, according to Dorman et al. [5] no ordered state has yet been proved to exist in disordered nanoparticle assemblies, although there are some experimental clues in favor of its possible occurrence for strongly interacting particles. Some observed properties present analogies with those of spin glasses and it is reasonable to conjecture a low-temperature state similar to the SG phase, since the SG ingredients, i.e. disorder and frustration, are also present due to the disordered arrangement of particles, random distribution of easy axes and volume distribution, and the intrinsic conflicting character of dipole-dipole interactions, which can be both ferromagnetic and antiferromagnetic. Thus, it seems that the creating of a rigorous theory of an ensemble of magnetic dipole system is an extremely difficult problem therefore further Monte Carlo (MC) studies are needed.

In order to better understand the behavior of a magnetic dipole ensemble “frozen in” a nanocomposite material, in the present study we mostly investigate the ground state configuration (at zero temperature) of such an ensemble. Since MC simulations at low temperatures are very slow and time consuming, in the present study we developed a special static relaxation (SR) method which finds very efficiently the minimum energy configuration (the ground state) of the dipole ensemble, and using the MC method warms up the system to higher temperatures.

2. The model

We consider a system of magnetic particles which are distributed on N sites of a simple rectangle lattice with lattice parameters $\Delta x = \Delta y = a$. The particles are considered to be hard spheres, each carrying a central point dipole with a magnetic moment m . The system is subject to a magnetic field which can be applied in any direction. The interaction energy between two point dipoles occupying lattice sites i and j , is written as

* corresponding author; e-mail: recep.dimitrov@gmail.com

$$\varepsilon_{ij} = -\frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} [3(m_j \cdot e_{ij})(m_j \cdot e_{ij}) - (m_j \cdot m_i)]. \quad (1)$$

Thus, the Hamiltonian of the system is

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1; j \neq i}^N \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} [3(m_j \cdot e_{ij})(m_j \cdot e_{ij}) - (m_j \cdot m_i)] - B \sum_{i=1}^N m_i. \quad (2)$$

Here, m_i , r_i , μ_0 , B is the dipole moment, the position vector of the i -th lattice site and permeability of free space, respectively; $r_{ij} = |r_j - r_i|$, $e_{ij} = \frac{r_j - r_i}{r_{ij}}$. It is convenient to present Eq. (2) in a dimensionless form: if we assume $m_i = n\mu_B e_i$ and $r_{ij} = r_0 R_{ij}$ with r_0 the nearest neighbor distance, we get $H = E_0 h$ where

$$h = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1; j \neq i}^N \frac{1}{R_{ij}^3} [3(e_j \cdot e_{ij})(e_j \cdot e_{ij}) - (e_j \cdot e_i)] - b \sum_{i=1}^N e_i, \quad (3)$$

$$E_0 = \frac{\mu_0 \mu_B^2}{4\pi r_0^3} n^2, \quad b = \frac{B\mu_B}{E_0}. \quad (4)$$

E_0 is the energy unit, n is an integer number and μ_B is the Bohr magneton. The first term in the above Hamiltonian represents the sum of all pairs of dipole-dipole interaction energies. The second term is the energy of the aligned dipoles in the direction of the applied magnetic field.

Considering the case of parallel moments for simplicity, the dipolar energy of a pair can be rewritten as

$$\varepsilon_{ij} = -\frac{1}{R_{ij}^3} (3 \cos^2 \theta - 1). \quad (5)$$

Expression (5) shows immediately the intricate character of the dipolar interaction as being: (a) long ranged because for a 3D assembly of dipoles one has to sum up over all pair energies and this sum is not absolutely convergent — the integral $\int \frac{r^2 dr}{r^3}$ does not converge ($n(r) \sim r^2 dr$ is the number of moment pairs separated by the distance r); (b) strongly anisotropic — leading to ferromagnetic coupling for $\cos 2(\theta) > 1/3$ ($\theta < 54.75^\circ$) or antiferromagnetic coupling for $\cos 2(\theta) < 1/3$ ($\theta > 54.75^\circ$).

These properties make it usually impossible to handle the problem analytically. Moreover: the first property makes the boundary conditions (finite size sample) a crucial ingredient of the problem (i.e. the dipolar energy is not only a property of the material but also of the object shape); and beyond the simple case of a single pair of moments, the second property makes the prediction of the actual kind of ordering not intuitive, as it is strongly dependent on the locations of the moments on a lattice.

