



TR0500136

2. FİZİK KONGRESİ, 14 - 17 EYLÜL 2004, BODRUM - TÜRKİYE

## APPLICATION OF THE GENETIC ALGORITHM TO BLUME-EMERY-GRIFFITHS MODEL: TEST CASES

AHMET ERDİNÇ\*, MEHMET ŞAHİN\*\* AND OSMAN CANKO\*\*\*

\**Erciyes University, Department of Physics, 38039 Kayseri, Turkey,  
erdinc@erciyes.edu.tr*

\*\* *Selçuk University, Department of Physics, 42031 Konya, Turkey,  
sahinm@selcuk.edu.tr*

\*\*\**Erciyes University, Department of Physics, 38039 Kayseri, Turkey,  
canko@erciyes.edu.tr*

The equilibrium properties of the Blume-Emery-Griffiths (BEG) model Hamiltonian with the arbitrary bilinear (J), biquadratic (K) and crystal field interaction (D) are studied using the genetic algorithm technique. Results are compared with lowest approximation of the cluster variation method (CVM), which is identical to the mean field approximation. We found that the genetic algorithm to be very efficient for fast search at the average fraction of the spins, especially in the early stages as the system is far from the equilibrium state. A combination of the genetic algorithm followed by one of the well-tested simulation techniques seems to be an optimal approach. The curvature of the inverse magnetic susceptibility is also presented for the stable state of the BEG model.

## KATI Bi - SIVI BiCd ARAYÜZEY ENERJİSİNİN ÖLÇÜMÜ

M. EROL, N. MARAŞLI\*, K. KEŞLİOĞLU\* ve M. GÜNDÜZ\*

E.Ü., Yozgat Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Yozgat –Türkiye,  
merol@erciyes.edu.tr

\*E. Ü., Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Kayseri – Türkiye,  
marasli@erciyes.edu.tr, kesli@erciyes.edu.tr, gunduz@erciyes.edu.tr

Grafitten yapılmış silindirik bir numune kalıbı içerisine dökümü yapılmış Bi-%15ağ.Cd alaşımı, merkezden ısıtılarak ince bir sıvı tabakası (~1-2mm) oluşacak şekilde eritildi ve katı-sıvı arayüzeyinin dengeye gelmesi için 7 gün süreyle sabit sıcaklık gradyentinde tutuldu. Deney süresi sonunda numune ani olarak soğutuldu. Tane arayüzey oluk şekillerinin fotoğrafları optik mikroskopuyla çekildi. Oluklara ait sıcaklık gradyenti, katı fazın ısı iletkenlik katsayısı ve sıvı fazın ısı iletkenlik katsayısının katı fazın ısı iletkenlik katsayısına oranı ölçüldü. Ölçülen deneysel parametreler kullanılarak Gibbs-Thomson katsayısı mevcut nümerik modelle hesaplandı. Katı-sıvı arayüzey enerjisi  $\Gamma = \sigma_{ks} / \Delta S_f$  denkleminde elde edildi. Buradaki  $\Gamma$ , Gibbs-Thomson katsayısı ve  $\Delta S_f$  ise erime noktasındaki birim hacim başına entropi değişimidir. Katı Bi fazının entropi değişimi fiziksel parametrelerden  $(6.998 \pm 0.35) \times 10^5 \text{ J/Km}^3$  olarak hesaplandı. Gözlenen katı Bi-sıvı BiCd tane arayüzey oluk şekillerinden katı Bi için Gibbs-Thomson katsayısı  $(1.03 \pm 0.04) \times 10^{-7} \text{ Km}$  olarak hesaplandı. Katı Bi-sıvı BiCd arayüzey enerjisi Gibbs-Thomson denkleminde  $(72.08 \pm 6.49) \times 10^{-3} \text{ Jm}^{-2}$  olarak ve tane arayüzey enerjisi ise  $(140.54 \pm 14.05) \times 10^{-3} \text{ Jm}^{-2}$  olarak tayin edildi.

