

T.C.
AHI EVRAN ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**DÖRT BOYUTLU ISING MODELİNDE DÜZEN
PARAMETRESİ İHTİMALİYET DAĞILIMI İÇİN
SONLU ÖRGÜ ÖLÇEKLEME BAĞINTILARININ
CREUTZ CELLULAR AUTOMATON İLE
İNCELENMESİ**

Mehtap KAPLANTEPE

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

KIRŞEHİR
HAZİRAN 2013

**T.C.
AHİ EVRAN ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**DÖRT BOYUTLU ISING MODELİNDE DÜZEN
PARAMETRESİ İHTİMALİYET DAĞILIMI İÇİN
SONLU ÖRGÜ ÖLÇEKLEME BAĞINTILARININ
CREUTZ CELLULAR AUTOMATON İLE
İNCELENMESİ**

Mehtap KAPLANTEPE

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI**

DANIŞMAN

Yrd. Doç. Dr. Ganimet MÜLAZIMOĞLU KIZILIRMAK

**KIRŞEHİR
HAZİRAN 2013**

Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürlüğü'ne

Bu çalışma jürimiz tarafından Fizik Anabilim Dalında YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak kabul edilmiştir.

Başkan Prof. Dr. Ziya MERDAN

Üye Yard. Doç. Dr. Ganimet M. KIZILIRMAK

Üye Yard. Doç. Dr. Hülya ÖZTÜRK

Onay

Yukarıdaki imzaların, adı geçen öğretim üyelerine ait olduğunu onaylarım.

...../...../20....

Doç. Dr. Mahmut YILMAZ

Enstitü Müdürü

ÖZ

Bu çalışmanın amacı, dört boyutlu Ising modelinde düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı için sonlu örgü ölçekleme bağıntılarının Creutz Cellular Automaton ile incelenmesidir

En yakın komşu etkileşmeli dört boyutlu Ising modeli doğrusal boyutu $L=6,8,10$ olan periyodik sınır şartlı örgülerde ve sonsuz örgü kritik sıcaklığı yakınında Creutz Cellular Automaton'ında simülasyonları yapılmıştır. Sonsuz örgü kritik sıcaklık değerleri, düzen parametresi, manyetik alınganlık ve öz ısı kritik üsleri sonlu örgü ölçekleme bağıntıları kullanılarak simülasyon sonuçlarından elde edilmiştir. Dört boyutlu Ising modelin düzen parametresi olasılık dağılımları kritik sıcaklıkta hesaplanmıştır. Düzen parametresi olasılık dağılımı için sonlu örgü ölçekleme ilişkisi Creutz Cellular Automaton simülasyonları ile test edilmiş ve nümerik olarak doğrulanmıştır. Analitik olasılık fonksiyonlarının sabitleri kritik noktada sayısal olarak oluşturulan olasılık fonksiyonuna fit edilerek elde edilmiştir.

Anahtar Kelimeler: Ising Model, Cellular Automaton, Düzen Parametresi İhtimaliyet Dağılımı

ABSTRACT

The aim of this study is study of the finite-size scaling relation for the order-parameter probability distribution of the four-dimensional Ising model with Creutz Cellular Automaton.

The four-dimensional Ising model with nearest-neighbor pair interactions is simulated on the Creutz cellular automaton near the infinite-lattice critical temperature with the linear dimensions $L=6,8$ and 10 . The critical temperature values of infinitive lattice, the critical exponents for the order parameter, the magnetic susceptibility and the specific heat are obtained from the results of simulations by using finite-size scaling relations. The other parameter probability distribution for Ising Model are calculated at the critical temperature. The finite size scaling relation for he order parameter probability distiribution is tested and verified nümerically by the Creutz Cellular Automaton simulation. The constants of the analytical function are estimated by fitting it to probability function obtained numerically at the finite size critical point. For the large finite size, the analytical function is described the universal shape of order parameter probability distiribution function.

Key Words: Ising Model, Cellular Automaton, Order parameter probability distiribution

TEŐEKKÖR

Çalıőmalarım boyunca deęerli yardım ve katkılarıyla beni yönlendiren Hocam Yrd. Doç. Dr. Ganimet MÖLAZIMOęLU KIZILIRMAK' a, manevi destekleriyle beni hiçbir zaman yalnız bırakmayan canım aileme, çalıőmalarımda yardımlarını esirgemeyen arkadaşlarım Ayőegöl AZİLİ ve őükriye ÖZKAN'a ve çok kıymetli eőim Tahsin KAPLANTEPE'ye teőekkörü bir borç bilirim.

İÇİNDEKİLER

ÖZ	i
ABSTRACT	ii
TEŞEKKÜR	iii
İÇİNDEKİLER	iv
TABLolar DİZİNİ	vii
ŞEKİLLER DİZİNİ	viii
SİMGELER VE KISALTMALARxi
1. GİRİŞ	1
1.1. FAZ GEÇİŞİ	1
1.2. EVRENSEL DAVRANIŞ	6
1.3. DÜZEN PARAMETRESİ	7
1.4. TERMODİNAMİK NİCELİKLER	7
1.4.1. Manyetik Alınganlık	9
1.4.2. İç Enerji	10
1.4.3. Öz Isı	11
1.5. KENDİLİĞİNDEN MIKNATISLANMA M , MANYETİK ALINGANLIK χ VE ÖZİSİ C 'nin SICAKLIK BAĞIMLILIKLARI	12
2.KAYNAK ARAŞTIRMASI	15
3. MATERYAL VE METOD	19
3. 1. ISING MODEL	19

3.1.1. Dört Boyutlu Ising Model.....	20
3.1.2. Ising Modelin Simülasyonu İçin Algoritmalar	20
3.1.2.1. Creutz' un gezgin “ Demon” algoritması.....	23
3.1.2.2. “Cellular automaton” lar	23
3.1.2.3. Q2R “cellular automaton”ı.....	25
3.1.2.4. Creutz “cellular automaton”ı.....	25
3.1.2.5. Cellular automaton'ın standart algoritması	26
3.1.3. Creutz Cellular Automatonda Termodinamik Niceliklerin Hesabı	27
3.2 SONLU ÖRGÜ ÖLÇEKLEME	29
3.2.1. Termodinamik Nicelikler İçin Sonlu Örgü Ölçekleme Bağlılıları	29
3.2.2. Dört Boyutlu Ising Modelinde Düzen Parametresi İhtimaliyet Dağılımı İçin Sonlu Örgü Ölçekleme Bağlılısı	32
3.2.2.1. Düzen parametresi olasılık dağılımı sonlu örgü ölçekleme fonksiyonunun kritik noktadaki analitik ifadesi.....	34
4. BULGULAR VE TARTIŞMA	36
4.1. TERMODİNAMİK NİCELİKLER ÜZERİNE ÖRGÜ BOYUTU ETKİSİ.....	36
4.1.1. Termodinamik Niceliklerin Sıcaklık Değişimleri	36
4.1.2. Sonlu Örgü Sıcaklık Değerlerinden Sonsuz Örgü Sıcaklık Değerlerinin Belirlenmesi	38

4.2. DÜZEN PARAMETRESİ VE MANYETİK ALINGANLIK KRİTİK ÜSLERİ	42
4.3. SONLU ÖRGÜ ÖLÇEKLEME FONKSİYONLARININ TESPİTİ.....	49
4.3.1. Kritik üsler	52
4.4. DÜZEN PARAMETRESİ İHTİLAMİYET DAĞILIMI İÇİN SONLU ÖRGÜ ÖLÇEKLEME BAĞINTILARININ TESPİTİ	53
5. SONUÇ VE ÖNERİLER.....	60
KAYNAKLAR	64

TABLolar DİZİNİ

Tablo	Sayfa
Tablo 1.1. Bazı atomların çiftlenmemiş iç 3d elektronları.....	2
Tablo 4.1. $6 \leq L \leq 10$ Lineer boyutlu örgülerde manyetik alınganlık maksimumlarından elde edilen $kT_c^Z(L)/J$ ve öz ısı maksimumlarından elde edilen $kT_c^C(L)/J$ sonlu örgü kritik sıcaklık değerleri	38
Tablo 4.2. $6 \leq L \leq 10$ lineer boyutlu sonlu örgülerin manyetik alınganlık kritik sıcaklığı $T_c^Z(L)$ ve özısı kritik sıcaklığı $T_c^C(L)$ 'ye karşı $L^{-1/\nu}$ ve $L^{-1/\nu} \log^{-1/6} L$ ($\nu = 1/2$) grafiklerinden elde edilen $T_c(\infty)$ sonsuz örgü kritik sıcaklık değerleri.....	41
Tablo 4.3. Farklı çalışmalar ve bu çalışmada hesaplanan sonsuz örgü kritik sıcaklık değerleri	41
Tablo 4.4. Doğrusal boyutu $6 \leq L \leq 10$ olan periyodik sınır şartlı örgülerde düzen parametresi kritik üsleri (β)	44
Tablo 4.5. Doğrusal boyutu $6 \leq L \leq 10$ olan periyodik sınır şartlı örgülerde düzen parametresi kritik üsleri ($\bar{\beta}$)	44
Tablo 4.6. Doğrusal boyutu $6 \leq L \leq 10$ olan periyodik sınır şartlı örgülerde manyetik alınganlık kritik üsleri (γ)	44
Tablo 4.7. Doğrusal boyutu $6 \leq L \leq 10$ olan periyodik sınır şartlı örgülerde manyetik alınganlık kritik üsleri ($\bar{\gamma}$)	45
Tablo 4.8. Analitik sonlu örgü ölçekleme fonksiyonun parametreleri için, bu fonksiyonun L örgü boylarına ait düzen parametresi olasılık dağılımlarının sonlu örgü ölçekleme çizimlerine uydurulması ile elde edilen değerler	57
Tablo 4.9. Dört boyutlu spin-1/2 Ising modelin Monte Carlo algoritması kullanılarak belirlenmiş analitik fonksiyon parametreleri	58

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil	Sayfa
Şekil 1.1. $M(H)$ grafikleri; a) $T < T_c$, b) $T \approx T_c$, c) $T > T_c$	5
Şekil 1.2. (T, H) yarı düzlemi. Hat boyunca M süreksiz diğer yerlerde H ve T 'nin analitik bir fonksiyonudur.....	5
Şekil 1.3. $H=0$ da kendiliğinden manyetizasyon $ M $ 'nin sıcaklıkla değişimi.....	6
Şekil 1.4. Sonlu örgüler için manyetik alınganlığın T_c civarındaki davranışı	9
Şekil 1.5. Sonsuz örgüler için manyetik alınganlığın T_c civarındaki davranışı	10
Şekil 1.6. Sonlu örgüler için özısının T_c civarındaki davranışı.....	11
Şekil 1.7. Sonsuz örgüler için özısının T_c civarındaki davranışı	12
Şekil 3.1. $d=1,2,3$ ve 4 boyutlu örgülerin geometrik yapıları ve izdüşümleri	19
Şekil 4.1. Kendiliğinden mıknatıslanma (düzen parametresinin) sıcaklık ile değişimi ($6 \leq L \leq 10$)	37
Şekil 4.2. Manyetik alınganlık (X) 'in sıcaklık ile değişimi ($6 \leq L \leq 10$).....	37
Şekil 4.3. Öz ısı (C) 'nin sıcaklık ile değişimi ($6 \leq L \leq 10$).....	38
Şekil 4.4. Sonlu örgülerin manyetik alınganlık kritik sıcaklığı $T_c^X(L)$ 'ye karşı $L^{-1/\nu}$ grafiği ($\nu = 1/2$)	39
Şekil 4.5. Sonlu örgülerin manyetik alınganlık kritik sıcaklığı $T_c^X(L)$ 'ye karşı $L^{-1/\nu} \log^{-1/6} L$ grafiği ($\nu = 1/2$).....	39
Şekil 4.6. Sonlu örgülerin öz ısı kritik sıcaklığı T_c^C 'ye karşı $L^{-1/\nu}$ grafiği ($\nu = 1/2$).....	40
Şekil 4.7. Sonlu örgülerin öz ısı kritik sıcaklığı T_c^C 'ye karşı $L^{-1/\nu} \log^{-1/6} L$ grafiği ($\nu = 1/2$).....	40
Şekil 4.8. Binder parametresi g_L 'nin sıcaklıkla değişim grafiği.	42

Şekil 4.9. a. $6 \leq L \leq 10$ örgü aralığında sonlu örgü kritik sıcaklıkları dikkate alınarak $1/L$ 'ye karşı $\beta(L)$ grafiği.	46
b. $6 \leq L \leq 10$ örgü aralığında sonsuz örgü kritik sıcaklıkları dikkate alınarak $1/L$ 'ye karşı $\beta(L)$ grafiği.....	46
Şekil 4.10. a. $6 \leq L \leq 10$ örgü aralığında sonlu örgü kritik sıcaklıkları dikkate alınarak $1/L$ 'ye karşı $\bar{\beta}(L)$ grafiği.	47
b. $6 \leq L \leq 10$ örgü aralığında sonsuz örgü kritik sıcaklıkları dikkate alınarak $1/L$ 'ye karşı $\bar{\beta}$ grafiği.....	47
Şekil 4.11. a. $6 \leq L \leq 10$ örgü aralığında sonlu örgü kritik sıcaklıkları dikkate alınarak $1/L$ 'ye karşı $\gamma(L)$ grafiği.	48
b. $6 \leq L \leq 10$ örgü aralığında sonsuz örgü kritik sıcaklıkları dikkate alınarak $1/L$ 'ye karşı γ grafiği.....	48
Şekil 4.12. a. $6 \leq L \leq 10$ örgü aralığında sonlu örgü kritik sıcaklıkları dikkate alınarak $1/L$ 'ye karşı $\bar{\gamma}(L)$ grafiği.	49
b. $6 \leq L \leq 10$ örgü aralığında sonsuz örgü kritik sıcaklıkları dikkate alınarak $1/L$ 'ye karşı $\bar{\gamma}$ grafiği.....	49
Şekil 4.13. $6 \leq L \leq 10$ örgülerinde logaritmik düzeltmeli sonlu örgü ölçekleme fonksiyonu için $M_L L^{-\beta/\nu} \log^{-1/4} L$ 'nin $tL^{1/\nu} \log^{1/6} L$ 'ye karşı değişimi	50
Şekil 4.14. $6 \leq L \leq 10$ örgülerinde logaritmik düzeltmeli sonlu örgü ölçekleme fonksiyonu için $\chi_L L^{-\gamma/\nu} \log^{-1/2} L$ 'nin $tL^{1/\nu} \log^{1/6} L$ 'ye karşı değişimi.	51
Şekil 4.15. $6 \leq L \leq 10$ örgülerinde logaritmik düzeltmeli sonlu örgü ölçekleme fonksiyonu için $(C_L - b)L^{-\alpha/\nu} \log^{-1/3} L$ 'nin $tL^{1/\nu} \log^{1/6} L$ 'ye karşı değişimi.	51
Şekil 4.16. Örgü boyutu $6 \leq L \leq 10$ aralığında $\log(C_L^{\max} / \log^{1/3} L)$ 'ye karşı $\log(L)$ 'nin grafiği	52

Şekil 4.17. Örgü boyutu $6 \leq L \leq 10$ aralığında $\log(M_L \log^{-1/4} L)$ 'ye karşı $\log(L)$ grafiği.....	53
Şekil 4.18. Örgü boyutu $6 \leq L \leq 10$ aralığında $\log(\chi_L \log^{-1/2} L)$ 'ye karşı $\log(L)$ grafiği.....	53
Şekil 4.19. Düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının, (P_L) , indirgenmiş sıcaklığın $t = 0$ değerinde ve doğrusal boyutları $L = 6,8$ ve 10 olan örgüler için düzen parametresine (M) karşı çizimi ($\beta/\nu=1$ ve $T_c=6.6807$).	54
Şekil 4.20. Düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının, (P_L) , indirgenmiş sıcaklığın $t = 0$ değerinde ve doğrusal boyutları $L = 6,8$ ve 10 olan örgüler için düzen parametresine (M) karşı sonlu örgü ölçekleme çizimi. Logaritmalı düzeltmeler göz önüne alınmaktadır ($\beta/\nu=1$ ve $T_c=6.6807$).	55
Şekil 4.21. $P(M)$ 'nin $L=6$ için M 'ye karşı analitik ifadesine göre yapılan fit.	56
Şekil 4.22. $P(M)$ 'nin $L=8$ için M 'ye karşı analitik ifadesine göre yapılan fit.	56
Şekil 4.23. $P(M)$ 'nin $L=10$ için M 'ye karşı analitik ifadesine göre yapılan fit.	57
Şekil 4.24. Doğrusal boyutları $L = 6,8$ ve 10 olan örgüler için (P_L) 'nin $M= 0$ 'daki ihtimaliyet dağılımı ve sıcaklığa karşı çizimi	59
Şekil 4.25. Doğrusal boyutları $L = 6,8$ ve 10 olan örgüler için (P_L) 'nin $M= 0$ 'daki ihtimaliyet dağılımına karşı sonlu örgü ölçekleme çizimi. Logaritmalı düzeltmeler göz önüne alınmaktadır. ($\beta/\nu=1$ ve $T_c=6.6807$)	59

SİMGELER VE KISALTMALAR

Bu çalışmada kullanılan bazı simgeler ve kısaltmalar açıklamaları ile birlikte aşağıda sunulmuştur.

Simgeler	Açıklama
T	Sıcaklık
T_c	Kritik Sıcaklık
d	Uzay Boyutu
M	Manyetizasyon
β, β'	Manyetizasyon Kritik Üssü
χ	Manyetik Alınganlık
γ, γ'	Manyetik Alınganlık Kritik Üssü
C	Özısı
α, α'	Özısı Kritik Üssü
v	Korelasyon Uzunluğu Kritik Üssü
t	İndirgenmiş Sıcaklık
∞	Sonsuz
k_B	Boltzmann Sabiti
< >	Beklenen Değer ve Ortalama

Kısaltmalar	Açıklama
BEG	Blume Emery Griffiths
CA	Cellular Automaton
CCA	Creutz Cellular Automaton
MC	Monte Carlo
RG	Renormalizasyon Grup Teorisi

1. GİRİŞ

1.1. FAZ GEÇİŞİ

İnsanlar çağlar öncesinden beri birçok konu üzerinde düşünmüş, araştırmalar yapmış ve hayatlarını daha yaşanılır hale getirmeye çalışmışlardır. Bu konulardan biride son zamanlarda üzerinde oldukça fazla çalışılan bilgi depolama, tıp, elektronik ve haberleşme başta olmak üzere birçok teknolojik alandaki gelişmeye öncülük eden manyetik faz geçiştir.

Faz geçişi; kararlı yapıdaki bazı maddelerin belirli şartlar altında bir evreden diğer bir evreye ani geçişi olarak tanımlanabilir. Günlük hayatta faz geçişine en iyi örnek suyun faz değiştirmesidir. Ancak bunun dışında faz geçişine birçok örnek verilebilir. Sıvıdan gaza, paramanyetik fazdan ferromanyetik faza, normaliletken fazdan süperiletken faza geçişler en çok bilinen ve deney ortamlarında gözlenebilen faz geçişleridir [1].

Herhangi bir maddenin ölçülen manyetik dipol momentinin, maddenin hacmine oranı maddenin mıknatıslanması olarak tanımlanır.

Bir elektron spininden oluşan iç manyetik momentin Bohr magnetonu olarak bilinen ifadesi

$$\mu_B = \frac{e}{2m} \hbar = 9,27 \cdot 10^{-24} J / T \quad (1.1)$$

ile verilir.

Çok sayıda elektronu bulunan atomlarda veya iyonlarda, genellikle elektron spinleri zıt yönelecek şekilde çiftler oluştururlar. Bu da spin manyetik momentinin birbirlerini yok etmeleri demektir. Fakat tek sayıda elektronu bulunan atomların en azından bir tane çiftlenmemiş elektronu ve buna karşılık gelen bir spin manyetik

momenti olması gerekir. Mıknatıslanma, tamamlanmamış yörüngelerdeki çiftlenmemiş elektron spininden kaynaklanmaktadır. Tablo 1.1'de görüldüğü gibi Demir (Fe), Kobalt (Co) ve Nikel (Ni)' de çiftlenmemiş iç 3d elektronları mıknatıslığın nedenidir.

Tablo 1.1. Bazı atomların çiftlenmemiş iç 3d elektronları

Atom	Elektron adedi	Çiftlenmemiş 3d elektronları	4s elektronları
V	23	3	2
Cr	24	5	1
Mn	25	5	2
Fe	26	4	2
Co	27	3	2
Ni	28	2	2
Cu	29	0	1

Manyetik faz geçişi maddenin mıknatıslanmasındaki değişmeye dayanmaktadır. Genellikle, atomların gelişigüzel yöneliminden dolayı dipoller birbirinin etkisini yok eder. Fakat bir manyetik alan uygulandığında, bu dipollerin net bir hizalanışı oluşur ve ortam manyetik olarak kutuplanmış ya da mıknatıslanmış hale gelir [2].