In this model the energy of the system is a function of the unit vectors e_i (pointing in the direction of the i -th dipole). At zero temperature the equilibrium state of the system is the state with H being at minimum. At

equilibrium the torque acting on any dipole,

$$\tau_i = e_i \times \left\{ \sum_{j=1; j \neq i}^N \frac{1}{R_{ij}^3} [3(e_j \cdot e_{ij})e_{ij} - e_j] + b \right\} \quad (6)$$

must be equal to zero. To achieve this state any dipole step by step is turned by a small angle proportional to the acting torque $d\alpha_i \propto \tau_i$: one static relaxation step consists of turning any dipole of the system parallel to the torque acting on it. In this sense the SR method is similar to the MC method — the only difference is that the SR attempt is successful while in MC method the new configuration is adopted with a certain probability.

3. Results and discussion

3.1. The ground state of the system at zero magnetic fields

In order to better understand the self-behavior of a magnetic dipole system in the present study we basically consider the system in the absence of an external magnetic field. First of all we consider a linear model (a one-dimensional lattice) at zero temperature. Its ground state energy ($e_i = e_x$, $i = 1, 2, \dots, N$) can be easily calculated analytically

$$H = -2N \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j^3} = -2N\zeta(3) = -2.404N. \quad (7)$$

Here $\zeta(3) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j^3} = 1.202$ is the value of the zeta function for its argument being equal to 3, thus the energy per dipole is $-2.404E_0$. Almost the same energy (-2.400 per dipole) is found by the SR method. Analytical calculation of the ground state of the two- or three-dimensional model is a complicated problem, however it is easily done by the SR method.

In the present study for the sake of simplicity we consider dipole models forming an equidistant simple line lattice (one-dimensional model), a simple rectangle lattice (two-dimensional model) or a simple cubic (sc) lattice (three-dimensional model), with lattice parameters equal to 1. Calculations show that the ground state of the two-dimensional model is a system of parallel dipole lines being at the “ground state” in the one-dimensional model; however the dipoles in the neighbor lines are in opposite directions. In this model the calculated energy is -2.550 per dipole. Indeed, this value depends on the size of the model, the interaction range of dipoles and the applied boundary conditions: the presented value corresponds to a 100×100 dipole system with periodic boundary conditions. For the same model with a free boundary condition the calculated energy of the ground state due to the boundary effects is slightly lower, -2.5485 per dipole. The ground state of the sc three-dimensional model ($20 \times 20 \times 20$ dipoles) is a set of parallel planes of the two-dimensional model being at their ground state; however, the neighbor planes are oriented antiparallel to each other. The calculated energy of the ground state of

the three-dimensional model is -2.679 (periodic boundary conditions) and -2.600 per dipole for the free boundary conditions. These calculations show that the major part of the energy of a magnetic dipole system is formed by the linear chains of dipoles.

3.2. Metastable states at zero temperature

Numerical simulations by the SR method show that there are a number of metastable states which energetically are very close to the ground state. The reason for the existence of metastable states is that the ground state of a magnetic dipole chain is degenerated: the alignment of the dipoles in the chain to the left or to the right at the absence of magnetic field from any point of view is equivalent. Thus the energy of a dipole chain consisting of two or more segments with different dipole orientations is almost equal to the energy of a single line segment (-2.404 energy units per dipole). The segments are separated by a very thin "domain wall" consisting of a few dipoles the orientation of which gradually changes from one direction to the opposite one.

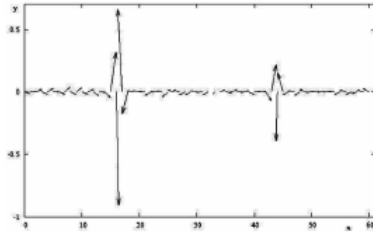


Fig. 1. Projection of the dipole moments (unit vectors) on the x - y plane of a one-dimensional magnetic dipole model consisting of 61 dipoles located at the sites of a simple one-dimensional lattice.

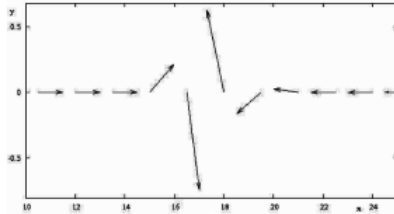


Fig. 2. Projection of the dipole moments on the x - y plane of the first domain wall formed in the model shown in Fig. 1.