## KATI Cd - SIVI BiCd ARAYÜZEY ENERJİSİNİN DENEYSEL TAYİNİ

M. EROL, K. KEŞLİOĞLU\*, N. MARAŞLI\* ve M. GÜNDÜZ\*

E.Ü., Yozgat Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Yozgat -Türkiye  
merol@erciyes.edu.tr

\*E. Ü., Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Kayseri – Türkiye  
kesli@erciyes.edu.tr, marasli@erciyes.edu.tr, gunduz@erciyes.edu.tr

Katı-sıvı enerjisi  $\sigma_{ks}$ , katı-sıvı arayüzeyinin birim alanını oluşturabilmek için gerekli olan enerji olarak tanımlanır. Katı-sıvı arayüzey enerjisini ölçmede kullanılan en yaygın metod 'tane arayüzey oluk metodu'dur. Tane arayüzey oluk metodu, Gibbs-Thomson denkleminin ( $\Gamma=\sigma_{ks}/\Delta S_f$ ) doğrudan uygulamasını içermektedir. Buradaki  $\Gamma$ , Gibbs-Thomson katsayısı ve  $\Delta S_f$  ise erime sıcaklığındaki birim hacim başına düşen entropi değişimidir. Denge durumunda katı-sıvı arayüzeyi ile tane arayüzeylerinin kesiştiği yerlerde oluşan olukların fotoğrafları metal mikroskopuyla çekildi. Katı Cd-sıvı CdBi tane arayüzey oluk şekilleri ve deneysel olarak ölçülen parametreler kullanılarak katı Cd fazının (Cd-0.03 at %Bi) Gibbs-Thomson katsayısı numerik metod ile  $(8.28 \pm 0.45) \times 10^{-8}$  Km olarak hesaplandı. Katı Cd - sıvı CdBi arayüzey enerjisi  $(81.22 \pm 7.31) \times 10^{-3} \text{ Jm}^{-2}$  ve tane arayüzey enerjisi ise  $(154.32 \pm 18.52) \times 10^{-3} \text{ Jm}^{-2}$  olarak elde edildi. Bi-54.6at%Cd alaşımının katı ve sıvı fazlarının ısı iletkenlik katsayıları da ölçüldü.

**BİS(N,N'-BİS(2,4-DİMETİLFENİL)İMİDAZOLİDİN-2-  
YLİDENE)DİKLOROPALADYUM(II)**

A. G. GÖKÇE, D. ALTINKULP, H. TÜRKMEN\*, M. AYGÜN, ve B.  
ÇETİNKAYA\*

*Dokuz Eylül Üniversitesi, Fizik Bölümü, İzmir,  
muhitti.aygun@deu.edu.tr*

*\*Ege Üniversitesi, Kimya Bölümü, İzmir,  
bekircetinkaya@hotmail.com*

Bu çalışmada  $\text{Pd}(\text{C}_{19}\text{H}_{22}\text{N}_2)_2\text{Cl}_2$  molekülünün kristal yapısı tek kristal x-ışını kırınımı yöntemiyle belirlenmiştir. Kristal yapı Patterson senteziyle (SHELXS97) çözülmüş ve tam matris en küçük kareler yöntemi kullanılarak (SHELXL97)  $R=0.0463$  değerine arıtılmıştır. Yapı monoklinik kristal sisteminde ve uzay grubu  $P2_1/n$  dir. Yapıya ait örgü parametreleri şunlardır:  $a=13.8713(9)$  Å,  $b=12.1365(6)$  Å,  $c=21.5499(15)$  Å,  $\beta=93.187(5)^\circ$ ,  $V=3622.3(4)$  Å<sup>3</sup>,  $Z=4$ . Metal merkezine bağlı ligand atomlar hafif bozulmuş kare düzlemsel koordinasyona sahiptir. Pd metal merkezine bağlı ligantların bağ uzunlukları klorlar için 2.3047(13), 2.3163(12), karbonlar için 2.007(5), 2.022(4) Å bağ açıları ise (C11-Pd-Cl2)  $178.9(2)^\circ$  ve (C1-Pd-C2)  $175.54(6)^\circ$  dir. Aynı karbon grubuna bağlı fenil halkalarının oluşturduğu düzlemlerin arasındaki dihedral açılar  $15.4(3)^\circ$  ve  $40.2(2)^\circ$  dir. Kristal yapı C-H...Cl tipi moleküllü ve moleküller arası etkileşimlerle kararlı durumdadır.