Bilindiği gibi bütün maddeler az veya çok manyetik özelliğe sahiptir ve manyetizma, maddenin atom ve kristal yapılarına bağlıdır. Maddelerin manyetik özelliklerinin büyüklükleri ve sıcaklığa bağımlılıkları farklıdır. Manyetik maddeler uygulanan manyetik alana karşı davranışlarına göre sınıflandırılabilir. Manyetizmanın bazı türleri şunlardır:

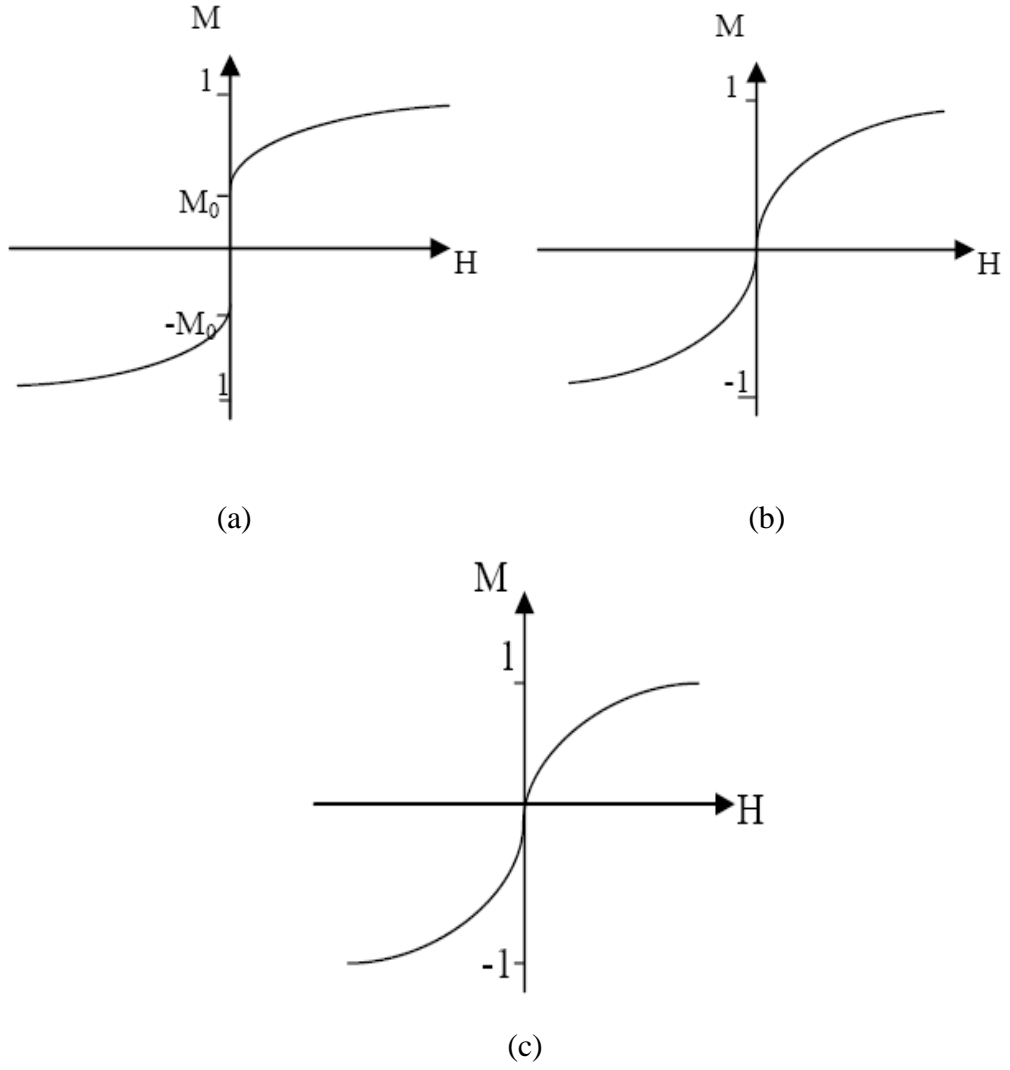
- a) Diyamanyetizma
- b) Paramanyetizma
- c) Ferromanyetizma
- d) Ferrimanyetizma
- e) Antiferromanyetizma

f) Zorlanmış ferromanyetizma

Manyetik özelliklerine bağlı olarak maddeler paramanyetik, diyamanyetik ve ferromanyetik olmak üzere başlıca üç sınıfa ayrılabilir. Paramanyetik maddeler uygulanan dış manyetik alanla aynı yöne yönelirler. Fakat atomların sahip oldukları sürekli (daimi) manyetik dipol momentleri birbirleri ile çok zayıf etkileşimde bulduklarından dış manyetik alan kaldırıldığı zaman gelişigüzel yönelirler. Sürekli manyetik dipol momente sahip atomların varlığından dolayı paramanyetik maddeler pozitif fakat küçük bir manyetik alınganlığa sahiptir. Diyamanyetik maddeler bir dış manyetik alan uygulandığında, uygulanan alana zıt yönde manyetik moment oluştururlar. Sürekli manyetik momente sahip olmayan atomlardan oluşur, çok küçük ve negatif bir manyetik alınganlığa sahiptirler. Ferromanyetik maddeler ise zayıf bir dış alanda dahi birbirine paralel olarak yönelmeye çalışan manyetik momentlere sahiptir. Manyetik momentler bir kere paralel hale getirildikten sonra dış alan ortamdaki kaldırılabilir madde mıknatıslanmış olarak kalır [3]. Bu devamlı yönelim komşu manyetik momentler arasındaki kuvvetli etkileşimden kaynaklanmaktadır. Ferromanyetik maddelerin mıknatıslanması aynı zamanda sıcaklığa bağlı bir niceliktir. Sürekli magnetler ısıtıldığında, belli bir sıcaklığın üzerinde bu özelliğinin kayıp olduğu gözlenir. Bu geçiş sıcaklığı Cruie sıcaklığı olarak bilinir. Ferromanyetik maddenin sıcaklığı Cruie sıcaklığına doğru düşürüldüğünde, bütün atomik dipoller en düşük enerji haline doğru hareket ederler ve dolayısıyla ortak bir doğrultuda dizilirler. Cruie sıcaklığına ulaşıldığında termal titreşimlerin komşu manyetik dipollerin aynı dizilmelerine müsaade edecek kadar zayıf olduğunu görürüz. Bunun neticesinde aynı dizilmiş manyetik dipoller madde içerisinde bir manyetik alan oluşturur ve böylece diğer komşu dipoller aynı yönde dizilmeye meylederler, bu da manyetik alan şiddetinin artmasına neden olur. Neticede düzensiz paramanyetik durumdan düzenli manyetik durumu geçiş çok küçük bir sıcaklık aralığında meydana gelir. Cruie sıcaklığının altında atomik dipollerin düzeni tabii olarak bu kanuna uyar. Demir, kobalt ve nikelde Cruie sıcaklığı oda sıcaklığının oldukça üzerindedir. Sıcaklık arttırıldığında iyonların termal titreşimleri o kadar büyür ki manyetik dipollerin dizilişi bozulur T_c 'nin üstündeki sıcaklıklarda madde paramanyetik fazda bulunur [4]. Kritik sıcaklık ve civarında sistemin ve sistemi

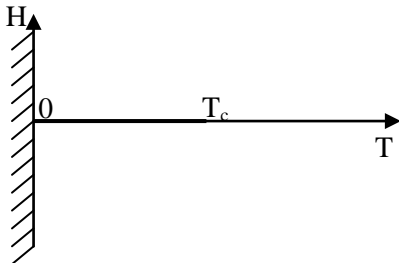
oluşturan parçacıkların davranışlarını incelemek, faz geçişini anlamak adına önemlidir. Kritik üsteller kavramı tam da bu noktada ortaya çıkar. Sistemin termodinamik fonksiyonlarının, kritik sıcaklık civarındaki davranışı bu üsteller ile anlatılır. Bir termodinamik fonksiyona ait kritik üstel, o termodinamik fonksiyonun, sıcaklık kritik sıcaklığa gittiğinde gösterdiği davranışı (örneğin, ıraksıyorsa ıraksama hızını) anlatır. Bir sisteme ait kritik üsteller arasında eşitsizlikler ve bazı eşitlikler yazılabilir [5].

Kendiliğinden mıknatıslanma ferromanyetizmanın tanımlayıcı özelliğidir. Ferromanyetizma son yörüngesinde elektron çiftlenimi olmayan atomlarda, tek kalmış elektronun spininden kaynaklanır. Ferromanyetik maddeler, zayıf bir dış manyetik alanda bile birbirine paralel olarak yönelmeye çalışan atomik manyetik dipol momentlere sahiptirler. Manyetik dipol momentler paralel hale getirildikten sonra, dış alan ortamdaki kaldırılabilir madde mıknatıslanmış olarak kalacaktır. Bu sürekli yönelim komşu olan manyetik momentler arasındaki etkileşimden kaynaklanır. Ferromanyetik maddelerde ne kadar çok spin aynı yöne yönelirse spin sisteminin etkileşme enerjisi de o kadar düşük olacaktır. Ferromanyetizma aynı zamanda sıcaklığa bağlı bir özelliktir. Sıcaklık mutlak sifira ($0 \text{ }^\circ\text{K}$) ulaştığında spinlerin hepsi aynı yöndedir ve sistem en düşük enerji durumundadır. Bu sistem ferromanyetiktir. Sistemin T sıcaklığı yükselirken spinlerde rastgele yönelmeye başlar. Yani maddenin mıknatıslanması azalarak Curie sıcaklığı adı verilen T_c sıcaklığında sifir olur. Curie sıcaklığının üstündeki sıcaklıklarda spinler rastgele yöneldiklerinden dolayı madde paramanyetik fazda bulunur. Bu durumda sıcaklıktan kaynaklanan hareketler, komşu atomlar arası etkileşmelerden ileri gelen kuvvetleri yenecek kadar büyür. Kritik sıcaklık dışardan uygulanan manyetik alanla değişebilir. Dış alanın varlığı kritik sıcaklığın değerini büyütür. Yani madde daha yüksek sıcaklıkta faz değiştirir. Örneğin oda sıcaklığındaki demir çubuk incelendiğinde sıcaklık artarken sifir manyetik alandaki kendiliğinden manyetizasyonun (M_0) azaldığı görülür. Eğer sıcaklık kritik sıcaklığa (T_c) yükselirse Şekil 1.1’de görüldüğü gibi M_0 sifira gider ve $M(H)$, $H=0$ ’ da sonsuz eğimli sürekli bir fonksiyon haline gelir.



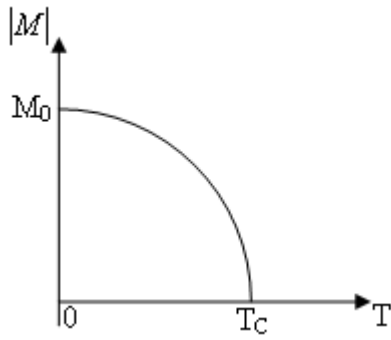
Şekil 1.1. $M(H)$ grafikleri; a) $T < T_c$, b) $T \approx T_c$, c) $T > T_c$

Eğer sıcaklık daha da artarsa $M(H)$ sürekli bir fonksiyon olarak kalır ve $H=0$ 'da analitiktir (Şekil 1.1.c). Bu tespitler Şekil 1.2'deki (T,H) düzleminde kolayca özetlenebilir.



Şekil 1.2. (T,H) yarı düzlemi. Hat boyunca M süreksiz diğer yerlerde H ve T 'nin analitik bir fonksiyonudur.

Sıcaklık eksenini boyunca 0'dan T_c 'ye bir hat vardır. Manyetizasyon M hattın sağındaki tüm noktalarda, H 'nin ve T 'nin analitik bir fonksiyonudur. Hat üzerinde ise süreksizdir. Bu hatta “faz geçiş çizgisi” denir. $(T_c,0)$ son noktası “kritik nokta” olarak bilinir. $M(H,T)$ fonksiyonu bu noktada ıraksak olmalıdır. Kendiliğinden manyetizasyon T 'nin fonksiyonudur ve H 'nin pozitif değerleri için $M_0(T) = \lim_{H \rightarrow 0^+} M(H,T)$ limiti ile tanımlanır. Kritik sıcaklığın altında ($T < T_c$) pozitif, kritik sıcaklığın üstünde ($T > T_c$) ise sıfırdır (Şekil 1.3).



Şekil 1.3. $H=0$ da kendiliğinden manyetizasyon $|M|$ 'nin sıcaklıkla değişimi

Paramanyetik maddeler bir dış alan içerisine konulduğu zaman atomik dipoller alan yönüne yönelmeye zorlanırlar. Bu durumda madde mıknatıslanmış olur. Eğer dış manyetik alan kaldırılırsa manyetik dipol momentler eski hallerini alırlar. Atomları, sürekli manyetik dipol momente sahip olmayan maddelere ise diamanyetik maddeler denir. Faz geçişi yapan bir maddede T_c 'ye yakın T sıcaklığı için düzene olan eğilim ile düzensizliğe olan eğilim hemen hemen birbirini dengeler. $T < T_c$ durumunda düzen baskın çıkar ve bu düzenli faz ferromanyetik haldir. $T > T_c$ durumunda ise düzensizlik baskın olur ve düzensiz faz paramanyetik hal olarak bilinir[1,3,6].

1.2. EVRENSEL DAVRANIŞ

Oksijen, Azot gibi gazların sıvı ve buhar yoğunluklarının gerçek değişimleri evrensel bir davranış özelliği gösterir. Sıcaklık ve yoğunluk normalize edildiğinde farklı gazlar için data değerleri birlikte var olma eğrisi üzerine düşer. Birlikte var

olma eğrisi parabolik özellik taşır. $T \rightarrow T_c$ olduğu zaman sıvı ve buhar yoğunlukları farklı $\rho_{\text{sıvı}} - \rho_{\text{buhar}} \propto |t|^\beta$ sıvı buhar kritik üste bağlı olarak sıfıra gider. Burada t boyutsuz birimlerde sıcaklığın kritik değerde sapmasını ölçen indirgenmiş sıcaklık, β ise kritik üs olup sıvının cinsinden bağımsızdır. Evrensellik farklı sistemlerin aynı kritik üslere sahip olması olarak adlandırılır. Ksenon (Xe) ve Kükürt Florür (SF_2) farklı kritik sıcaklıklara sahip oldukları halde kritik üs değerleri aynıdır. Yani aynı evrensellik sınıfındaki tüm sistemler aynı kritik üslere sahiptirler [7,8].

1.3. DÜZEN PARAMETRESİ

Adından da anlaşıldığı gibi ele alınan sistemin ne kadar düzenli olduğunu anlatan bir değişkendir. Örneğin manyetik sistemler için manyetizasyon böyle bir parametredir. Manyetizasyon sıfır ise sistem tamamen düzensiz bir haldedir. Düzen parametresi geçişin bir tarafında (örneğin yüksek sıcaklık tarafında) değişmez bir şekilde hiç kalmazken diğer tarafında sıfırdan itibaren değişir. Düzen parametresini ψ ile gösterirsek, ψ 'nin uzay ve zaman dalgalanmalarını kullanarak olayı yorumlayabiliriz. Ama uygulamada daha çok ψ 'nin sabit sıcaklıkta uzun bir periyot üzerinden ortalaması olan termal ortalaması kullanılır. α , β , γ ve δ gibi kritik üsler ψ 'nin termal ortalamasının sıcaklık, manyetik alan vb. ile değişimini verir. Düzen parametresini seçmek için belli bir kural yoktur, problemin doğasına uygun parametre sıvı-gaz geçişlerinde yoğunluk, akışkan karışımları için mol kesirleri arasındaki fark düzen parametresi olarak seçilir [9].

1.4. TERMODİNAMİK NİCELİKLER

Termodinamik nicelikler genel olarak spin başına serbest enerjiden elde edilmektedir ve serbest enerji aşağıdaki gibi tanımlanabilir.

$$f(H,T) = -kTN^{-1} \log Z(H,T) \quad (1.2)$$

Serbest enerjiye bağlı olarak termodinamik nicelikler aşağıdaki ifadelerle tanımlanmaktadır.

$$H_i(H, T) = -kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{f(H, T)}{kT} \right) \quad (1.3)$$

$$C(H, T) = \frac{\partial}{\partial T} H_i(H, T) \quad (1.4)$$

$$M(H, T) = -\frac{\partial}{\partial H} \left(\frac{f(H, T)}{kT} \right) \quad (1.5)$$

$$\chi(H, T) = \frac{\partial}{\partial H} M(H, T) \quad (1.6)$$

Burada H_i iç enerji, C özısı, M mıknatıslanma ve χ ise manyetik alınganlıktır.

Manyetizasyon cinsinden ifade edilebilen bir nicelik olan Binder kümülanı (U_L) ise aşağıdaki ifade ile tanımlanır [10].

$$U_L = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3 \langle M^2 \rangle^2} \quad (1.7)$$

Farklı uzunlukta örgüler için Binder kümülanının sıcaklıkla değişimine bakıldığında farklı örgülere ait verilerin bir sıcaklıkta kesiştiği görülür. Bu kesim noktasına karşılık gelen sıcaklık, $T_c(\infty)$, sonsuz örgü kritik sıcaklığıdır.

İkinci derece faz geçişlerinde mıknatıslanma düzen parametresi ismini alır. Faz geçişi serbest enerji veya onun türevlerinde singülerlik (ıraksama) oluştuğunda ortaya çıkar. Ising model faz geçişi yapabilen sistemleri temsil eden bir modeldir. İkili alaşım, örgü gazı modelleri uygun parametrelerle Ising modele özdeş hale getirilebilir. Fiziksel sistemlerin dışında birçok alandaki problemler de Ising modelle çözülebilir. Bu nedenle Ising modelin çözümü oldukça önem kazanmaktadır.

1.4.1. Manyetik Alınganlık

Manyetik alınganlık χ ;

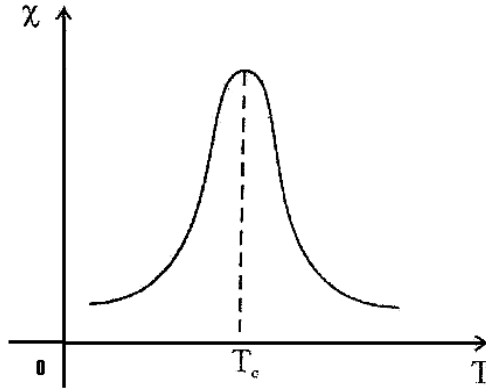
$$\chi(H, T) = \frac{\partial M}{\partial H} \quad (1.8)$$

$$\chi(H, T) = \left(\frac{N}{kT}\right) \{ \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \} \quad (1.9)$$

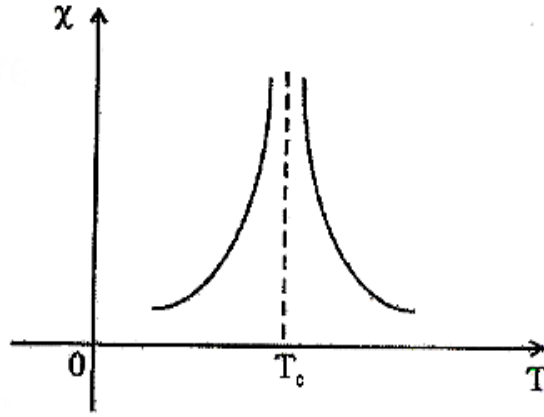
şeklinde ifade edilir.

$$M = \sum_i S_i \quad (1.10)$$

dir. Manyetik alınganlık pozitif bir büyüklüktür. Manyetik alınganlık sonsuz örgüler için T_c ' de süreksizliğe sahiptir. Sonlu örgülerde ise T_c ' de maksimum değere sahiptir [11].



Şekil 1.4. Sonlu örgüler için manyetik alınganlığın T_c civarındaki davranışı



Şekil 1.5. Sonsuz örgüler için manyetik alınganlığın T_c civarındaki davranışı

Kritik sıcaklık (T_c) noktasında ferromanyetik maddenin kendiliğinden manyetizasyonu sıfırdır. Manyetik alınganlık ve başlangıç duyarlılık ;

$$\chi_T(H, T) = \frac{\partial M}{\partial H_T} \quad (1.11)$$

$$\chi_T^0(T) = \lim_{H \rightarrow \infty} \chi_T(T, H) \quad (1.12)$$

şeklindedir. χ_T bir mıknatısın manyetizasyonundan kolaylıkla bulunur. χ_T kritik noktada ıraksar. χ_T düzen parametresinin manyetik alanla değişiminden elde edilir. χ_T manyetik alınganlık γ üstüyle karakterize edilir ve $\chi \approx \frac{1}{t^\nu}$ dir. $H=0$ 'da kendiliğinden manyetizasyon sıfır değildir. Sürekli simetriye sahiptir. $\chi_T(H, T), T < T_c$ için $H \rightarrow 0^+$ giderken ıraksar. χ' in bağlı olduğu sıcaklık γ' üstünü verir [12].

1.4.2 İç Enerji

Spin başına serbest enerji;

$$f(H, T) = -kT \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \ln Z_I(H, T) \quad (1.13)$$

şeklindedir. Termodinamik nicelikler spin başına serbest enerjiden elde edilir. İç enerji aşağıdaki şekillerde ifade edilir [13].

$$U = Z^{-1} \sum_s E(s) \exp \left[-\frac{E(s)}{kT} \right] \quad (1.14)$$

$$U = kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln Z \quad (1.15)$$

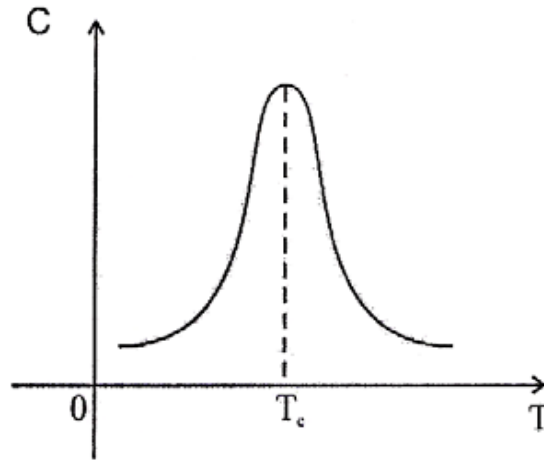
$$U = -kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{f}{kT} \right) \quad (1.16)$$

1.4.3 Özısı

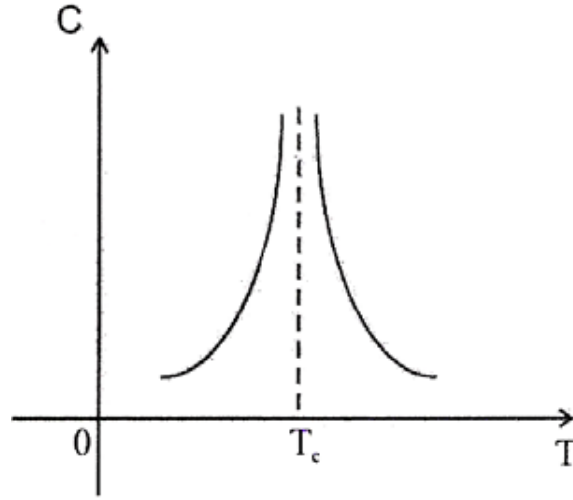
Spin başına özısı;

$$C(H, T) = \frac{\partial U_1}{\partial T} \quad (1.17)$$

şeklinde ifade edilir. 1963 yılında Voronel, argonun(Ar) kritik nokta civarında sabit hacimde özısını ölçmüştür. Klasik teori özısının sadece kritik noktada süreksizliğe sahip olduğunu varsayar. Bu durum sadece sonsuz örgüler için geçerlidir. Sonlu örgülerde özısı T_c 'de maksimum değere sahiptir. Bu çalışmada sonlu örgü durumu incelenmektedir [11].