An example of a linear model at metastable state is shown in Fig. 1: it is a line of dipoles (along the x -axis) with dipole moments projected on the x - y plane and consists of three segments oriented differently. The energy of this state is -2.334 per dipole. The magnetic structure of the metastable state is similar to the domain structure of a ferromagnetic material.

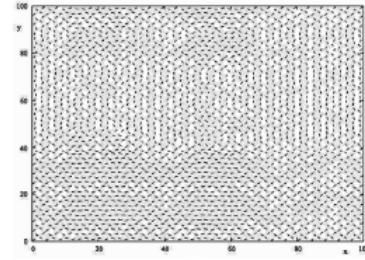


Fig. 3. Projection of the dipole moments on the x - y plane of 50×50 dipoles model at zero temperature and in a zero magnetic field. Periodic boundary conditions are applied. The unit distance along the x and y axis is the double lattice parameter of the model.

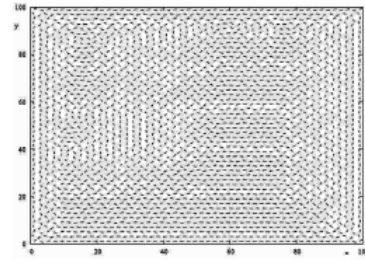


Fig. 4. Projection of the dipole moments on the x - y plane of 50×50 dipoles model at zero temperature and in a zero magnetic field. Free boundary conditions are applied. The unit distance along the x and y axis is the double lattice parameter of the model.

Figure 2 shows such a one-dimensional domain. Its width turns out to be of the order of the dipole-dipole interaction length. The number of domains in the model depends on many factors such as the length of the model, starting configuration and boundary conditions. Therefore, depending on these conditions a number of

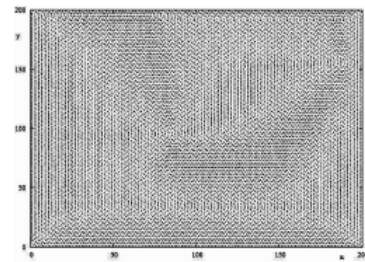


Fig. 5. Projection of the dipole moments on the x - y plane of 100×100 dipoles model at zero temperature and in a zero magnetic field. Free boundary conditions are applied. The unit distance along the x and y axis is the double lattice parameter of the model.

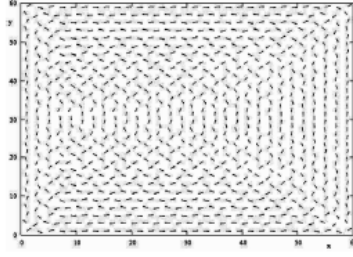


Fig. 6. Projection of the dipole moments on the x - y plane of 30×30 dipoles model at zero temperature and in a zero magnetic field. Free boundary conditions are applied. The unit distance along the x and y axis is the double lattice parameter of the model.

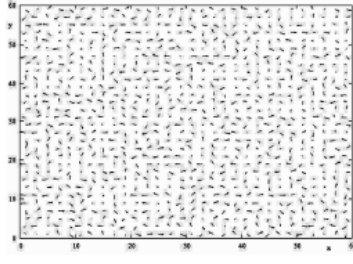


Fig. 7. Projection of the dipole moments on the x - y plane of 30×30 dipoles model; reversed temperature $E_0/k_B T$ is equal to 1.0, magnetic field is absent. Free boundary conditions are applied. The unit distance along the x and y axis is the double lattice parameter of the model.

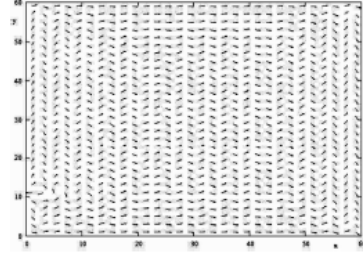


Fig. 8. Projection of the dipole moments on the x - y plane of 30×30 dipoles model at zero temperature and with the magnitude of magnetic field $b = 1$, applied along the x -axis. Free boundary conditions are applied. The unit distance along the x and y axis is the double lattice parameter of the model.