Şekil 1.6. Sonlu örgüler için özısının T_c civarındaki davranışı



Şekil 1.7. Sonlu örgüler için özısının T_c civarındaki davranışı

Asimtotik olarak değişen özısının ifadesi aşağıdaki gibidir;

$$C_v(T) \approx |t|^{-\alpha} \quad (t \rightarrow 0^+) \quad (1.18)$$

Onsegar tarafından özısı;

$$CV(T) = A \ln(t) + \text{sonlu belirsizlik terimler} \quad (1.19)$$

şeklinde tanımlanmıştır. Logaritmik terimlerle singülerlik elde edilmiştir. $\alpha = 0(\log)$ olması özısının singüler olmayan bir kısma sahip olmasından kaynaklanmaktadır. Özısının $T < T_c$ da α' ve $T > T_c$ da α olmak üzere iki üstü vardır. Hem deneysel hem de teorik $\alpha = \alpha'$ olduğu ispatlanmıştır [12].

1.5. KENDİLİĞİNDEN MIKNATISLANMA (M), MANYETİK

ALINGANLIK (χ) ve ÖZİSİ (C) 'NİN SICAKLIK BAĞIMLILIKLARI

Kritik sıcaklık T_c , civarında termodinamik niceliklerin davranışı aşağıda tanımlanan indirgenmiş sıcaklık t 'e bağlı olarak incelenmektedir.

$$t = \frac{T - T_c}{T_c} \quad (1.20)$$

$t \rightarrow 0$ Limitinde, herhangi bir termodinamik nicelik sonlu olan düzenli bir kısım ve ıraksayan” singüler” bir kısma ayrılmaktadır. Singüler kısımların t 'in bir kuvveti ile orantılı olarak değiştiği kabul edilmektedir. Bu kuvvetler genel olarak kesirlidir. Termodinamik niceliklerden kendiliğinden manyetizasyon (düzen parametresi) M , dış manyetik alanın olmadığı durumda, kritik sıcaklığın altında T 'nin azalan bir fonksiyonudur ve T_c 'de sıfırdır. T 'nin T_c 'ye çok yaklaştığı durumlar için M aşağıda verilen kuvvet kanuna uygun olarak değişmektedir.

$$M(0, T) \propto t^{\beta'} \quad t \rightarrow 0^+ \quad (1.21)$$

$$M(0, T) \propto (-t)^{\beta} \quad t \rightarrow 0^- \quad (1.22)$$

burada β ve β' kendiliğinden manyetizasyon kritik üsleri olarak adlandırılmaktadır. Dış manyetik alan varlığında manyetizasyon için hal denklemi,

$$M \propto H^{1/\delta} \quad (1.23)$$

şeklindedir. Burada δ bir diğer kritik üsdür ve dış manyetik alan varlığında hesaplanır. Sıcaklık T , sıcaklık T_c 'ye çok yaklaştığında manyetik alınganlık ıraksamaktadır. Manyetik alınganlığın kritikteki ıraksak davranışı γ ve γ' kritik üsleri ile karakterize edilmektedir.

$$kT\chi(0, T) \approx t^{-\gamma} \quad t \rightarrow 0^+ \quad (1.24)$$

$$kT\chi(0, T) \approx \propto (-t)^{-\gamma'} \quad t \rightarrow 0^+ \quad (1.25)$$

burada $\gamma = \gamma'$ dür ve her iki haldeki orantı katsayıları birbirinden farklıdır. Dış manyetik alanın yokluğunda özısı C , kritik sıcaklıkta singüler bir davranış göstermektedir. Bu durum α ve α' kritik üsleri ile karakterize edilmektedir.

$$C(0, T) \propto t^{-\alpha} \quad t \rightarrow 0^+ \quad (1.26)$$

$$C(0, T) \propto t^{-\alpha'} \quad t \rightarrow 0^- \quad (1.27)$$

Burada b^\pm bir düzeltme terimidir. Özısı kritik üsleri α ve α' birbirine eşittir. Buraya kadar verilmiş olan tanımlarda singüler davranışın kritik sıcaklığa aşağıdan veya yukarıdan yaklaşılsa da aynı tipte olduğu kabul edilmektedir.

2. KAYNAK ARAŞTIRMASI

Bu tez çalışmanın konusu manyetik faz geçişleridir ve faz geçişleri için en iyi istatistik modellerden biri olan Ising model kullanılmış ve kritik üsler belirlenmiştir. Ising model; faz geçişi yapan sistemleri temsil eden, ferromanyetik maddelerin gösterdiği davranışların anlaşılmasını ve termodinamik niceliklerinin incelenmesini sağlayan, spinler arası basit etkileşmeleri içeren bir modeldir. Ising modelin ferromanyetik faz geçişini temsil eden en basit hali spin $\frac{1}{2}$ Ising modelidir [6]. İki durumlu ve tek düzen parametrelili bir modeldir. Analitik çözümü 1925 yılında E. Ising tarafından bir boyutlu uzayda yapılmıştır [14]. Dış manyetik alan yokluğunda iki boyutlu uzayda ise 1944 yılında Onsager tarafından analitik çözüm yapılmıştır [15]. Bundan başka üç durumlu ve iki düzen parametrelili bir sistem olan Spin-1 Ising modeli de araştırmacılar tarafından incelenmektedir [7,16-25]. Spin-1 modeli Blume, Emery ve Griffiths tarafından 1971 yılında tanımlanmıştır [16]. Bu tez çalışmasında spin $\frac{1}{2}$ Ising model kullanılmıştır.

Sadece bir ve iki boyutlu uzayda ve dış manyetik alan yokluğunda analitik çözümü bulunan spin $\frac{1}{2}$ Ising modelin üst boyutlarda henüz analitik çözümü yapılamamıştır. Bu nedenle istatistiksel sistemlerin sayısal simülasyon çalışmaları oldukça önem kazanmaktadır. Simülasyon gerçek bir sistemin modelini tasarlama süreci ve sistemin işlemesi için sistemin davranışını anlamak veya değişik görüşleri değerlendirmek amacıyla bu model üzerinde denemeler yapmaktır. İstatistik mekanikte bazı problemlerin çözümü tam yapılamazken yaklaşık çözüm bulmak mümkün olabilir. Bu yaklaşık çözümlerin doğruluğunu denemek ve desteklemek açısından simülasyon çalışmaları oldukça önemlidir [7,26]. Yine deneysel çalışmalar esnasında karşılaşılabilecek bir çok problemi ortadan kaldırması açısından simülasyon çalışmaları önem kazanmaktadır. Yani bilgisayar simülasyon çalışmaları teorik ve deneysel çalışmalar arasında bir köprü görevi görmektedir. Simülasyon çalışmaları ile fiziksel olayların incelenmesinde, model kurulması, model gelişiminin sağlanması, sonuçların elde edilmesi ve bu sonuçların değerlendirilmesi teorik çalışmaların alt yapısını oluşturur. Teorik model sisteme uygulanır ve sistemin fiziksel özellikleri hesaplanır. Fiziksel sistemlerin incelenmesi için birçok model

tanımlanmıştır. En yaygın olanları Ising model, Potts modeli, Küresel model, Örgü gazı modeli, Percolation modeli ve X-Y ve Heisenberg modelidir.

Monte Carlo (MC) ve Molekül Dinamiği [27,28] istatistik sistemlerin sayısal simülasyonu, dolayısı ile faz geçişi ve kritik olay çalışmalarında kullanılan en temel araçlardandır. Monte Carlo yöntemi şans karakterli olduğundan bu isimle anılır. Monte Carlo yaklaşımında rast gele sayı üretici kullanılır. Başlangıçta genel olarak spinlerin hepsi aynı yönlü alınır. Bu tür algoritmalarda sıcaklık önceden bilinmekte ve giriş parametresi olarak kullanılmakta ve sabit sıcaklıkta bütün spinler teker teker durumlarını değiştirme teşebbüsünde bulunmaktadır. Tüm örgüdeki spinlerin durum değiştirme girişiminde bulunması bir Monte Carlo adımını oluşturur. Değişikliğe uğrayacak spin, örgü üzerinde geliş güzel seçilebilir. Herhangi bir konfigürasyonla karşılaşma ihtimali Boltzman dağılımına uyacak şekildedir.

Molekül Dinamiği yöntemi Monte Carlo yönteminin bir alternatifidir [9]. Molekül Dinamiği metodu, çok parçacıklı sistemlerin dinamik özelliklerini incelemede kullanılır. Simülasyon, sistemi oluşturan parçacıkların sabit toplam enerjide klasik hareket denklemlerini nümerik olarak çözmekten ibarettir. Zamana bağlı olarak atom veya moleküllerin konum, hız veya yönelimlerinin nasıl değiştiği bulunur. Klasik bir dinamik sistem, Hamilton hareket denklemlerinin sayısal integrasyonunu içermektedir. Molekül dinamiği özellikle katı ve sıvıların molekül yapıları, enerji ve hareketleri ile “bulk” (parçacık sayısının sonsuz olduğu durum) özelliklerinin ayrıntılı bir şekilde araştırılmasına imkân sağlamaktadır. Bu yöntemde rasgele sayı üretici kullanılmamaktadır.

Çok önemli ve çok kullanılan algoritmalarından biride, Markov yöntemidir ve ilk olarak 1953 yılında Metropolis ve arkadaşları tarafından türetilmiştir [28]. Metropolis ve arkadaşlarının algoritması ile Molekül Dinamiği arasında yer alan diğer bir simülasyon yöntemi de 1983’de M. Creutz tarafından geliştirilmiştir [29]. Bu yöntem gezgin demon modeli olarak bilinmektedir. 1986’da M. Creutz iki boyutlu uzayda Ising modelinin deterministik bir “Cellular Automaton (CA)” kuralı ile simülasyonunu gerçekleştirmiştir [30]. “Cellular Automaton” ilk olarak Neuman ve

Ulam tarafından biyolojik sistemlerin simülasyonu için kullanılmıştır [31-33]. “Cellular Automaton” 0 veya 1 değerleri alabilen bir hücre veya örgü noktalarından oluşur. Bu değerler sabit bir kurala göre kesikli zaman adımlarında yenilenir. “Cellular automaton” hücreleri herhangi bir boyutta düzenli bir örgü üzerinde sıralanabilir. Bu model için ilk temel teoriler 1983 yılında Wolfram tarafından verilmiştir [33]. Fizik, Kimya ve Biyoloji’deki dinamik sistemler için pek çok uygulamalar vardır.

Ising modelinin ve çeşitli fizik problemlerin bir CA olarak simülasyonu Vichniac tarafından önerilmiştir [34]. Ising modelin simülasyonu için iki farklı CA algoritması vardır. Bunlardan ilki Vichniac, Pomeau ve Herrman tarafından sunulan Q2R algoritması [34–36]. İkincisi ise Creutz tarafından ortaya atılan Creutz “cellular automaton” olarak bilinmektedir [37]. Q2R algoritmasında simülasyon süresince iç enerjinin korunduğu konfigürasyonlar üretilmekte dolayısıyla özısı hesaplanamamaktadır. Bu sorun iç enerji dalgalanmalarının dikkate alındığı Creutz “Cellular Automaton” ile ortadan kalkmaktadır. İki boyutlu Ising modelinin tam çözümü uzay boyutunun kritik üsleri belirlemede önemli olduğunu göstermektedir. Bu sebeple üç veya daha yüksek boyutlu Ising modelin çözülmesi oldukça önemlidir. Ancak üç veya daha yüksek boyutlu Ising modelin analitik çözümü mümkün olmamıştır. Bu güne kadar boyut etkisi ve teorik sonuçların doğruluğunu araştırmak için $d=2$ [38-42], 3[24,43-45], 4[46-52], 5[8,53], 6[7,54,55], 7[55], ve 8[56,57] boyutlu Ising modelleri için simülasyonlar yapılmıştır. Ayrıca sonsuz örgüler için Ising modeli teorik olarak çözülebilmekte fakat sonlu örgüler için tam olarak çözülememektedir. Ising model için termodinamik niceliklerin sonlu örgülerdeki davranışları Creutz Cellular Automaton (CCA) yöntemi ile incelenmiş ve sonsuz örgü davranışları, sonlu örgü ölçekleme teorisi yardımıyla belirlenmiştir [58,59,10,13,60–74].

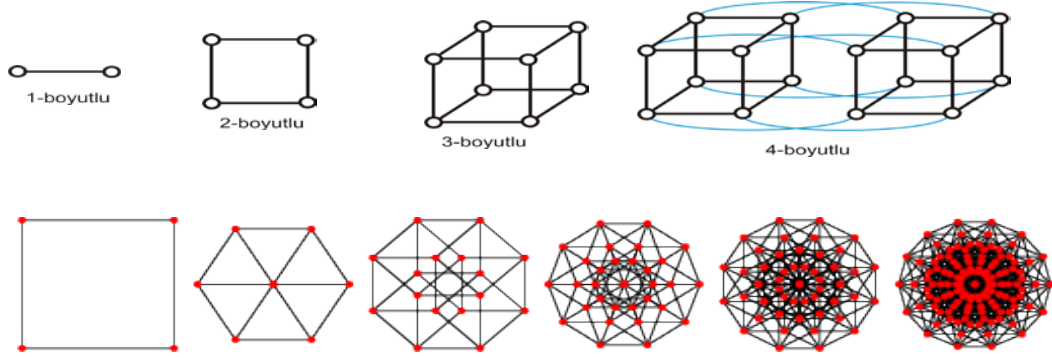
Bu tez çalışmasında dört boyutlu Ising model için, doğrusal boyutu $L=6,8,10$ olan periyodik sınır şartlı örgülerde ve sonsuz örgü kritik sıcaklığı için Creutz cellular automaton ile simülasyonlar yapılmıştır. Creutz cellular automaton algoritması ile yapılan simülasyonlarda enerji giriş parametresi olarak kullanılmıştır

ve sıcaklık, manyetizasyon, manyetik alınganlık ve öz ısı simülasyon sonuçlarından elde edilmiştir. Sonlu örgü ölçekleme bağıntıları kullanılarak, sonsuz örgü kritik sıcaklık değerleri, manyetizasyon (β, β'), manyetik alınganlık (γ, γ') ve öz ısı (α, α') için kritik üsler elde edilmiştir. Ayrıca manyetizasyon (düzen parametresi) ihtimaliyet dağılımı için sonlu örgü ölçekleme fonksiyonları incelenmiştir. Bu fonksiyonların geçerli olduğu, CCA simülasyonları ile sayısal olarak da gösterilmektedir. Tez çalışmasında elde edilen sonuçlar literatür değerleri ile uyum içindedir.

3. MATERYAL VE METOD

3.1. ISING MODEL

Ising model spinler arası etkileşmeleri içeren ferromanyetik termodinamik niceliklerinin incelenmesini sağlayan bir modeldir. Bu modelde incelenen sistem örgü konumları adı verilen N tane sabit noktadan oluşan, d boyutlu periyodik bir örgüdür. Genel Ising modelin düzenli bir örgünün köşelerinde bulunmaya zorlanmış spinlerden oluştuğu düşünülür. Örgünün geometrik yapısı iki boyutta kare veya üçgen üç boyutta kübik veya hekzagonal, dört boyutta hiper kübiktir.



Şekil 3.1. d=1,2,3 ve 4 boyutlu örgülerin geometrik yapıları ve izdüşümleri.

Spinler $i=1,2,3,4,\dots,N$ indisi ile işaretlenir ve her bir örgü konumuna +1 veya -1 değerinden birisini alabilen N tane spin değişkeni takılmıştır. Sistemde tek değişken spindir ve S_i simgesi ile gösterilir. $S_i=+1$ ise i. örgü konumunun spin yukarı (eksene paralel) durumda olduğu, $S_i=-1$ ise i. örgü konumunun spin aşağı durumda olduğu anlaşılır. Verilen bir $\{S_i\}$ kümesi bütün sistemin konfigürasyonunu belirler. Konfigürasyona sahip olan bir sistemin enerjisi aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır.

$$E_I = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - H \sum_{i=1}^N S_i \quad (3.1)$$

Burada I alt indisi Ising enerjisi $\langle ij \rangle$ yakın komşuları çeşitleri üzerinden toplamını göstermektedir. J_{ij} en yakın komşu etkileşme sabiti ve H dış manyetik alan

olarak verilmektedir. Etkileşmenin izotropik olduğu durumda $J_{ij}=J$ alınmaktadır. $J>0$ ferromanyetizma, $J<0$ ise anti ferromanyetizma durumuna karşılık gelmektedir. Ising modelde bütün termodinamik fonksiyonlar E_I enerjili mümkün konfigürasyon üzerinden hesaplanmaktadır. $\{S_i\}$ spin kümesi mikrokanonik topluluk kavramına uymaktadır fakat analitik çalışmalarında kanonik topluluk kullanılmaktadır.

3.1.1. Dört Boyutlu Ising Model

Ising evrensellik sınıfı için üst kritik boyut dördür($d^*=4$). Dört boyutlu Ising modelinin kesin sonucu bilinmediğinden dolayı nümerik çalışmalar oldukça önemlidir. Monte Carlo simülasyonları dört boyutlu Ising modelinin kritik özelliklerini araştırmak için kullanılmaktadır. Renormalizasyon grup yaklaşımı, üst kritik boyutun altında kritik olayın anlaşılmasında oldukça başarılı olmuştur. Üst kritik boyutun üstü için ortalama alan teorisi geçerlidir. Renormalizasyon grup teorisine göre üst kritik boyutta($d^*=4$) ortalama alan davranışına logaritmik düzeltmeler gereklidir. Kuvvet kanunu ıraksamaları için bu tahmin edilen logaritmik düzeltmeler, dört boyutlu Ising modelinin ilk seri açılım sonuçlarında ortalama alan değerlerinden kritik üstlerin belirli sapmalarını izah etmek için kullanılmıştır. Bu Monte Carlo sonuçları ortalama alan teorisi için logaritmik düzeltmeleri ve sıra dışı davranışın bazı kanıtlarını göstermektedir. Fakat modelin sonlu örgü ölçekleme analizinde sistematiklik yoktur ve sonlu sistemlerin doğrudan Monte Carlo simülasyonlarıyla bu etkileri gözlemek ilginçlik arz etmektedir. Dört boyutlu Ising model gerçek manyetik sistemlere uygulanmamasına rağmen üst kritik boyutta logaritmik düzeltme olasılığının bir genel durum oluşturması beklenilmektedir. Üst kritik boyut üç olduğu zaman bu logaritmik düzeltmeler gerçekte deneysel olarak gözlenebilir. Üstelik dört boyutlu Ising modelinin sonuçları sonlu örgü ölçekleme teorisi için ilginçlik göstermektedir [7].

3.1.2. Ising Modelin Simülasyonu İçin Algoritmalar

Birçok fiziksel problem Ising modeli ile incelenebilmektedir. Ferromanyetik maddeler bu model ile modellenmekte ve termodinamik özellikleri incelenmektedir. Faz geçişi gösteren sistemler için ortaya konulan modellerin analitik çözümleri zor

ve çok az durumda başarılı olduğundan dolayı bu sistemleri ele almakta bilgisayar simülasyonları kullanılması oldukça doğaldır. Faz geçişi ve kritik olay çalışmalarında ilerlemenin büyük bir kısmı bilgisayar simülasyon sonuçları sayesinde.

Monte Carlo ve Molekül Dinamiği ilk simülasyon çalışmaları olarak bilinir. Molekül Dinamiğinde ilk simülasyon teknikleri, tanımlanan bir sistem içinde hareket boyunca enerjinin sabit kalması düşünülerek ortaya çıkmıştır. Sabit toplam enerjide klasik hareket denklemlerini nümerik olarak çözmekten ibarettir. Mikrokanonik kümede parçacık sayısı (N), hacim (V) ve toplam enerji (E) sabit olarak alınır. Etkileşme potansiyellerinin bilinmesi parçacıklar üzerine etkiyen kuvvetlerin hesaplanmasını sağlar. Sonra mikrokanonik topluluk için bir Δt zaman adımında Newton hareket denklemleri çözülür. Kısa bir zaman sonrasında i. parçacığın X_i koordinatları ve V_i hızları aşağıdaki ifadelerle bulunabilir.

$$X_i (t+ \Delta t) = X_i (t) + V_i (t) \Delta t \quad (3.2)$$

$$V_i (t+ \Delta t) = V_i (t) + \frac{f_i (t) }{m_i} \Delta t \quad (3.3)$$

Bu sistemde sonuç alabilmek için sisteme uygun potansiyellerin seçilmesi ve hareket denklemlerini çözecek algoritmanın iyi kurulması gerekmektedir.

Molekül dinamiği için öyle bir hücre tanımlanmalıdır ki parçacık sayısı ve hücrenin hacmi korunuyor olsun. Böyle bir sistem için toplam kinetik enerji

$$E_k = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{m_i} \quad (3.4)$$

ve sistemin potansiyel enerjisi

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{i < j} U(r_{ij}) \quad (3.5)$$

Burada r_{ij} , i. ve j. parçacıklar arasındaki mesafeyi göstermektedir. Böyle bir sistemin Hamiltonyeni

$$H = \frac{1}{2} \sum_i \frac{p_i^2}{m_i} + \sum_{i < j} U(r_{ij}) \quad (3.6)$$

olur. Sistemin hareket denklemi ise

$$m \frac{dr_i}{dt} = P_i \quad \text{ve} \quad \frac{dP_i}{dt} = \sum_{i < j} F(r_{ij}) \quad (3.7)$$

olur.

Molekül Dinamiği arasında yer alan simülasyon çalışmalarının temeli, ilk olarak 1953 yılında Metropolis ve arkadaşları tarafından ortaya konulan algoritmaya dayanmaktadır [28].

Bu simülasyon çalışmaları zamanla geliştirilmiş ve bir çok yeni simülasyon metodu ile algoritma ortaya çıkmıştır. Bunlar

- Metropolis algoritması
- Swendsen-Wang algoritması
- Wolff algoritması
- Creutz' un Gezgin “ Demon” algoritması
- “Cellular Automaton” lar
- Q2R “Cellular automaton”ı
- Creutz “Cellular Automaton”ı
- . Cellular automaton standart algoritma

3.1.2.1. Creutz' un gezgin "Demon" algoritması

1983 yılında M. Creutz tarafından geliştirilen simülasyon yöntemi Metropolis ve arkadaşlarının algoritması ile molekül dinamiği arasına girmiştir [29]. Öncelikle "demon" (spine eşlenik momentum) denilen bir serbestlik derecesi tanımlanmaktadır. Bu yeni değişken molekül dinamiğindeki eşlenik momentumun benzeridir. Molekül dinamiğindeki eşlenik momentum kinetik enerjinin hesaplanmasında kullanılmasına benzer şekilde "demon" da kinetik enerji taşır. Sistemin toplam enerjisi korunacak şekilde gezgin "demon" rasgele olarak spinleri ziyaret eder. Demon bir hücreye ulaştığı zaman uygun bir spini ters çevirmek için girişimde bulunur. Eğer spinin enerjisi düşükse "demon" spine enerji aktarır ve spinin ters çevrilmesine yetecek kadar enerji aktarılmışsa spin ters çevrilir. Aksi takdirde başka uygun bir hücredeki spini ters çevirmek için hareket eder. Demon, enerjisini üstel olarak aktarır. Büyük sistemlerde demonun enerjisi toplam enerjinin sadece küçük bir kısmını gösterir. Demon'un spinleri rasgele ziyaret etmesinden dolayı bu algoritmaya Creutz'un gezgin "demon" algoritması denir. Bu algorithmada tek bir gezgin "demon" kullanılabileceği gibi birden fazla gezgin "demon" da kullanılabilir.

3.1.2.2. "Cellular automaton" lar

1983 yılında ilk temel teorisi Wolfram tarafından verilen "Cellular automaton" lar ilk olarak Neuman ve Ulam tarafından "cellular space" adı ile biyolojik sistemlerin simülasyonu için önerilmiştir [31-33]. Kinetik enerji terimi içeren dinamik Ising modeli ve diğer örgü spin sistemleri basit bir "cellular automaton" problemi olarak ele alınmaktadır. Daha genel olarak makroskobik seviyede her hücre birçok molekül ihtiva eden bir bölgeyi temsil edebilir ve onun değeri birkaç farklı mümkün fazlardan birini temsil edebilir. "CA" bu şekliyle doğrusal olmayan kimyasal sistemler için kesikli modeller olarak kullanılmıştır. "CA" larda uzay ve zaman kesikli değerlere sahiptir. Sonsuza kadar genişletilebilen düzenli hücreler örgüsünden oluşur. Örgünün her bir hücresinde kesikli değerler alabilen değişkenler yer almaktadır. Bir "CA" bu hücre değişkenlerinin değerleri ile belirlenmektedir. Genel olarak basit bir "cellular automaton" 0 veya 1 değerli hücre veya sitelerin bir satırından oluşur. Bu değerler kesikli her zaman adımı sırasında

yenilenir. “Cellular automaton” un kesikli zaman adımlarındaki gelişimi sırasında bir hücre değişkeni bölgesel bir kurala uyarak bir önceki zaman adımında kendisi ve kendisine komşu hücrelerdeki değişkenlerin değerlerine bağlı olarak yeni değerini alır. Bir hücrenin komşusu ifadesi ile kendisi ve kendisine en yakın komşu hücreler kastedilmektedir. Hücrenin herhangi bir zaman adımındaki değişkenlerinin değerleri özdeş bir kural yardımıyla eş zamanlı olarak elde edilmektedir. Bir boyutlu “CA” larda bir hücrenin bir sonraki zaman adımında alacağı değeri belirleyen bölgesel kural, en yakın üç hücre değerinin fonksiyonu olarak tanımlanmaktadır. i . konumdaki bir hücrenin değeri a_i ile verilirse bu hücrenin yeni değerini veren kural

$$a_i^{t+1} = f(a_{i-1}^t, a_i^t, a_{i+1}^t) \quad (3.8)$$

şeklinde ifade edilebilir. Bu ifadede f kuralı açıklayan bir fonksiyondur. Herhangi bir fiziksel sistem için cellular automaton ile bir model oluşturulurken;

- i.** Sistemin yapısına uygun düzenli bir örgü (örneğin iki boyutta kare, üçgen, üç boyutta küp, daha yüksek boyutlarda soyut küp) seçilir.
- ii.** Örgüyü oluşturan hücrelerin sahip olabileceği hallere karşılık gelen değişken veya değişkenler belirlenir.
- iii.** Hücrelerin birbiriyle etkileşme şeklini ve gelişimini sağlayan bir bölgesel kural tanımlanır.

Fiziksel sistemlerin yanı sıra biyoloji, kimya ve sosyal bilimlerdeki birçok problem bir “cellular automaton” olarak incelenebilmektedir. Biyolojide DNA’nın kopyasını yapan fonksiyonun bulunması, kalbin hızlı ya da yavaş çarpması, “filamentous” organizmalarının büyütülmesi “CA” ile modellenmiştir. Kimyada ise uzaysal diffüzyon ile çiftlenmiş reaksiyonların bir ağını içeren lineer olmayan kimyasal sistemler “CA” olarak modellenmiştir [33].

3.1.2.3. Q2R “cellular automaton”ı

Q2R algoritmasında rasgele bir konfigürasyonla hesaba başlanır. Spin-spin etkileşme enerjisi (Ising enerji veya iç enerji) sistemin toplam enerjisine karşılık gelmektedir. Örgünün her bir hücresi, +1 ve -1 değerini alabilen bir spin ile işgal edilir. Her zaman basamağında, eğer değişecek spin aynı sayıda paralel ve paralel olmayan komşu spine sahipse işaretini değiştirir. Böylece ters dönen spin sistemin enerjisini değiştirmez. Simülasyonun bu tipi sabit enerjili mikrokronik kümeye uyar. Sabit sıcaklıklı kanonik kümeye uymaz. Bir kerede bütün spinler yenilenmez. Örgü iki alt örgüye bölünür. Önce bir yarısı daha sonra diğer yarısı yenilenir. Hiçbir manyetik alan dikkate alınmaz. İç enerji bütün simülasyon süresince sabit kaldığından özısı enerji dalgalanmaları kullanılarak hesaplanamamaktadır [34,35].

3.1.2.4. Creutz “cellular automaton”ı

1986 yılında M. Creutz tarafından geliştirilen simülasyon yöntemi Metropolis ve arkadaşlarının algoritması ile molekül dinamiği arasına girmiştir [28]. Creutz Ising modelde iç enerji ile spine eşlik eden momentuma karşılık gelen kinetik enerjinin toplamı korunur. Böylece Creutz algoritması kullanılarak üretilen konfigürasyonlardan iç enerjiye bağlı termodinamik nicelikleri hesaplamak mümkün olmaktadır. Üstelik bu algoritma yaygın MC metodlarından on kat daha hızlı çalışmakta ve yüksek kalitede rastgele sayı üreticene gereksinim duymamaktadır. CCA algoritması kullanılarak dış manyetik alan yokluğunda iki ve üç boyutlu Ising modelde yapılan hesaplamalar algoritmanın $2 \leq d \leq 8$ boyutlu uzaylardaki Ising modellerinin simülasyonlarında oldukça başarılı olduğunu göstermiştir [8,38-59,75-81,]. Bu algoritmadan türetilen çeşitli algoritmalar dış alan [31], ikinci derece en yakın komşu etkileşme ve dört spin etkileşim terimleri içeren Ising model problemlerine uygulanmış ve literatürle uyumlu sonuçlar elde edilmiştir [29,41]. Bu tez çalışmasında Creutz “cellular automaton”ında dört boyutlu Ising modelin simülasyonu standart algoritma kullanılarak yapılmıştır.

3.1.2.5. Cellular automaton standart algoritma

Bu algoritmada örgünün her bir hücresinde üç değişken bulunmaktadır. Bu değişkenler; Ising spin değişkeni, spine eşlik eden momentum ve paritedir. Her bir hücredeki bu değişkenlerin değerleri, kendi değişkenleri ve enyakın komşuların değişkenlerinden bir cellular automaton kuralı ile belirlenir. Her bir hücreye atanan değişkenlerden ilki B_i Ising spinidir. $B_i = 0, 1$ değerlerini alır. $S_i = B_i - 1$ olmak üzere enyakın etkileşmeli Ising model için Ising spin enerjisi

$$H_I = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad (3.9)$$

ile ifade edilir. İkinci değişken spine eşlik eden momentum değişkenidir. Momentuma karşılık gelen kinetik enerji H_K , $(0, m)$ aralığında herhangi bir spin değişimi için Ising enerjideki değişime eşit olan tamsayı değerler almaktadır. Kinetik enerji bitlerle veya bu bitlerin oluşturduğu değerlere karşılık gelen bir değişkenle temsil edilebilir. Toplam enerji ise

$$H = H_I + H_K \quad (3.10)$$

olmak üzere tüm zaman adımlarında korunur. Algoritmanın ilk adımı en düşük iç enerjili (Ising enerjisi) durumun taban durumu olarak tanımlanması ve başlangıç konfigürasyonu olarak alınmasıdır. İkinci adımda algoritma spin değişimine karar vermektedir. Bu aşamada spin konfigürasyonunun t zamanındaki H_I^t Ising enerjisi hesaplanır. Değeri değiştirilecek hücrenin spini $1/2$ olasılıkla diğer iki halden birine çevrilir ve $t+1$ zamanında H_I^{t+1} Ising enerjisi elde edilir. Daha sonra Ising enerjisindeki değişim, dH_I , hesaplanır.

Ising enerjisindeki değişim bu hücrelerin momentum değişkenine aktarılabilir veya momentum değişkeninden alınabilecek bir değer ise ve toplam enerji korunuyorsa spin ters çevrilir ve yeni konfigürasyon kabul edilmiş olur. Buna uygun olarak momentum değiştirilir. Aksi halde spin ve momentum değiştirilmez.

Bu işlem örgüdeki bütün siyah hücelere aynı zaman adımında uygulanmaktadır. Aşağıdaki eşitliklerde Ising enerji değişiminin, dH_I , hesaplanması görülmektedir.

$$H_T^t = H_T^{t+1} \quad (3.11)$$

$$H_I^t + H_K^t = H_I^{t+1} + H_K^{t+1} \quad (3.12)$$

$$H_K^{t+1} = H_I^t - H_I^{t+1} + H_K^t \quad (3.13)$$

$$H_K^{t+1} = H_K^t + dH_I \quad (3.14)$$

Üçüncü değişken paritedir. CA' nın zamanla dama tahtası üzerinde gelişimini sağlamakta, böylece Ising modelin “ CA ” ile simülasyonunu mümkün kılmaktadır. Her bir zaman adımında dama tahtasının siyah hücelere kural uygulanıp rengi beyaza çevrilir. Beyaz hücelerin ise kural uygulanmaksızın sadece rengi siyaha çevrilir. Bir hücrenin yenilenmesi için spini ters çevrilir. Sistemin iç enerji değişimi hesaplanır. Toplam enerji H korunmak üzere, eğer sistemin iç enerjisindeki değişim bu hücreye ait momentum değişkenine verilebilecek veya ondan alınabilecek kadarsa, o zaman bu spinin yönünde değişiklik yapılır. Aksi halde spinin yönü ve momentumu değiştirilmez. Başlangıçta bütün spinler aşağı veya yukarı yönde alınırlar. İlk kinetik enerji örgüye rasgele verilir. Toplam enerjide sınırlama devam ettiği müddetçe rast gele hareket, konfigürasyon uzayı boyunca devam eder.

3.1.3. Creutz Cellular Automatonunda Termodinamik Niceliklerin Hesabı

Toplam enerjinin korunumu altında mikrokanonik olan bu model kinetik enerji ve iç enerji simülasyon süresince dalgalanmakta yani bu enerjiler kanonik bir davranış sergilemektedir.

Sistemde E_I kinetik enerjili konfigürasyona raslama ihtimali Boltzman ağırlıklı üstel bir dağılıma uymaktadır.

$$P(E_i) \rightarrow \exp(-4\beta E_i) \quad (3.15)$$

Burada $4E_i = H_K$ dır ve bu dağılıma uygun olarak kinetik enerjinin beklenen değeri aşağıdaki gibidir.

$$\langle E_D \rangle = \sum_n n e^{-4n\beta} / \sum_n e^{-4n\beta} \quad (3.16)$$

Yukarıdaki ifade kullanılarak $T=1/\beta$ eşitliğinden sıcaklık değerleri belirlenir ve elde edilen bu sıcaklık değerine karşılık kendiliğinden mıknatıslanma M , aşağıda verilen ifade yardımıyla hesaplanır.

$$M = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i \quad (3.17)$$

Bu eşitlikteki $N=L_x L_x L_x L$, örgüdeki hücre sayısına karşılık gelmektedir.

Elde edilen sıcaklık değerine karşılık manyetik alınganlık (χ), aşağıda verilen ifadeler yardımıyla hesaplanır.

$$H_i = -\frac{1}{2N} \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad (3.18)$$

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} = L^2 \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 / kT \quad (3.19)$$

Bu çalışmada dış manyetik alanın sıfır olduğu durum göz önüne alınmaktadır. Bu yüzden Eş. 3.16, manyetik alınganlık için dış manyetik alanın varlığında elde edilen ifadenin $H \rightarrow 0$ limitine karşılık gelmektedir.

Özısı ve binder parametresi

$$C = \partial H_l / \partial T = N(\langle H_l^2 \rangle - \langle H_l \rangle^2) / (kT)^2 \quad (3.20)$$

$$U_L = 1 - \langle M^4 \rangle / (3 \langle M^2 \rangle^2) \quad (3.21)$$

şeklinde elde edilir. Termodinamik niceliklerin zaman ortalamaları ise

$$\langle a \rangle = \frac{1}{t} \sum_{i=1}^t a(t) \quad (3.22)$$

ile hesap edilir.

3.2. SONLU ÖRGÜ ÖLÇEKLEME

Fiziksel sistemlerin kritik davranışlarını taklit etmek amacıyla yapılan hesaplamalar sonlu örgüler üzerinde gerçekleştirilebilmektedir. Bu nedenle sonlu örgülerdeki hesaplamalardan sonsuz örgü davranışını tahmin edebilmek için sonlu örgü ölçekleme teorisi geliştirilmiştir. Sonlu örgü ölçekleme bağıntıları; sistemin kritik nokta yakınlığında olması ve tüm uzunlukların, sisteme ait karakteristik uzunluk olan, ξ korelasyon uzunluğu cinsinden ifade edilmesi gibi kabullerden elde edilmektedir. Bu yüzden ölçekleme teorisi uzunluk ölçeğinin değişimine bağlı olarak termodinamik niceliklerde görülen değişimlerle ilgilidir. Boyutlu bir niceliğin değeri standart bir birim uzunluğa bağlı olarak değişir [60,64].

3.2.1. Termodinamik Nicelikler İçin Sonlu Örgü Ölçekleme Bağıntıları

Sonsuz örgü için termodinamik niceliklerin davranışı sonlu örgülerde yapılan hesaplamalar kullanılarak sonlu örgü ölçekleme teorisi yardımı ile belirlenmektedir. Ölçekleme teorisi, daha öncede verildiği gibi, korelasyon uzunluğunun $t=0$ komşuluğundaki bir sistem için tek karakteristik uzunluk olduğunu kabul etmektedir. Korelasyon uzunluğu deneysel olarak $t=0$ 'da yani kritik noktada ıraksar. Bu sonuç, sistemin $t=0$ 'da karakteristik bir uzunluğa sahip olmadığını ve korelasyon uzunluğunun ölçekleme dönüşümü altında değişmez olduğunu gösterir. Diğer taraftan, eğer sistemin bir kısmı orijinal sistem kadar büyüklüğünde orijinal

sistem ve büyütülmüş sistem arasında bir fark görülüyorsa, bu durumda sistem ölçek dönüşümü altında değişmezdir. Daha kesin olarak, termodinamik fonksiyonların, $t = 0$ 'da korelasyon fonksiyonuna benzer olarak, homojen fonksiyonlar oldukları “ölçek-değişmez” bir sistem tanımlamak mümkündür [82].

Korelasyon fonksiyonu $t = 0$ 'da

$$g(r) \approx x^{-p} \quad (3.23)$$

şeklinde davranır. $P = d - 2 + \eta$ $g(x)$ 'in boyutundadır. Birim uzunluk bir b faktörü ile attığında koordinat $x \rightarrow x' = x/b$ şeklinde dönüşür. Bu koordinat dönüşümü altında korelasyon fonksiyonu homojenlik kuralına göre aşağıdaki gibi yazılır.

$$g(x/b) = b^p g(x) \quad (3.24)$$

Bu kurala göre homojen bir fonksiyon aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$f(x') = b^{Df} f(x) \quad x' = b^{Df} x \quad (3.25)$$

Hacim başına serbest enerji olan d -boyutunda olup “ölçek-değişmez” homojen bir fonksiyonla tanımlanır. $h = H/kT$ olmak üzere

$$F(h', t') = b^{df} f(h, t) \quad (3.26)$$

$$F(h, t) = b^{-df} f(b^{Df} h, b^{Df} t) \quad (3.27)$$

şeklindedir. Serbest enerjinin d -boyutunda olduğu düşünülürse üstteki ifadenin sağ tarafındaki fonksiyon boyutsuz olmalıdır. $\xi \approx t^{-\nu}$ ifadesi kullanıldığında için ise $D_k = \delta\beta/\nu$ sonucu elde edilir. $b=L$ olarak sonlu örgü ölçekleme teorisi için serbest enerji fonksiyonu aşağıdaki gibi elde edilir.

$$f(h, \varepsilon) = L^{(\alpha-2)/v} f(L^{\delta\beta/V} h, L^{1/V} t) \quad (3.28)$$

Bu ifadedeki indirgenmiş sıcaklık aşağıdaki ifade ile verilmektedir.

$$t = \frac{T - T_c(\infty)}{T_c(\infty)} \quad (3.29)$$

Diğer taraftan sonlu ve sonsuz örgü kritik sıcaklıkları arasındaki fark,

$$\Delta t = \frac{T_c(\infty) - T_c(L)}{T_c(\infty)} \propto a L^{1/V} \quad (3.30)$$

şeklinde tanımlanır. Ölçekleme bağıntısındaki L örgünün kenar uzunluğu, kritik üsler ise ‘sonsuz örgü kritik üsleri’dir. Tüm termodinamik nicelikler için sonlu örgü ölçekleme bağıntıları, serbest enerji için verilen sonlu örgü ölçekleme bağıntısından elde edilir.

Örneğin kendiliğinden mıknatıslanma için sonlu örgü ölçekleme bağıntısı

$$M = -\frac{\partial f}{\partial h} \quad (3.31)$$

$$= \left(\frac{\partial}{\partial h}\right) L^{-d} f(L^{\delta\beta/V} h, L^{1/V} t) \quad (3.32)$$

$$= -L^{-d} L^{\delta\beta/V} f' \quad (3.33)$$

şeklinde oluşturulabilir. $X^0 = -f'$ tanımı ve Widom ‘un $\delta\beta = v(2 + d - \eta)/2$ bağıntısı kullanılarak kendiliğinden mıknatıslanma için sonlu örgü ölçekleme bağıntısı elde edilir.

$$M(h, t) = L^{-\beta/V} X^0(L^{\delta\beta/V} h, L^{1/V} t) \quad (3.34)$$

Manyetik alınganlık ve özısı için sonlu örgü ölçekleme bağıntıları benzer biçimde

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial h} \quad (3.35)$$

$$\chi = \left(\frac{\partial}{\partial h}\right) L^{-\beta/v} X^0(L^{\delta\beta/v}h, L^{1/v}t) \quad (3.36)$$

$\gamma = \beta(\delta - 1)$ (ölçekleme kuralı) yerine yazılırsa manyetik alınganlık için ölçekleme bağıntısı bulunmuş olur.

$$kT\chi = L^{\gamma/v} Y^0(L^{1/v}t, L^{\beta\delta/v}h) \quad (3.37)$$

Ayrıca özısı için ölçekleme bağıntısı aşağıda şekilde verilmiştir.

$$C = L^{\alpha/v} Z^0(L^{1/v}t, L^{\beta\delta/v}h) \quad (3.38)$$

Statik kritik üsler bu bağıntılar yardımı ile elde edilebilir. Burada β, γ, α ve v sonsuz örgüde sırasıyla; mıknatıslanma, manyetik alınganlık, özısı ve korelasyon uzunluğu için statik kritik üslerdir. X^0, Y^0, Z^0 şekil fonksiyonlarının $h=0$ için $x = L^{1/v}t$ olmak üzere büyük x değerleri için Ax^w şeklinde değişmeleri beklenir. Burada A kritik genlik, w ise şekil fonksiyonunun ilgili olduğu termodinamik niceliğin kritik üssüdür. Sonlu örgü ölçekleme teorisinin sonucu olarak buraya kadar verilen bağıntılar, üç boyutta Ising modeller için termodinamik niceliklerin sonlu örgülerdeki davranışlarından sonsuz örgü davranışlarını belirleme imkânı vermektedir.

3.2.2. Dört Boyutlu Ising Modelinde Düzen Parametresi İhtimaliyet Dağılımı İçin Sonlu Örgü Ölçekleme Bağıntısı

Ising modelinin düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı için sonlu örgü ölçekleme fonksiyonunun bilinmesi, düzen parametresinin (mıknatıslanmanın) bütün moment ve 'cumulant'larının hesaplanmasını mümkün kılar [83-91]. Bundan dolayı,

arzu edilen bu fonksiyonların analitik ifadeleridir. Düzen parametresinin kritik noktadaki ihtimaliyet dağılımı için sonlu örgü ölçekleme fonksiyonunun, bir sınır şartları türü için evrensel olması [92,93], aynı evrensellik sınıfına giren sistemlerin kritik noktalarının ve bu noktaların özelliklerinin bulunmasına izin verir [94]. Örgünün uzay boyutu d olmak üzere, $d > 4$ 'deki Ising modelinin düzen parametresi ihtimaliyet fonksiyonu için sonlu örgü ölçekleme fonksiyonunun analitik ifadesi mevcuttur [87,89-91]. $d=4$ 'de fonksiyonun analitik ifadesi ardışık normalleştirilmenin kullanıldığı ortalama alan seviyesinde, yani önemi en fazla olan logaritmalı kısımları içerecek doğrulukta bilinmektedir. Fonksiyon $L \rightarrow \infty$ durumunda tam olup [89-91,96], sabitleri belirlenmemiştir. Bu çalışmanın esas amacı, dört boyutlu ising modelinin düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı için bilinen [97] sonlu örgü ölçekleme fonksiyonunun Creutz Cellular Automaton simülasyonlarıyla elde edilen sayısal fonksiyonlarla kıyaslayarak geçerliliğini denemektir. İkinci amaç ise [97]'de verilen yapıya sahip analitik ifadenin sabitlerini elde etmektir.

Sonlu sistemlerde M manyetizasyonu dalgalı bir niceliktir ve $P(M)$ olasılık dağılımı ile ifade edilir. Ölçekleme limitinde yani sistem sonsuz örgüye doğru giderken olasılık dağılımı fonksiyonları evrenseldir. Düzen parametresi olasılık dağılımı;

$$P_L(M) = \frac{N_M}{N_{CCAS}} \quad (3.39)$$

ile hesaplanmıştır. Burada N_M , M 'deki manyetizasyonun ortaya çıkma sayısı; N_{CCAS} ise Creutz cellular automaton adım sayısıdır.