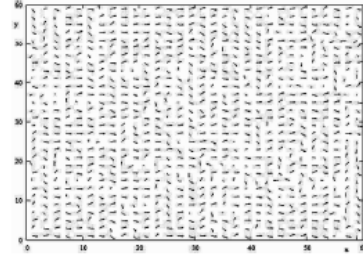


Fig. 9. Projection of the dipole moments on the x - y plane of 30×30 dipoles model at reversed temperature $E_0/k_B T = 1.5$ and with the magnitude of magnetic field $b = 1$, applied along the x -axis. Free boundary conditions are applied. The unit distance along the x and y axis is the double lattice parameter of the model.

metastable states are rendered possible all energetically very close to each other. This in turn makes the theoretical investigation of the model difficult. From point of view of magnetic ordering the ground state of the single segment is perfectly ordered (all dipole moments are in the same direction and the system is with a maximum magnetization equal to 1 in dimensionless units). The metastable state at zero temperature is ordered too, however the correlation length now is limited. The lengths of the domains in the chain are on average equal to each other; therefore the average magnetization is zero. Thus the one-dimensional dipole model behaves like a classical superparamagnetic. However, depending on the “history” of the model, fluctuations of the size of the domains are possible and the model can be in such a metastable state when it behaves like a ferromagnetic.

3.3. The two-dimensional model

In order to illustrate the behavior of the magnetic dipole system more effectively, we present some graphical results for the two-dimensional model. Figures 3–5 (50×50 and 100×100 dipoles, square lattice) demonstrate the influence of the boundary conditions and the size of

the model on the magnetic structure of the model. Figures show the projections of the dipole moments (unit vectors) on the x - y plane. According to Figs. 3–5 the magnetic structure of the system consists of antiferromagnetic domains with antiferromagnetic domain walls. The boundary conditions crucially influence the interior of the model, thus yielding different metastable states of the system, while the size of the model is less important.

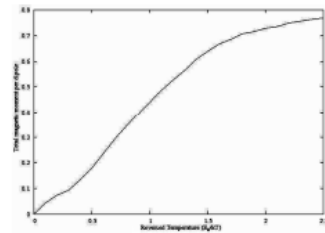


Fig. 10. Magnetization as a function of reversed temperature.

In order to better see these effects, in Figs. 6, 7 we present a smaller model (30×30 dipoles). The state presented in Fig. 7 is obtained by MC simulation; the reverse temperature is in $E_0/k_B T$ units. At non-zero temperature the magnetic structure consists of short line chains of parallel dipole forming some kind of antiferromagnetic aggregations. Figures 8, 9 demonstrate the behavior of the 30×30 dipole model in the presence of an external magnetic field and the influence of temperature. In the shown examples the magnetic field is along the x -direction and its magnitude $b = 1$. For completeness in Fig. 10 we present the magnetization of the above 30×30 dipole model as a function of the reverse temperature: the figure shows definitely the presence of some kind of order-disorder transition in the system in the vicinity of $E_0/k_B T = 1.2$; however, for the limited size of the system this transition is quite smooth.

4. Conclusion

The ground state of a dipole magnetic system forming a simple cubic (or square) lattice is a set of parallel dipole lines where the magnetic dipole at neighbor line are in opposite directions. In practice however the system at zero temperature is in a metastable state which consists of domains formed by antiparallel line segments.

Acknowledgments

This work was supported by the Ministry of Industry and Trade of Republic of Turkey (SanTez project N 00185.STZ.2007-2).

References

- [1] M.F. Hansen, S. Morup, *J. Magn. Magn. Mater.* **184**, 262 (1998).
- [2] J.L. Dormann, L. Bessais, D. Fiorani, *J. Phys. C* **21**, 2015 (1988).
- [3] S. Morup, E. Tronc, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 3278 (1994).
- [4] J.L. Dormann, D. Fiorani, E. Tronc, *Adv. Chem. Phys.* **98**, 283 (1997).
- [5] J.L. Dormann, D. Fiorani, E. Tronc, *J. Magn. Magn. Mater.* **202**, 251 (1999).
- [6] F.C. Fonseca, G.F. Gya, R.F. Jardim, R. Muccillo, N.L.V. Carreno, E. Longo, E.R. Leite, *Phys. Rev. B* **66**, 104406 (2002).
- [7] A. Fnidiki, C. Dorian, F. Richomme, J. Teillet, D. Lemarchand, N.H. Duc, J. Ben Youssef, H.Le. Gall, *J. Magn. Magn. Mater.* **262**, 368 (2003).
- [8] I.T. Iakubov, A.N. Lagarkov, S.A. Maklakov, A.V. Osipov, K.N. Rozanov, I.A. Ryzhikov, V.V. Samsonova, A.O. Sboychakov, *J. Magn. Magn. Mater.* **321**, 726 (2009).
- [9] V.V. Samsonova, A.O. Sboychakov, *J. Magn. Magn. Mater.* **321**, 2707 (2009).