$d = 4$ 'de düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı için türetilen sonlu örgü ölçekleme bağıntısı aşağıda verilmektedir.

$$P_L(M, t) = C_2^{-1} L^{\beta/\nu} \log^{-1/4}(L) p(C_2^{-1} M L^{\beta/\nu} \log^{-1/4}(L), C_1 t L^{1/\nu} \log^{1/6} L) \quad (3.40)$$

$d = 4$ 'de düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı için 3.40 eşitliğinde verilen sonlu örgü ölçekleme bağıntısının doğruluğunu denemek ve olasılık dağılımı analitik fonksiyonundaki parametreleri belirlemek amacıyla, doğrusal boyutu $L = 6,8$ ve 10 olan periyodik sınır şartlı örgülerde, Creutz 'CA' ile simülasyonlar yapılmıştır

$T = 0$ 'daki ihtimaliyet dağılımı,

$$P_L(M,0) = C_2^{-1} L^{\beta/\nu} \log^{-1/4}(L) p(C_2^{-1} M L^{\beta/\nu} \log^{-1/4} L) \quad (3.41)$$

ifadesi ile verilmektedir ve bizim çalışmalarımızda her bir örgünün kritik sıcaklığı için 20 kez 1.10^6 Monte Carlo adımına gidilmiştir.

$M = 0$ 'daki ihtimaliyet dağılımı ise

$$P_L(0,t) = C_2^{-1} L^{\beta/\nu} \log^{-1/4}(L) p(C_1 t L^{1/\nu} \log^{1/6} L) \quad (3.42)$$

ifadesi ile verilmektedir. Sonlu örgü ölçekleme denklemlerinin doğruluğunu test etmek için her bir örgüde 10^6 Monte Carlo adımına gidilmiştir.

3.2.2.1. Düzen parametresi olasılık dağılımı sonlu örgü ölçekleme fonksiyonunun kritik noktadaki analitik ifadesi

$d = 4$ 'de sonlu örgü ölçekleme fonksiyonunun ardışık normalleştirilmesinin kullanıldığı ortalama alan seviyesinde, yani önemi en fazla olan logaritmalı terimleri içerecek doğrulukta [88,90,96,98], kritik noktadaki analitik ifadesi aşağıda verilmektedir. Bu ifade,

$$p(m,0) = p_0 \exp(-(Am^2 + Bm^4)) \quad (3.43)$$

ortalama alana uygun yapıdadır. p_0 , A ve B birer sabit olup, analitik fonksiyon karşılığı olan sayısal fonksiyona uydurularak değerleri belirlenebilir. Sayısal

fonksiyon ise doğrusal boyutu yeterince büyük örgülerdeki simülasyonlar ve düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı için sonlu örgü ölçekleme bağıntısı kullanılarak elde edilebilir. m ölçeklenmiş mıknatıslanma olup, 3.40 eşitliğine göre $m = M L^{\beta/\nu} \log^{-1/4} L$ dir. m^6 'yı içeren düzeltme terimi sonlu örgü ölçekleme fonksiyonuna, aşağıda görüldüğü gibi, L ye bağlı bir katkı getirir.

$$p(m,0) = p_0 \exp(-(Am^2 + Bm^4 + CL^{-2}m^6)) \quad (3.44)$$

Bu ifadedeki A , B ve C sayısal fonksiyona uydurularak değerleri belirlenecek olan parametrelerdir. Analitik fonksiyonun bu hali yerine, daha fazla bilgi verecek parametreleri içeren aşağıdaki yeniden düzenlenmiş hali

$$p(m,0) = p(m_0,0) \exp(-((m^2 / m_0^2) - 1)^2 (a(m^2 / m_0^2) + c)) \quad (3.45)$$

sayısal fonksiyona uydurulmaktadır. m_0 , $p(m,0)$ m en büyük değer olan $p(m_0,0)$ a eşit olduğu m değeridir; yani m_0 , m 'nin en büyük ihtimal ile alacağı değerdir. a ve c ' nin değerleri ölçeklenmenin gerçekleştiği uç durumda evrenseldir. $a = 0$ olduğunda $p(m,0)$ basitleşerek ortalama alana uygun yapıyı alır. $p(m,0)$ bu haliyle m^6 'yı içeren terimin L ye nasıl bağlı olduğunu açıkça göstermemekle beraber, 3.44 ve 3.45 eşitliklerindeki m^6 'ların katsayılarının karşılaştırılması C 'yi belirlemek için aşağıdaki denklemi verir.

$$CL^{-2} = am_0^{-6} \quad (3.46)$$

$d = 4$ 'de Ising modelinin düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı için elde edilen sonlu örgü ölçekleme bağıntısı, Cellular Automaton simülasyonlarıyla sayısal olarak doğrulanmıştır. Böylece, düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı için sonlu örgü ölçekleme bağıntısının yapı olarak $d = 4$ 'de de geçerli olduğu gösterilmiştir.

Bu bulgular dört boyutlu Ising modelinde düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı için eşitlik 3.40'de verilen sonlu örgü ölçekleme bağıntısının geçerli olduğunu göstermektedir.

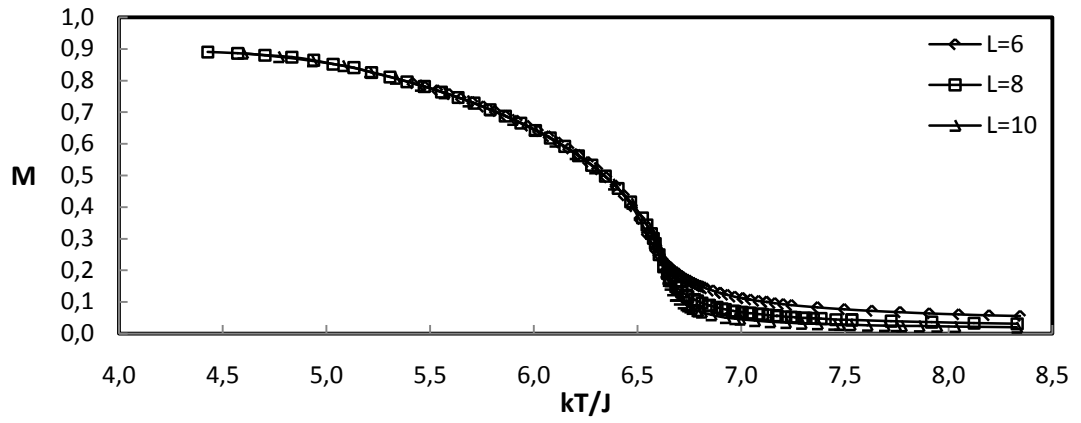
4. BULGULAR VE TARTIŞMA

4.1. TERMODİNAMİK NİCELİKLER ÜZERİNE ÖRGÜ BOYUTU ETKİSİ

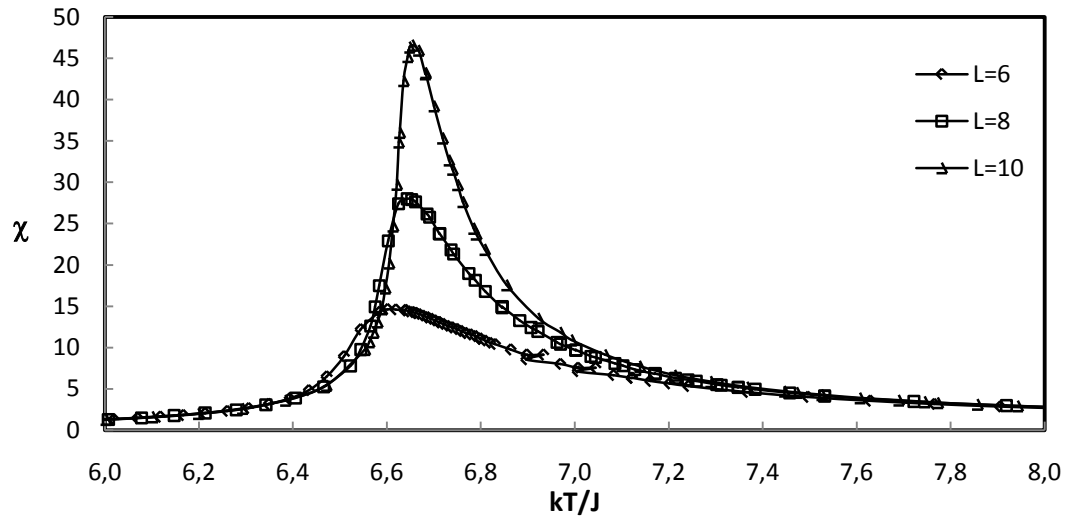
Kinetik enerji değişkeni kullanılan program ile doğrusal boyutu $6 \leq L \leq 10$ olan periyodik sınır şartlı örgülerde ve sonsuz örgü kritik sıcaklığı yakınında simülasyonlar yapılmıştır. Simülasyon çalışmalarında yaklaşık $2 \leq \frac{kT}{J} \leq 8$ sıcaklık ve $-2 \leq \frac{E}{J} \leq 6$ toplam enerji aralığında çalışılmıştır. Bu enerji aralığındaki her bir toplam enerji için 1 bağımsız simülasyon yapılmıştır. Her bir bağımsız simülasyonda 1.10^6 kere örgünün bütün spinlerine ters çevirme kuralı uygulanmaktadır. Bu niceliklerin ölçeklenmiş değerlerinin ölçeklenmiş sıcaklığa bağlı değişimleri incelenip, bu nicelikler için teorinin öngördüğü ölçekleme bağıntılarının doğruluğu denenmiştir. Düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı için sonlu örgü ölçekleme bağıntılarının doğruluğunun denenmesi için her bir toplam enerji 1.10^6 zaman adımı ile çalıştırılmıştır. Kritik bölgede toplam enerji 0,001 hassasiyetle değiştirilerek sonsuz örgü kritik sıcaklığına en yakın sıcaklık (kritik sıcaklık) tespit edilmiş ve bu sıcaklıkta 20 bağımsız simülasyon yapılmıştır. Sonuçlar 20 bağımsız simülasyon sonuçlarının ortalamaları alınarak hesaplanmıştır.

4.1.1 Termodinamik Niceliklerin Sıcaklık Değişimleri

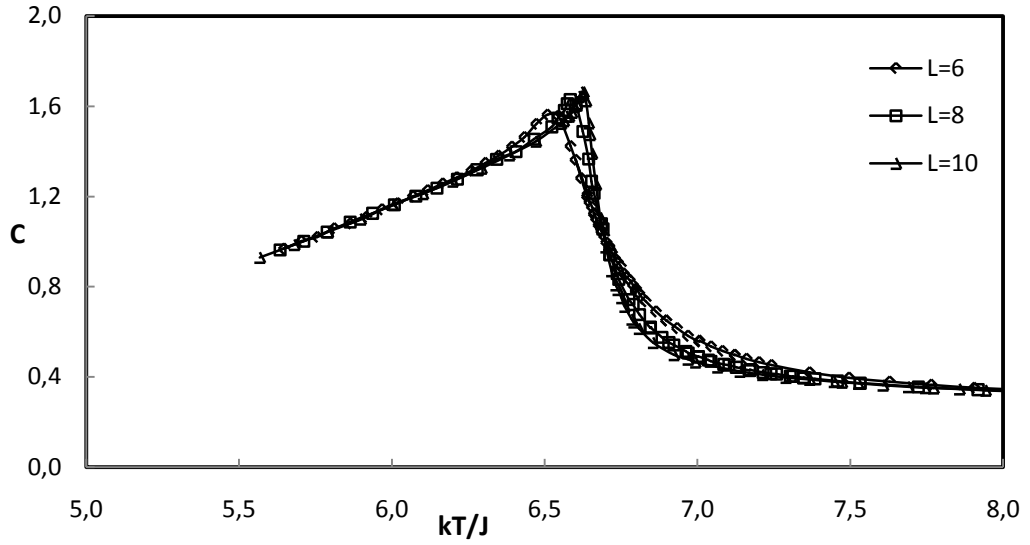
Sonlu örgüler için kendiliğinden mıknatıslanma (M), manyetik alınganlık (χ) ve özısı (C)'nin sırasıyla denklem 3.17, denklem 3.19 ve denklem 3.20 ifadeleri ile hesaplanan denge ortalama değerinin, kinetik enerji denge ortalama değerinden belirlenen sıcaklık değerlerine karşı değişimleri Şekil 4.1, Şekil 4.2 ve Şekil 4.3'de verilmiştir.



Şekil 4.1. Kendiliğinden mıknatıslanma (düzen parametresinin) sıcaklık ile değişimi $6 \leq L \leq 10$.



Şekil 4.2. Manyetik alınganlık (χ)'ın sıcaklık ile değişimi ($6 \leq L \leq 10$).



Şekil 4.3. Öz ısı (C)'nin sıcaklık ile değişimi ($6 \leq L \leq 10$).

4.1.2. Sonlu Örgü Sıcaklık Değerlerinden Sonsuz Örgü Sıcaklık Değerlerinin Belirlenmesi

Her bir örgüde manyetik alınganlık ve özısının maksimum olduğu sıcaklık değeri, kritik sıcaklığa karşılık gelmektedir. Bu yüzden her örgünün kendi kritik sıcaklık değerleri ($kT_c^x(L)/J$, $kT_c^C(L)/J$), manyetik alınganlık ve öz ısının maksimum verdiği sıcaklık değerinden tespit edilmiştir. Belirlenen sonlu örgü kritik sıcaklık değerleri Tablo 4.1'de verilmiştir. Bu sıcaklıkların belirlenmesindeki hata, pik genişliğinin yarısı alınarak tespit edilmiştir.

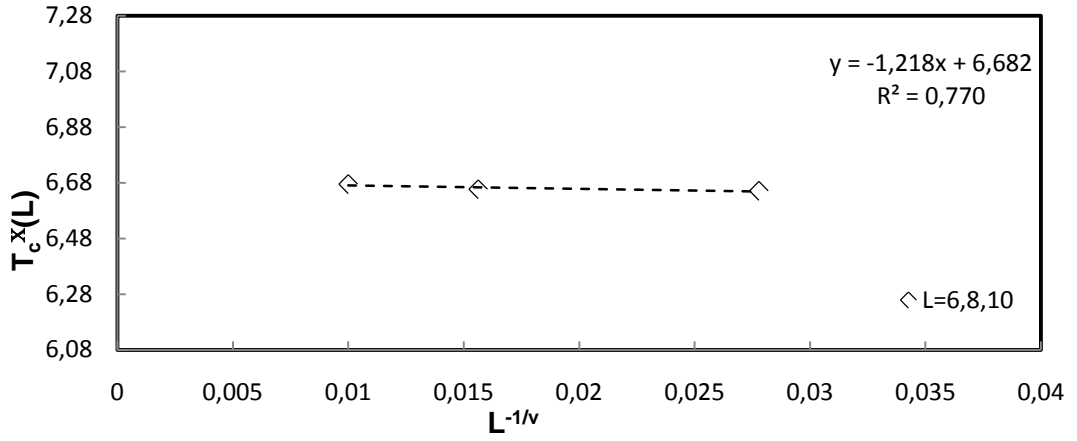
Tablo 4.1. $6 \leq L \leq 10$ Lineer boyutlu örgülerde manyetik alınganlık maksimumlarından elde edilen $kT_c^x(L)/J$ ve öz ısı maksimumlarından elde edilen $kT_c^C(L)/J$ sonlu örgü kritik sıcaklık değerleri

L	$kT_c^C(L)/J$	L	$kT_c^x(L)/J$
6	6.5840 ± 0.0140	6	6.6430 ± 0.0130
8	6.5900 ± 0.0110	8	6.6430 ± 0.0120
10	6.6210 ± 0.0060	10	6.6550 ± 0.0090

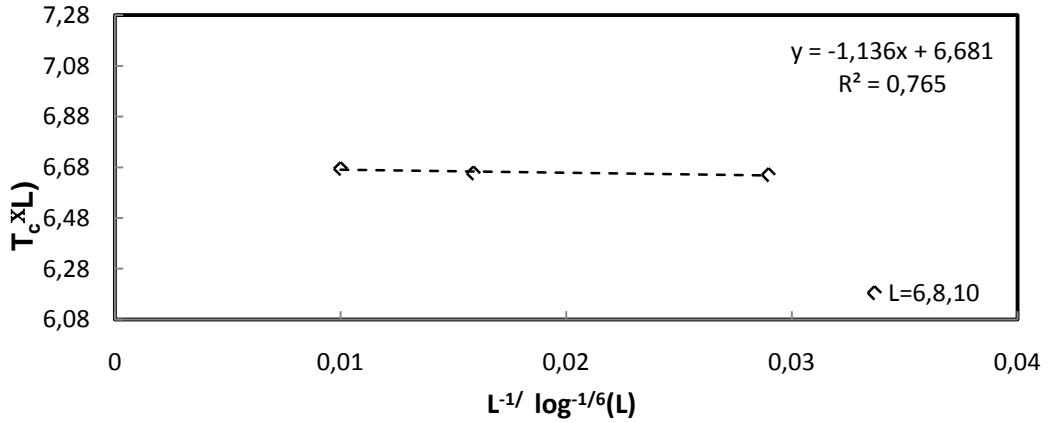
Sonlu örgü maksimumlarından elde edilen $T_c(L)$ kritik sıcaklığının boyuta bağımlılığı sonlu örgü ölçekleme teorisiyle ($L^{1/\nu}$, $\nu = 1/2$) $L^{-1/\nu}$ ile verilir ve buna ek olarak yavaşça değişen bir logaritmik faktöre ($\log^{-1/6} L$) sahiptir.

$$T_c(\infty) - T_c(L) = L^{-1/\nu} \log^{-1/6} L \quad (4.1)$$

Manyetik alınganlık değerlerinden elde edilen bu kritik sıcaklık değerlerinin $L^{-1/\nu}$ ve $L^{-1/\nu} \log^{-1/6} L$ ($\nu = 1/2$)'ye karşı grafikleri Şekil 4.4 ve Şekil 4.5'de verilmiştir.

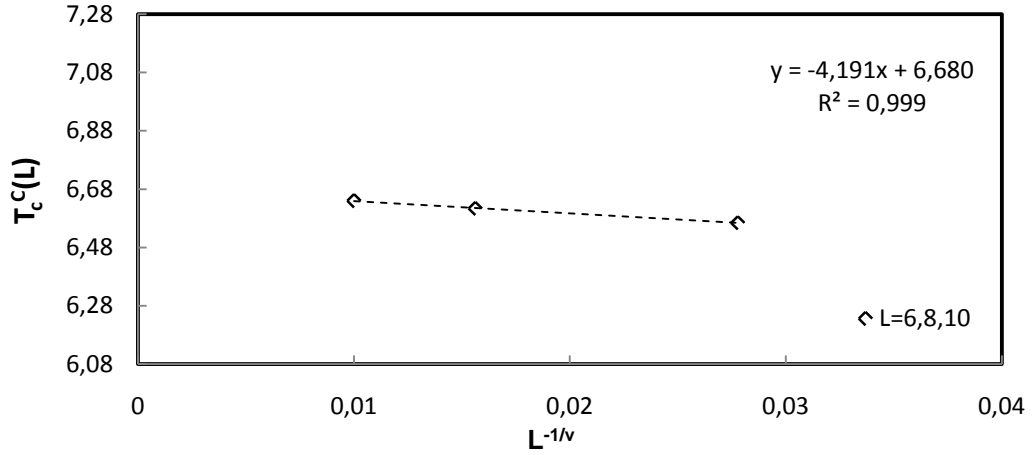


Şekil 4.4. Sonlu örgülerin manyetik alınganlık kritik sıcaklığı $T_c^x(L)$ 'ye karşı $L^{-1/\nu}$ grafiği ($\nu = 1/2$).

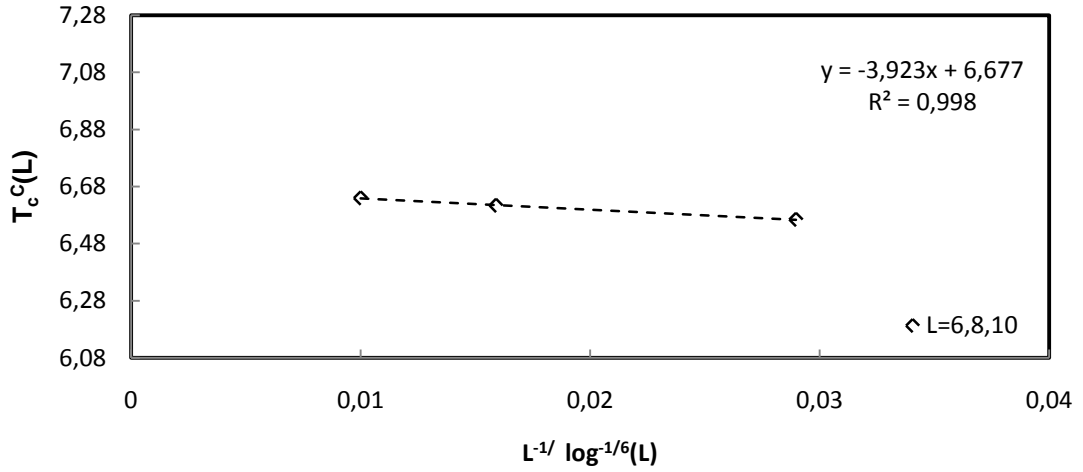


Şekil 4.5. Sonlu örgülerin manyetik alınganlık kritik sıcaklığı $T_c^X(L)$ 'ye karşı $L^{-1/\nu} \log^{-1/6} L$ grafiği ($\nu = 1/2$).

Öz ısı değerlerinden elde edilen kritik sıcaklık değerlerinin $L^{-1/\nu}$ ve $L^{-1/\nu} \log^{-1/6} L$ ($\nu = 1/2$) 'ye karşı grafikleri Şekil 4.6 ve Şekil 4.7'da verilmiştir.



Şekil 4.6. Sonlu örgülerin öz ısı kritik sıcaklığı T_c^C 'ye karşı $L^{-1/\nu}$ grafiği ($\nu = 1/2$).



Şekil 4.7. Sonlu örgülerin öz ısı kritik sıcaklığı T_c^C 'ye karşı $L^{-1/\nu} \log^{-1/6} L$ grafiği ($\nu = 1/2$).

Denklem 4.1'de verilen ifadeye uygun bir şekilde manyetik alınganlık sonsuz örgü kritik sıcaklık değerleri Tablo 4.2'de verilmiştir. Kritik sıcaklık değerlerini belirlerken yapılan en büyük hatanın ($\Delta T/2$) yaklaşık 0.06 olduğu kabul edilmiştir.

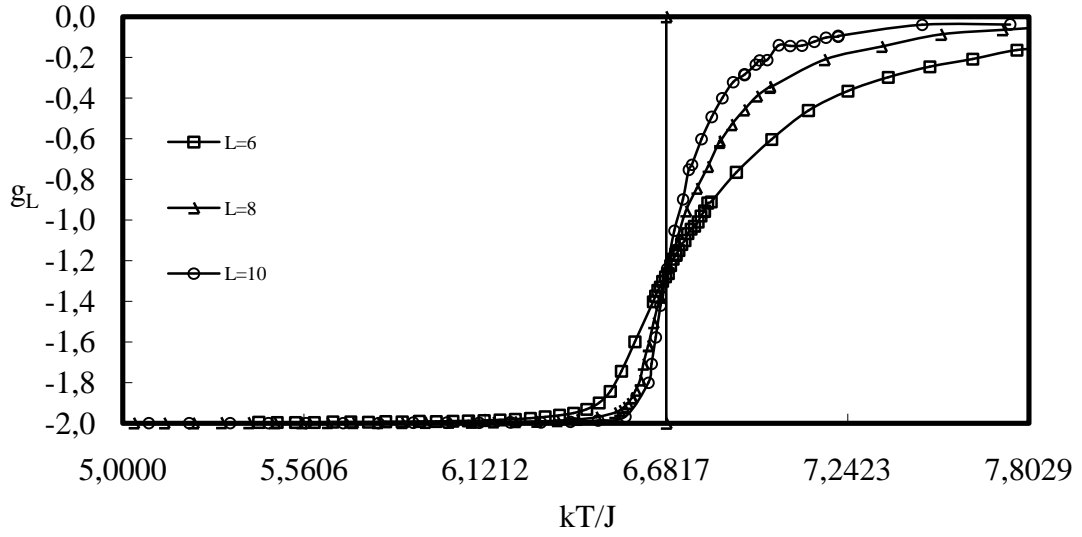
Tablo 4.2. $6 \leq L \leq 10$ doğrusal boyutlu sonlu örgülerin manyetik alınganlık kritik sıcaklığı $T_c^Z(L)$ ve özısı kritik sıcaklığı $T_c^C(L)$ 'ye karşı $L^{-1/\nu}$ ve $L^{-1/\nu} \log^{-1/6} L$ grafiklerinden elde edilen $T_c(\infty)$ sonsuz örgü kritik sıcaklıkları ($\nu = 1/2$).

	$T_c^Z(L)$ için	$T_c^C(L)$ için
	$6 \leq L \leq 10$	$6 \leq L \leq 10$
Logaritmik faktörsüz $T_c(\infty)$	6.6826 ± 0.0343	6.6805 ± 0.0060
Logaritmik faktörlü $T_c(\infty)$	6.6817 ± 0.0351	6.6776 ± 0.0086

Tablo 4.3. Farklı çalışmalar ve bu çalışmada hesaplanan sonsuz örgü kritik sıcaklık değerleri.

T_c	Metod
6.6817 [103]	Series expansion
6.6802 [106]	Series expansion
6.6803 [106]	Dynamic Monte Carlo
6.680 [100]	Cluster Monte Carlo
6.680, 6.6802, 6.682, 6.67 [33,41,47,45,53,58]	Creutz cellular automaton
6.6844 Bu çalışma	Creutz cellular automaton
6.6807 Bu çalışma	Creutz cellular automaton

Sonsuz örgü kritik sıcaklığını belirlemenin bir diğer yolu ise Binder parametresi g_L 'nin sıcaklıkla değişimini incelemektir. $L=6,8$ ve 10 örgüleri için g_L 'ye karşı kT/J grafikleri Şekil 4,8'de verilmektedir. Farklı örgüler için çizilen g_L 'ye karşı kT/J grafiğinde belirli bir noktada kesişen eğriler o noktadan sonra birbirinden ayrılmaktadır. Örgülerin g_L eğrilerinin birbirleri ile kesiştikleri bu nokta sonsuz örgü kritik sıcaklık değerini vermektedir. Bu kesim noktalarından sonsuz örgü kritik sıcaklık değeri tespit edildi.



Şekil 4.8. $6 \leq L \leq 10$ örgüleri için binder parametresi g_L 'nin sıcaklıkla değişimi.

4.2. DÜZEN PARAMETRESİ VE MANYETİK ALINGANLIK KRİTİK ÜSLERİ

Kritik sıcaklık (T_c) civarında termodinamik niceliklerin davranışı aşağıda tanımlanan indirgenmiş sıcaklığa (t) bağlı olarak incelenmektedir.

$$t = (T - T_c) / T_c \quad (4.2)$$

$t \rightarrow 0$ limitinde, herhangi bir termodinamik nicelik sonlu olan düzenli bir kısım ile ıraksayan “singular” bir kısma ayrılabilir. “Singular” kısımların t 'nin bir kuvveti ile orantılı olarak değiştiği kabul edilmektedir. Bu kuvvetler genel olarak kesirlidir.

Termodinamik niceliklerden kendiliğinden mıknatıslanma (düzen parametresi) M , dış manyetik alanın olmadığı durumda, kritik sıcaklığın altında T 'nin azalan bir fonksiyonudur ve T_c 'de sıfırdır. T 'nin T_c 'ye çok yaklaştığı durumlar için iki boyutta M aşağıda verilen kuvvet kanununa uygun olarak değişmektedir.

$$M(0,T) \rightarrow t^\beta \quad (4.3)$$

$$M(0,T) \rightarrow (-t)^{\beta'} \quad (4.4)$$

Sıcaklık T , kritik sıcaklık T_c 'ye çok yaklaştığında manyetik alınganlık χ ıraksamaktadır. Manyetik alınganlığın kritikteki ıraksayan davranışı γ ve γ' kritik üstleri ile karakterize edilmektedir.

$$kT_\chi(0,T) \rightarrow t^{-\gamma''} \quad (4.5)$$

$$kT_\chi(0,T) \rightarrow (-t)^{-\gamma'} \quad (4.6)$$

Dış manyetik alanın yokluğunda özısı (C), kritik sıcaklıklarda singular bir davranış göstermektedir. Bu durum α ve α' kritik üsleri ile karakterize edilmektedir.

$$C(0,T) \rightarrow t^{-\alpha} + b^+ \quad (4.7)$$

$$C(0,T) \rightarrow (-t)^{-\alpha'} + b^- \quad (4.8)$$

Burada b^\pm düzeltme terimidir. Özısı kritik üsleri α ve α' birbirine eşittir ve özısı içinde orantı sabitleri farklıdır. Özısı kritik sıcaklık üzerinde sonlu bir süreksizliğe sahiptir [13].

Renormalizasyon grup teorisine göre düzen parametresi ve manyetik alınganlığın sıcaklık bağımlılıkları;

$$M\alpha \quad t^{\bar{\beta}} \quad T \langle T_c, \quad T \rightarrow T_c \quad (4.9)$$

$$M\alpha \quad t^\beta \log^{1/3} t \quad T \langle T_c, \quad T \rightarrow T_c \quad (4.10)$$

$$\chi\alpha \quad t^{\bar{\gamma}} \quad T \langle T_c, \quad T \rightarrow T_c \quad (4.11)$$

$$\chi \alpha t^\gamma \log^{1/3} t \quad T \rightarrow T_c, \quad T \rightarrow T_c \quad (4.12)$$

bağıntıları ile verilir. Burada T_c kritik sıcaklık, t ($t = (T - T_c) / T_c$) ise indirgenmiş sıcaklıktır [46-53]. Kritik sıcaklık (T_c) civarında termodinamik niceliklerin davranışı indirgenmiş sıcaklığa bağlı olarak incelenmektedir.

Bu bağıntıları kullanarak elde edilen kritik üsler Tablo 4.4, Tablo 4.5, Tablo 4.6 ve Tablo 4.7'de verilmiştir.

Tablo 4.4. Doğrusal boyutu $6 \leq L \leq 10$ olan periyodik sınır şartlı örgülerde düzen parametresi kritik üsleri (β).

L	$\beta(T_c^\chi(L))$	$\beta(T_c(\infty))$
6	0.4958 ± 0.0003	0.4991 ± 0.0001
8	0.4982 ± 0.0001	0.4995 ± 0.0002
10	0.4983 ± 0.0001	0.5005 ± 0.0001

Tablo 4.5. Doğrusal boyutu $6 \leq L \leq 10$ olan periyodik sınır şartlı örgülerde düzen parametresi kritik üsleri ($\bar{\beta}$).

L	$\bar{\beta}(T_c^\chi(L))$	$\bar{\beta}(T_c(\infty))$
6	0.3979 ± 0.0009	0.4014 ± 0.0008
8	0.3825 ± 0.0001	0.3990 ± 0.0002
10	0.3542 ± 0.0001	0.3994 ± 0.0001

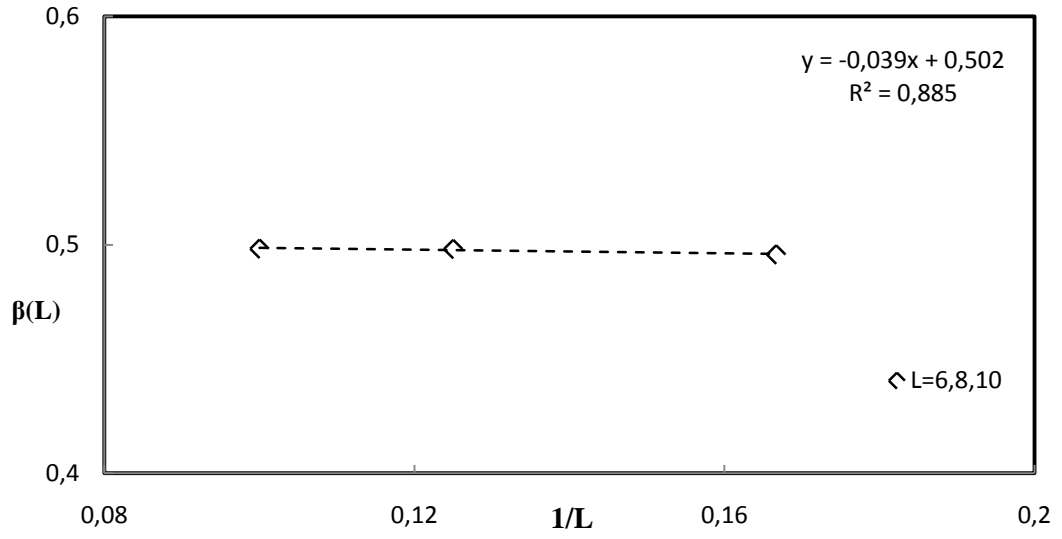
Tablo 4.6. Doğrusal boyutu $6 \leq L \leq 10$ olan periyodik sınır şartlı örgülerde manyetik alınganlık kritik üsleri (γ).

L	$\gamma(T_c^\chi(L))$	$\gamma(T_c(\infty))$
6	1.0028 ± 0.0001	1.1001 ± 0.0001
8	1.0084 ± 0.0014	1.0372 ± 0.0002
10	1.0092 ± 0.0026	1.0849 ± 0.0001

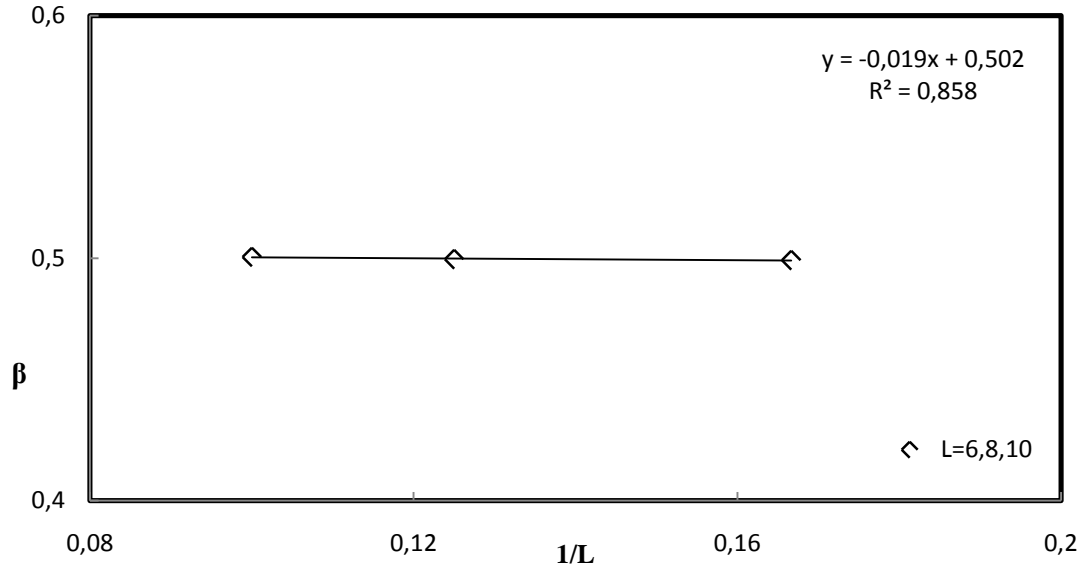
Tablo 4.7. Doğrusal boyutu $6 \leq L \leq 10$ olan periyodik sınır şartlı örgülerde manyetik alınganlık kritik üsleri ($\bar{\gamma}$).

L	$\bar{\gamma}(T_c^Z(L))$	$\bar{\gamma}(T_c(\infty))$
6	1.1191 ± 0.0001	1.2551 ± 0.0001
8	1.0086 ± 0.0002	1.0513 ± 0.0002
10	1.0002 ± 0.0001	1.1759 ± 0.0001

$6 \leq L \leq 10$ örgü aralığında sonlu örgü ve sonsuz örgü kritik sıcaklıkları dikkate alınarak Şekil 4.9, Şekil 4.10, Şekil 4.11 ve Şekil 4.12’ de verilen $1/L$ ’ye karşı kritik üs grafikleri çizilerek sonsuz örgü kritik üsleri belirlendi.

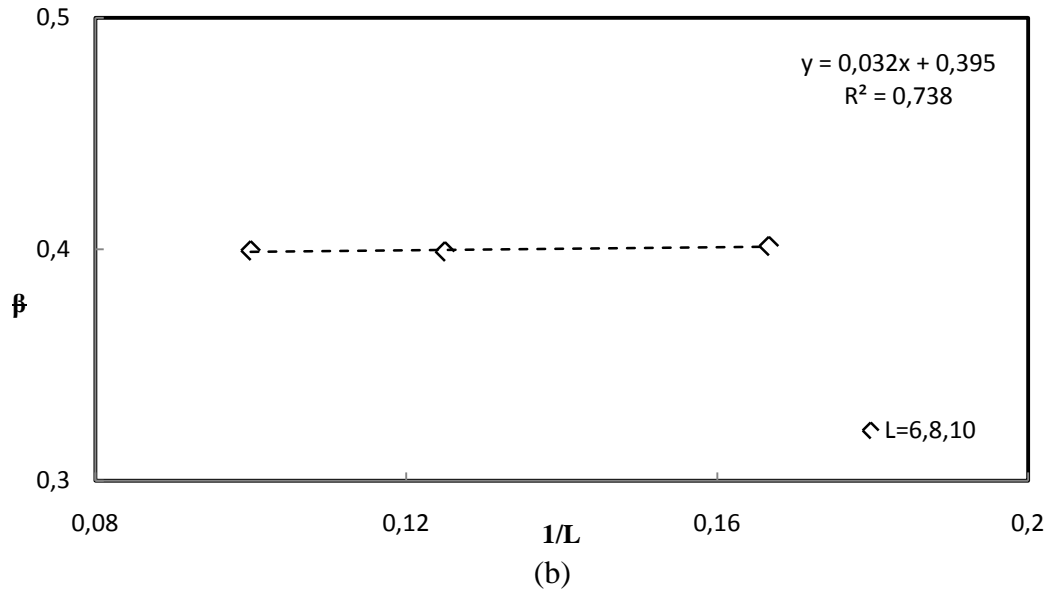
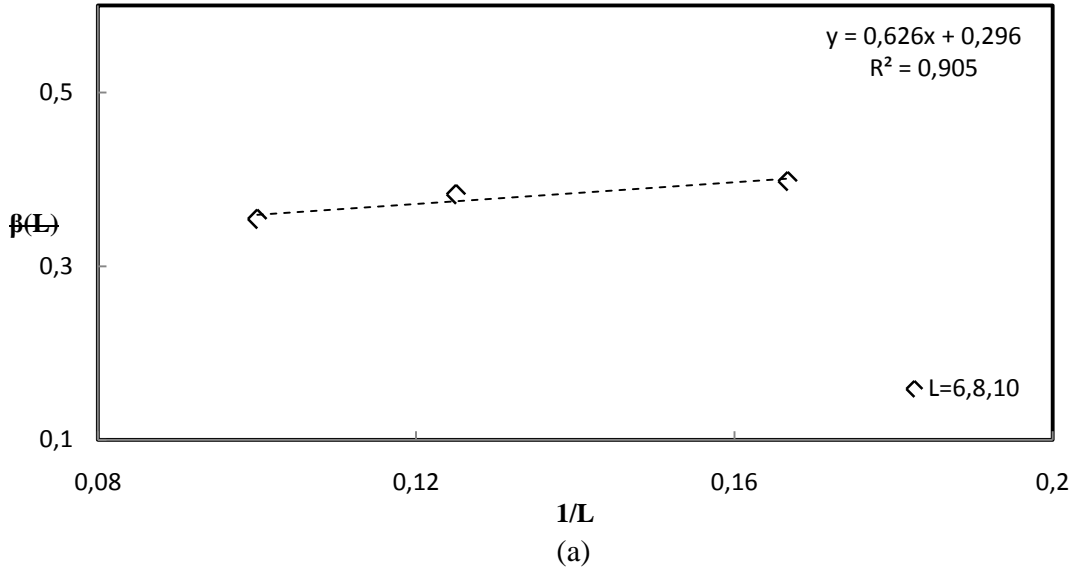


(a)

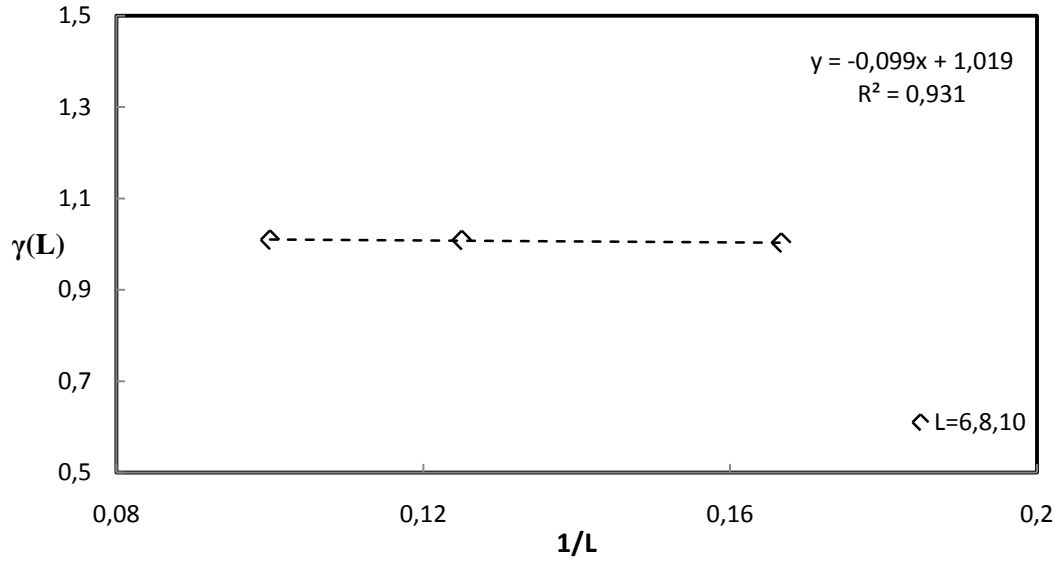


(b)

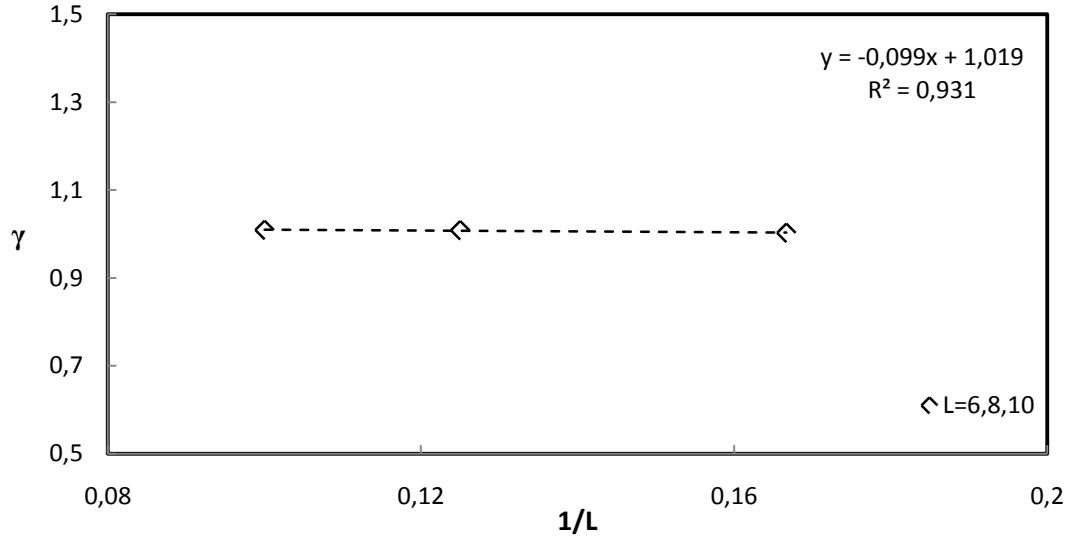
Şekil 4.9. a. $6 \leq L \leq 10$ örgü aralığında sonlu örgü kritik sıcaklıkları dikkate alınarak $1/L$ 'ye karşı $\beta(L)$ grafiği.
b. $6 \leq L \leq 10$ örgü aralığında sonsuz örgü kritik sıcaklıkları dikkate alınarak $1/L$ 'ye karşı β grafiği.



Şekil 4.10. a. $6 \leq L \leq 10$ örgü aralığında sonlu örgü kritik sıcaklıkları dikkate alınarak $1/L$ 'ye karşı $\bar{\beta}(L)$ grafiği.
b. $6 \leq L \leq 10$ örgü aralığında sonsuz örgü kritik sıcaklıkları dikkate alınarak $1/L$ 'ye karşı $\bar{\beta}$ grafiği.

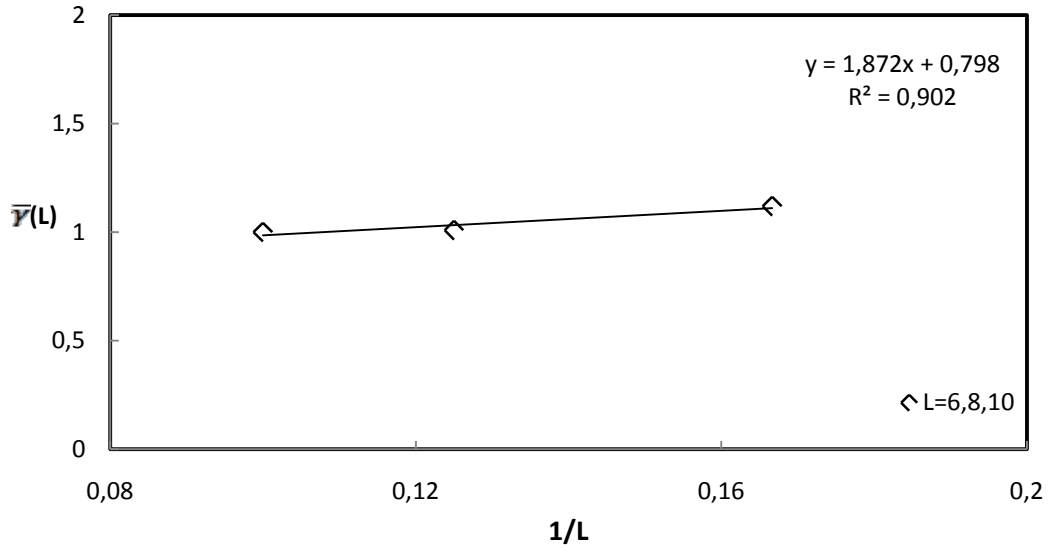


(a)

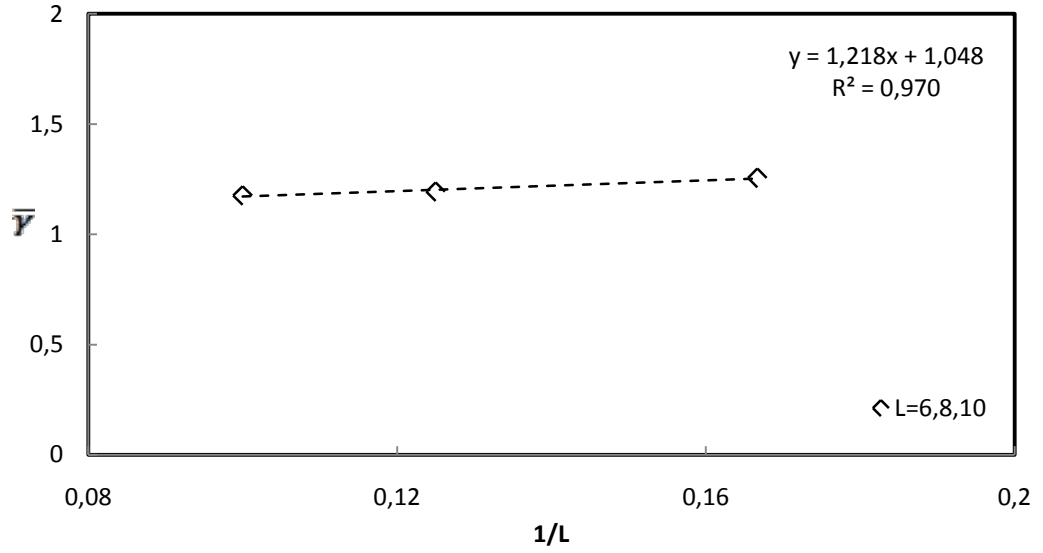


(b)

Şekil 4.11. a. $6 \leq L \leq 10$ örgü aralığında sonlu örgü kritik sıcaklıkları dikkate alınarak $1/L$ 'ye karşı $\gamma(L)$ grafiği.
b. $6 \leq L \leq 10$ örgü aralığında sonsuz örgü kritik sıcaklıkları dikkate alınarak $1/L$ 'ye karşı γ grafiği.



(a)



(b)

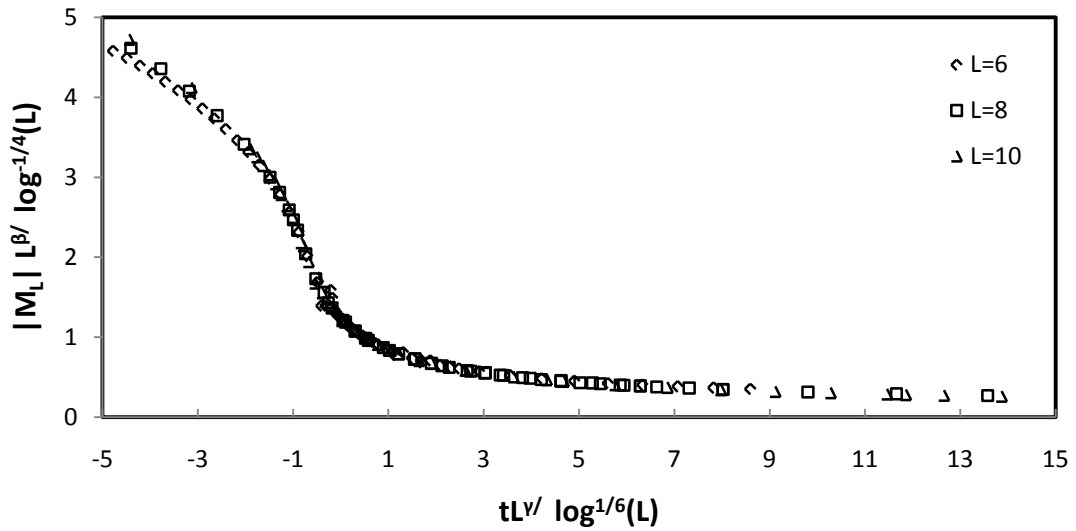
Şekil 4.12.a. $6 \leq L \leq 10$ örgü aralığında sonlu örgü kritik sıcaklıkları dikkate alınarak $1/L$ 'ye karşı $\bar{T}(L)$ grafiği.

b. $6 \leq L \leq 10$ örgü aralığında sonsuz örgü kritik sıcaklıkları dikkate alınarak $1/L$ 'ye karşı \bar{T} grafiği.

4.3. SONLU ÖRGÜ ÖLÇEKLEME FONKSİYONLARININ TESPİTİ

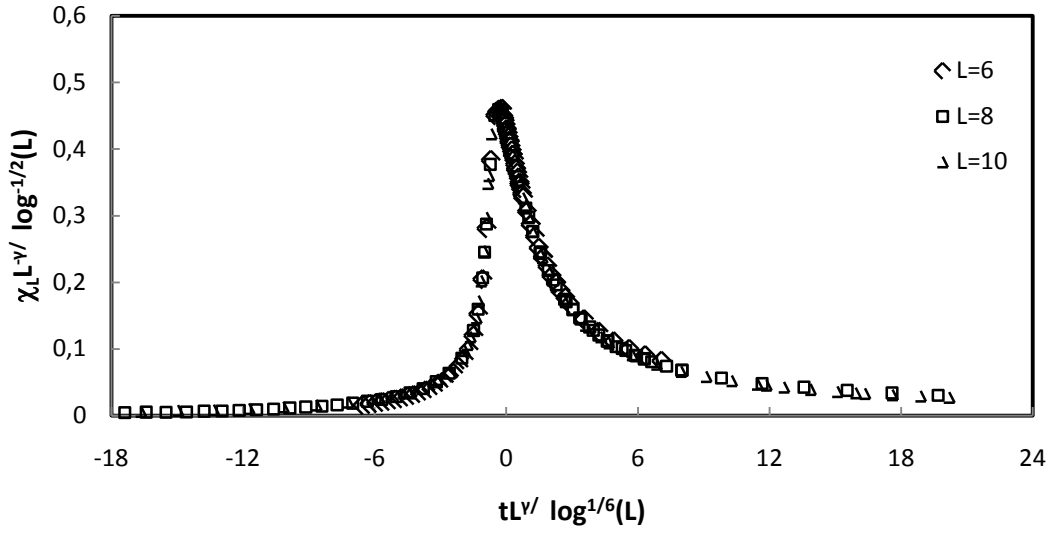
Creutz cellular automaton ile dört boyutlu Ising model için yapılan çalışmalarda sonlu örgülerde yapılan hesaplamalardan sonsuz örgü davranışını tespit etmek amacıyla periyodik sınır şartı için bilinen sonlu örgü ölçekleme teorisi yerine

$d > 4$ boyutlu örgülerde V.Privman ve M.E. Fisher tarafından sunulan hipotez N.Aktekin tarafından $d=4$ boyut için adapte edilmiştir [44]. Serbest enerji yoğunluğu için bilinen sonlu örgü ölçekleme bağıntısı, $f_L(t, h) = L^{-d} Y(tL^{1/\nu}, hL^{\delta\beta/\nu})$ yerine $d=4$ için logaritmik düzeltme çarpanları içeren, $f_L(t, h) = L^{-d} Y(tL^{1/\nu} \log^{1/6} L, hL^{\delta\beta/\nu})$ fonksiyonu kullanılmıştır. Bu serbest enerji yoğunluğu ifadelerinden faydalanılarak kendiliğinden mıknatıslanma (M), manyetik alınganlık (χ) ve öz ısı (C) için sonlu-örgü ölçekleme bağıntıları elde edilmiştir. N.Aktekin tarafından verilen $M = L^{-\beta/\nu} \log^{-1/4} L U(tL^{1/\nu} \log^{1/6} L)$ logaritmik düzeltmeli ölçekleme bağıntısı kullanılarak $M_L L^{-\beta/\nu} \log^{-1/4} L$ 'nin $tL^{1/\nu} \log^{1/6} L$ 'ye karşı çizilen Şekil 4.13'de görülmektedir.



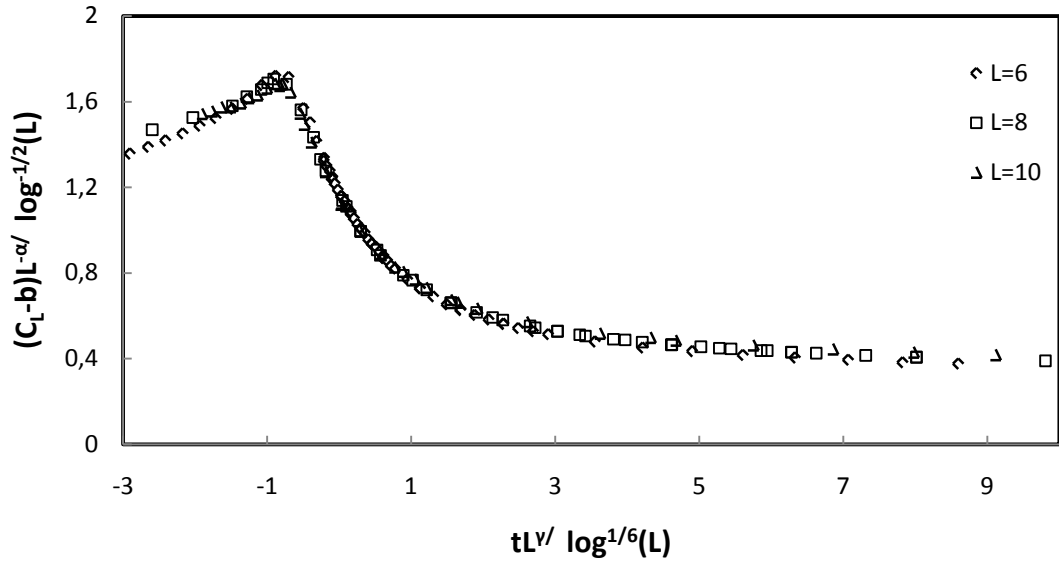
Şekil 4.13. $6 \leq L \leq 10$ örgülerinde logaritmik düzeltmeli sonlu örgü ölçekleme fonksiyonu için $M_L L^{-\beta/\nu} \log^{-1/4} L$ 'nin $tL^{1/\nu} \log^{1/6} L$ 'ye karşı değişimi.

Şekil 4.14'de bilinen logaritmik düzeltmeli sonlu örgü ölçekleme fonksiyonu için $\chi_L L^{-\gamma/\nu} \log^{-1/2} L$ 'nin $tL^{1/\nu} \log^{1/6} L$ 'ye karşı ölçekleme grafiği verilmiştir.



Şekil 4.14. $6 \leq L \leq 10$ örgülerinde logaritmik düzeltmeli sonlu örgü ölçekleme fonksiyonu için $\chi_L L^{-\gamma/\nu} \log^{-1/2} L$ 'nin $tL^{1/\nu} \log^{1/6} L$ 'ye karşı değişimi.

Şekil 4.15'de ise $C_L - b = L^{-\alpha/\nu} \log^{-1/3} L W(tL^{1/\nu} \log^{1/6} L)$ ölçekleme bağıntısına uygun olarak $(C_L - b)L^{-\alpha/\nu} \log^{-1/3} L$ 'nin $tL^{1/\nu} \log^{1/6} L$ 'ye karşı ölçekleme grafiği verilmiştir.



Şekil 4.15.a. $6 \leq L \leq 10$ örgülerinde logaritmik düzeltmeli sonlu örgü ölçekleme fonksiyonu için $(C_L - b)L^{-\alpha/\nu} \log^{-1/3} L$ 'nin $tL^{1/\nu} \log^{1/6} L$ 'ye karşı değişimi.

Ölçeklemede en uygun b değerleri $6 \leq L \leq 10$ örgüleri için $b=0$ olarak tespit edilmiştir.

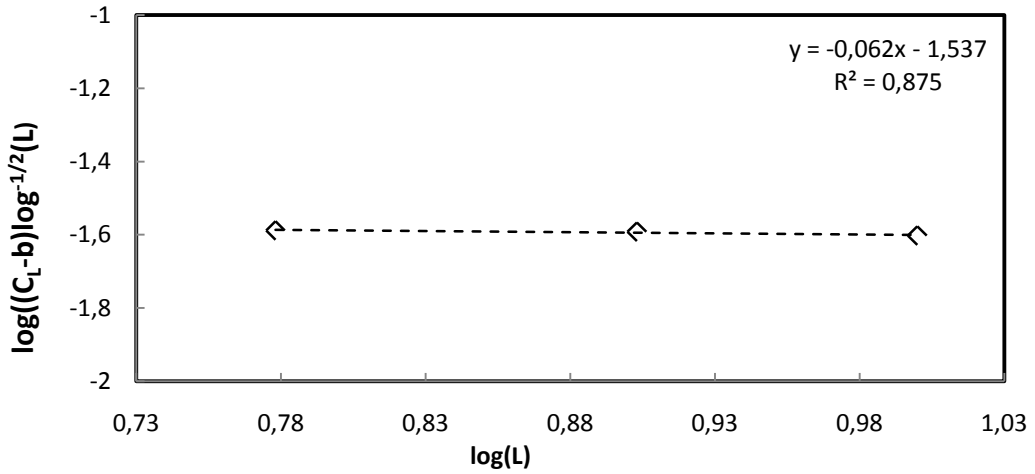
4.3.1. Kritik Üsler

Öz ısı için sonlu örgü ölçekleme bağıntısı aşağıdaki şekilde verilmektedir [52].

$$C(L) \propto L^{\alpha/\nu} \quad (4.13)$$

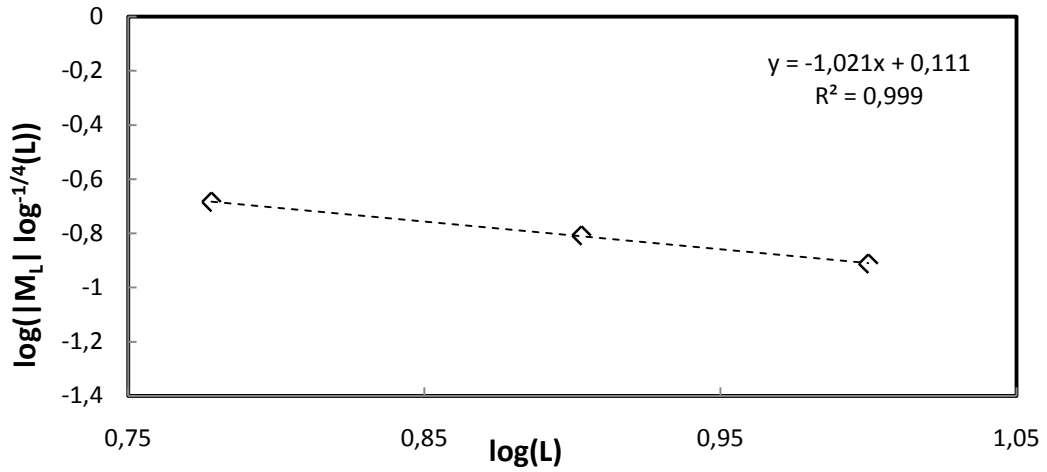
$$C(L) \propto L^{\alpha/\nu} \text{Log}^{1/3} L \quad (\alpha=0) \quad (4.14)$$

$\log((C_L-b)\log^{-1/2}(L))$ 'ye $\log(L)$ 'nin grafiği Şekil 4.16'de verilmiştir.



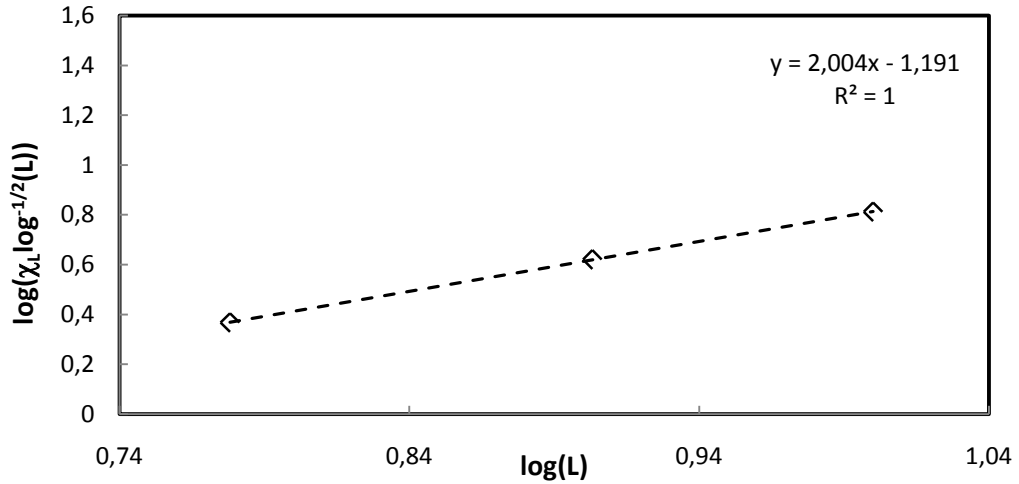
Şekil 4.16. Örgü boyutu $6 \leq L \leq 10$ aralığında $\log((C_L-b)\log^{-1/2}(L))$ 'ye karşı $\log(L)$ 'nin grafiği.

$|M_L| \log^{-1/4} L$ 'ye karşı $\log(L)$ 'nin grafiği Şekil 4.17'de verilmiştir.



Şekil 4.17. Örgü boyutu $6 \leq L \leq 18$ aralığında $|M_L| \log^{-1/4} L$ 'ye karşı $\log(L)$ grafiği.

$\chi_L \log^{-1/2} L$ ye karşı $\log(L)$ 'nin grafiği Şekil 4.18'de verilmiştir.



Şekil 4.18. Örgü boyutu $6 \leq L \leq 10$ aralığında $\chi_L \log^{-1/2} L$ 'ye karşı $\log(L)$ grafiği.

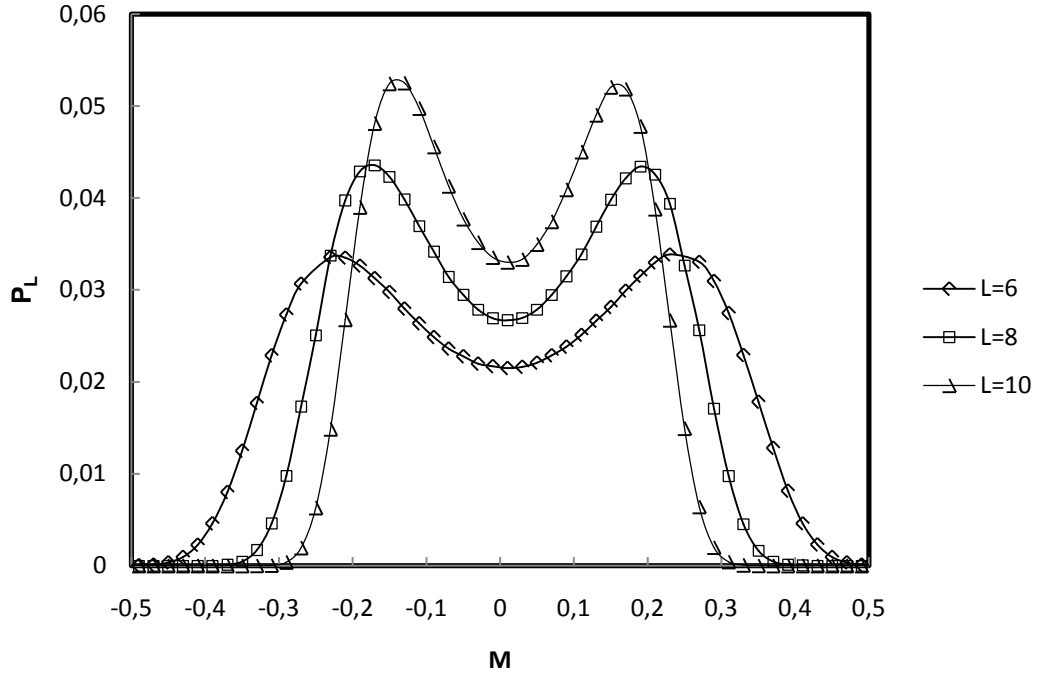
4.4. DÜZEN PARAMETRESİ İHTİMALİYET DAĞILIMI İÇİN SONLU ÖRGÜ ÖLÇEKLEME BAĞINTILARININ TESPİTİ

$d = 4$ 'de düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı için 3.40 eşitliğinde verilen sonlu örgü ölçekleme bağıntısının doğruluğunu denemek ve olasılık dağılımı analitik fonksiyonundaki parametreleri belirlemek amacıyla, doğrusal boyutu $L = 6,8$ ve 10 olan periyodik sınır şartlı soyut basit küp örgülerde, Creutz 'CA' ile simülasyonlar yapılmıştır.

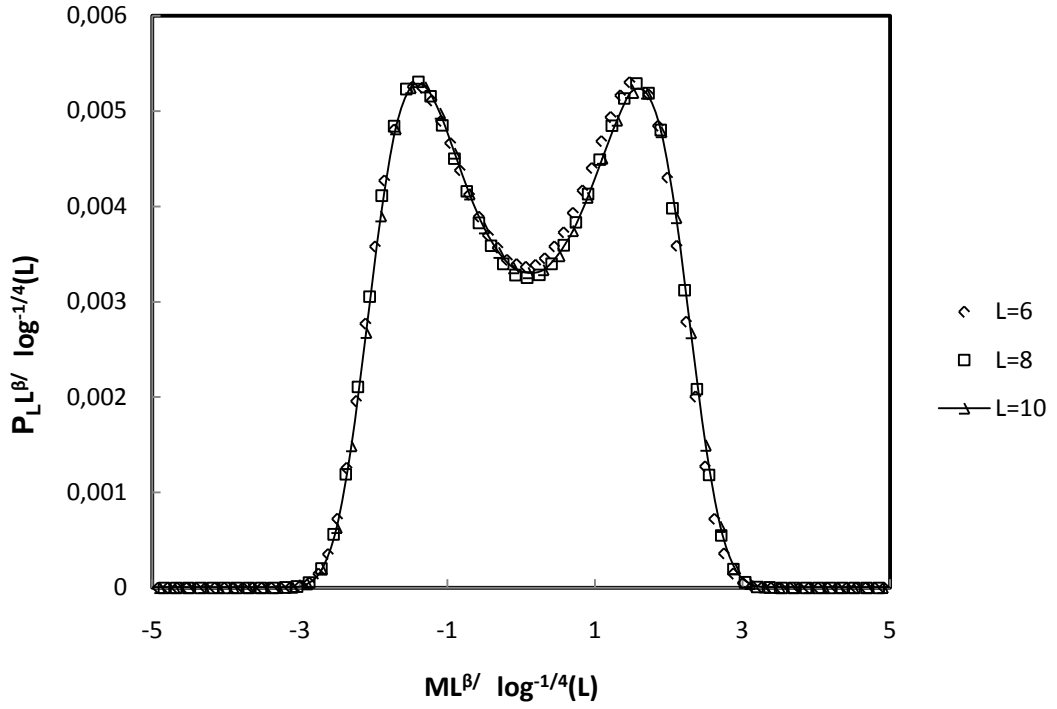
$T = 0$ 'daki ihtimaliyet dağılımı,

$$P_L(M,0) = C_2^{-1} L^{\beta/\nu} \log^{-1/4}(L) p(C_2^{-1} M L^{\beta/\nu} \log^{-1/4} L) \quad (4.15)$$

ifadesi ile verilmektedir. 4.15 denkleminde göre çizilen Şekil 4.19'de her bir örgünün kritik sıcaklığı için 20 kez 1.10^6 Monte Carlo adımına gidilmiştir.

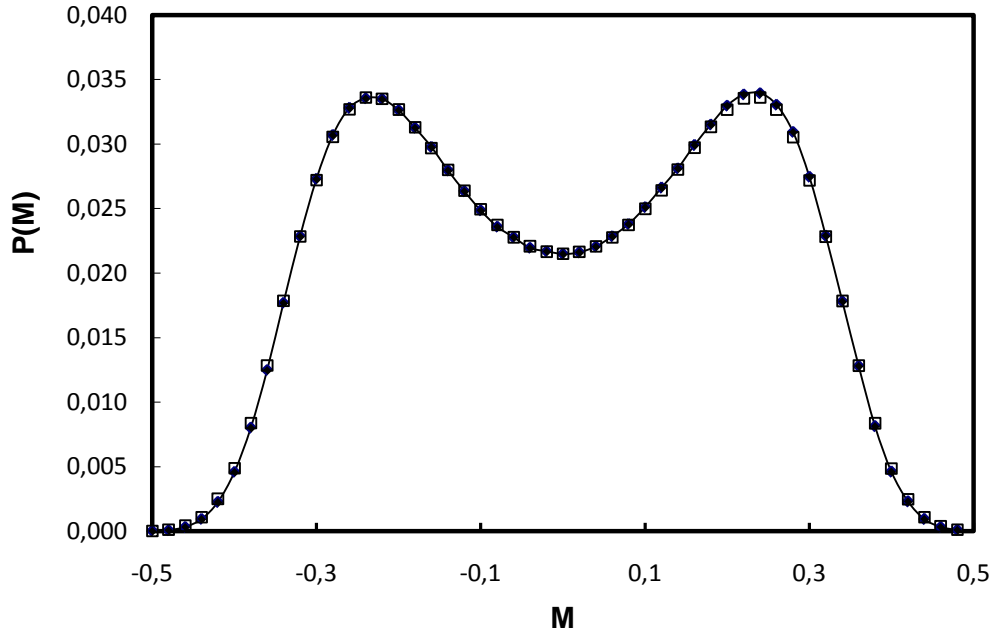


Şekil 4.19. Düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının, (P_L) indirgenmiş sıcaklığın $t = 0$ değerinde ve doğrusal boyutları $L = 6, 8$ ve 10 olan örgüler için, düzen parametresine (M) karşı çizimi. ($\beta/\nu=1$ ve $T_c=6.6807$).



Şekil 4.20. Düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının, (P_L) indirgenmiş sıcaklığın $t = 0$ değerinde ve doğrusal boyutları $L = 6, 8$ ve 10 olan örgüler için düzen parametresine (M) karşı sonlu örgü ölçekleme çizimi. Logaritmalı düzenlemeler göz önüne alınmaktadır. ($\beta/\nu=1$ ve $T_c=6.6807$).

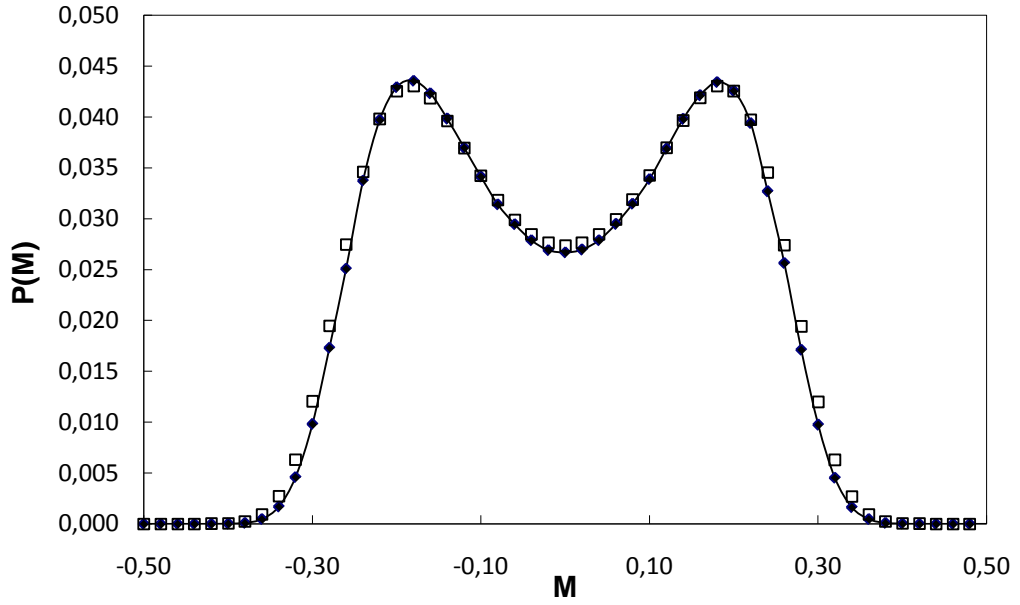
Düzen parametresi olasılık dağılımı için yazılan analitik fonksiyonun en basit hali eşitlik 3.45’de verilmektedir. Buradaki a ve c katsayıları birer sabit olup $P(M)$ eğrisine uydurulan ve analitik ifadeye göre yapılmış fit ile belirlenebilmektedir. Analitik fonksiyona yapılan fit sonucunda elde edilen değerler Tablo 4.8’de verilmektedir. Aşağıdaki şekiller $L=6, 8$ ve 10 örgüleri için analitik fonksiyona göre yapılan fit eğrilerini göstermektedir. Yapılan fitler tüm örgülerde $P(M)$ fonksiyonlarına oldukça iyi uyum sağlamaktadır



(a)

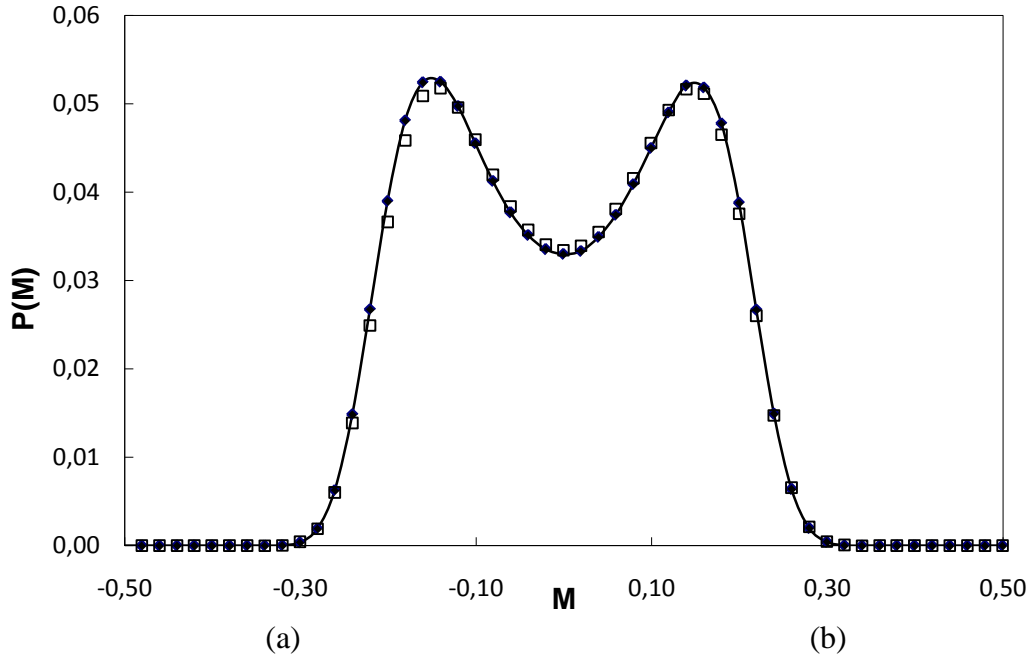
(b)

Şekil 4.21. $P(M)$ 'nin $L=6$ için M 'ye karşı analitik ifadesine göre yapılan fit.



(a)

Şekil 4.22. $P(M)$ 'nin $L=8$ için M 'ye karşı analitik ifadesine göre yapılan fit.



Şekil 4.23. $P(M)$ 'nin $L=10$ için M 'ye karşı analitik ifadesine göre yapılan fit.

Analitik sonlu örgü ölçekleme fonksiyonunun parametreleri için, bu fonksiyonun L örgü boyuna ait düzen parametresi olasılık dağılımlarının sonlu örgü ölçekleme çizimlerine uydurulması ile elde edilen tüm sonuçlar Tablo 4.8'de verilmektedir. Burada verilem $T_c(L)$, manyetik alınganlık ve düzen parametresinin ortalama değerleri belirlenen örgü kritik sıcaklığında $20 \cdot 10^6$ cellular automaton zaman adımı simulasyon yapılarak bulunan değerlerdir. Ayrıca çizelgede, kritikteki $P(M)$ fonksiyonlarının M_0 ve P_0 değerleri de verilmektedir.

Tablo 4.8. Analitik sonlu örgü ölçekleme fonksiyonun parametreleri için, bu fonksiyonun L örgü boylarına ait düzen parametresi olasılık dağılımlarının sonlu örgü ölçekleme çizimlerine uydurulması ile elde edilen değerler.

	$T_c(L)$	M_{ort}	X_{ort}
$L=6$	6.6857 ± 0.0006	$0,1917 \pm 0.0005$	$13,6690 \pm 0.0357$
$L=8$	6.6801 ± 0.0003	0.1515 ± 0.0004	26.4570 ± 0.1188
$L=10$	6.6807 ± 0.0005	$0,1237 \pm 0.0008$	$43,448 0 \pm 0.2305$

	a	c	M ₀	P ₀
L=6	0.0171	0.4482	0.2322	0.0337
L=8	0.0097	0.4564	0.1850	0.0431
L=10	0.0057	0.4390	0.1465	0.0519

P₀ değerleri örgü boyu arttıkça artar. M₀ değerleri ise örgü boyu arttıkça azalır. a değerleri tüm örgüler için sabit c değerleri ise örgü boyu arttıkça azalmaktadır.

Dört boyutta analitik fonksiyonun Monte Carlo algoritması kullanarak spin-1/2 Ising model için L=8ve 10 örgülerinde [52] tarafından a ve c parametreleri bulunmuştur. Tablo 4.9'da bu değerler verilmektedir.

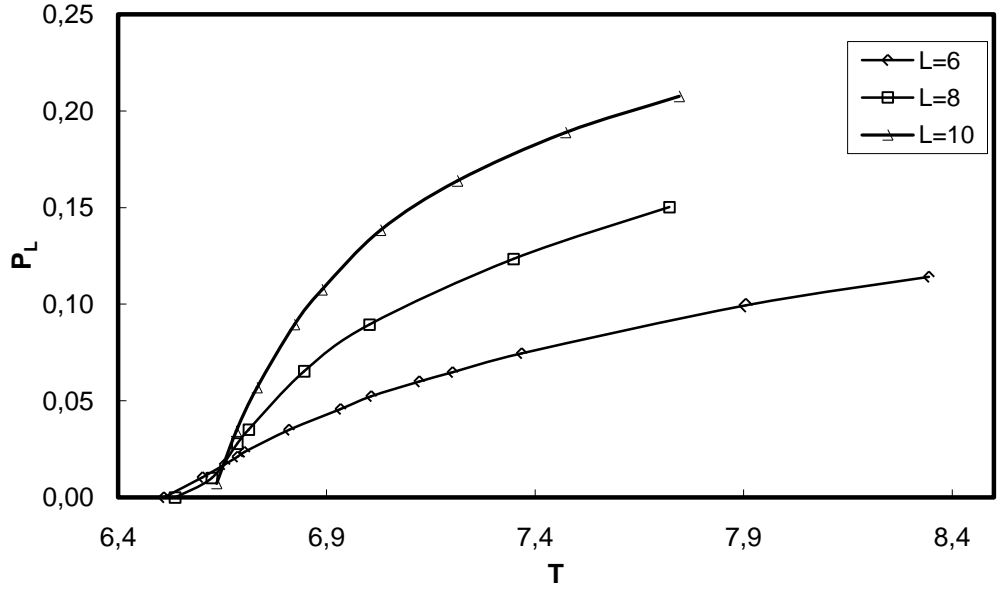
Tablo 4.9. Dört boyutlu spin-1/2 Ising modelinMonte Carlo algoritması kullanılarak belirlenmiş analitik fonsiyon parametreleri.

L	a	c	M ₀	P ₀
10	0.006	0.206	1.284	0.621
8	0.011	0.210	1.306	0.620

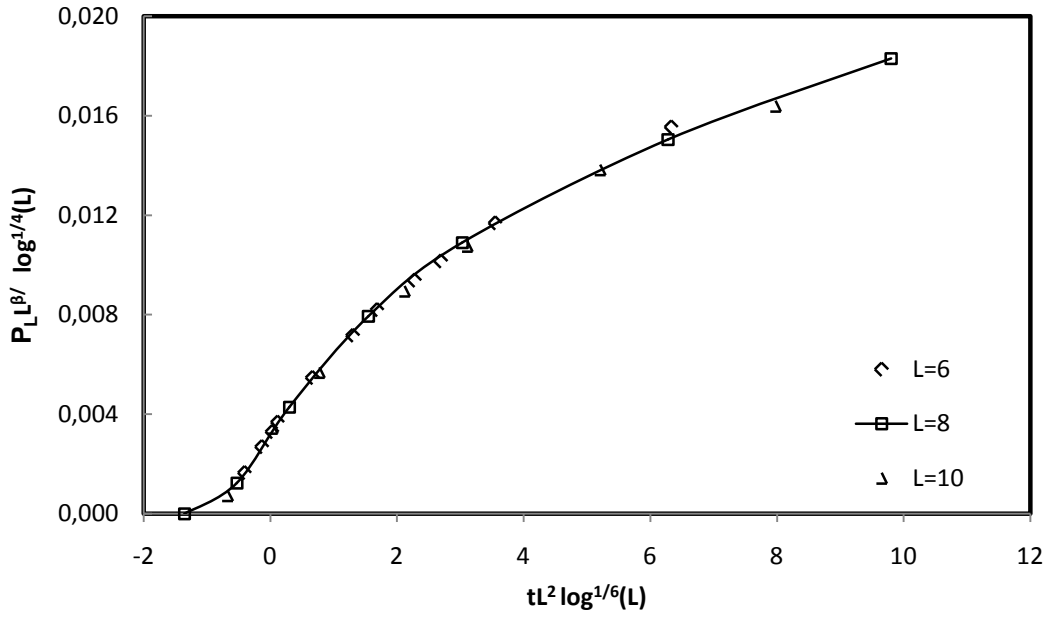
M= 0'daki ihtimaliyet dağılımı ise

$$P_L(0, t) = C_2^{-1} L^{\beta/\nu} \log^{-1/4}(L) p(C_1 t L^{1/\nu} \log^{1/6} L) \quad (4.16)$$

ifadesi ile verilmektedir. L = 6,8 ve 10 doğrusal boyutlu örgüler için (P_L)'nin M= 0'da sıcaklığa karşı grafiği şekil 4.24'de verilmiştir.



Şekil 4.24. Doğrusal boyutları $L = 6, 8$ ve 10 olan örgüler için (P_L) 'nin $M=0$ 'daki ihtimaliyet dağılımı ve sıcaklığa karşı çizimi.



Şekil 4.25. Doğrusal boyutları $L = 6, 8$ ve 10 olan örgüler için (P_L) 'nin $M=0$ 'daki ihtimaliyet dağılımına karşı sonlu örgü ölçekleme çizimi. Logaritmali düzenlemeler göz önüne alınmaktadır ($\beta/\nu=1$ ve $T_c=6.6807$).

5. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu çalışmada Creutz Cellular Automaton standart algoritması ile simülasyonlar yapılmıştır. Öncelikle özısı (C), manyetizasyon (M) ve manyetik alınganlık (χ) gibi termodinamik niceliklerin sıcaklıkla değişimleri incelenerek sonlu örgü kritik sıcaklıkları belirlenmiştir. Sonlu örgü kritik sıcaklıkları kullanılarak sonsuz örgü kritik sıcaklıkları ve kritik sıcaklık civarında termodinamik niceliklerin süreksizliklerini tanımlayan kritik üsler incelenmiştir. Çalışmanın asıl amacı olan düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı incelenmiştir.

Şekil 4.1'den kendiliğinden mıknatıslanmanın farklı örgülerdeki sıcaklık değişimleri incelendiğinde belirli bir sıcaklık (T_c) değerinden daha büyük sıcaklıklarda açık bir örgü etkisi olduğu görülmektedir. Bilindiği gibi sonsuz bir sistem için kendiliğinden mıknatıslanma kritik sıcaklık ve daha büyük sıcaklıklarda sıfır olmaktadır. Sonlu örgülerde yapılan hesaplamalardan belirli bir sıcaklık değerinden daha büyük sıcaklıklarda kendiliğinden mıknatıslanmanın örgü büyüdükçe sıfıra yaklaşma eğiliminde olduğu görülmektedir. Diğer taraftan kendiliğinden mıknatıslanmanın dalgalanmalarından hesaplanan manyetik alınganlık ve içenerji dalgalanmalarından hesaplanan özısının sıcaklık değişimi incelendiğinde kendiliğinden mıknatıslanma için örgü etkisinin başladığı sıcaklıklarda manyetik alınganlık ve özısının her bir örgü için belirli sıcaklıklarda bir pik verdiği görülmektedir (Şekil 4.2, Şekil 4.3).

Manyetik alınganlık ve özısı'nın sıcaklıkla değişim eğrileri yardımı ile belirlenen Tablo 4.1 ile verilen $6 \leq L \leq 10$ Lineer boyutlu örgülerde manyetik alınganlık maksimumlarından elde edilen $kT_c^Z(L)/J$ ve öz ısı maksimumlarından elde edilen $kT_c^C(L)/J$ sonlu örgü kritik sıcaklık değerleri belirlenmiştir.

Manyetik alınganlık ve özısı için belirlenen sonlu örgü kritik sıcaklık değerleri kullanılarak $6 \leq L \leq 10$ lineer boyutlu sonlu örgülerin $T_c(\infty)$ sonsuz örgü kritik sıcaklıkları belirlenmiştir. Tablo 4.1'de verilen $T_c(\infty)$ sonsuz örgü kritik sıcaklıkları literatür ile uyum içindedir.

Yapılan simülasyonların doğruluğunu göstermek açısından evrensel düzen parametresi manyetik alınganlık kritik üslerini belirlemek önemlidir. β ve β' kendiliğinden mıknatıslanma kritik üsleri olarak adlandırılmakta ve değerleri iki boyutlu Ising model için $\beta= 0.125$, $\beta'=0.875$ [38-42,45] , üç boyutlu Ising model için $\beta= 0.30$, $\beta'=0.63$ [43,44] ve dört boyutlu Ising model için $\beta= 0.50$, $\beta'=0.35$ [46-53] olarak verilmektedir. γ ve γ' manyetik alınganlık kritik üsleri olarak bilinir. İki boyutlu Ising model için teorik olarak $\gamma = \gamma'=1.75$ [38-42,45], üç boyutlu Ising model için $\gamma = \gamma'=1.25$ [43,44] ve dört boyutlu Ising model için $\gamma = \gamma'=1.02$ 'dir [46-53]. Bu tez çalışmasında elde edilen kritik üsler Tablo 4.4, Tablo 4.5, Tablo 4.6 ve Tablo 4.7'de verilmiştir ve elde edilen sonuçlar literatür ile uyumludur.

Örgü boyutu $6 \leq L \leq 10$ aralığında $1/L$ 'ye karşı $\beta(L)$ grafiğinin kesim noktasından $\beta = 0.5026(T_c(L))$, $\beta = 0.5023(T_c(\infty))$ elde edilmiştir. Elde edilen bu değerler teorik değer ($\beta = 0.5$) ve diğer simülasyon çalışmalarıyla uyumludur [46-53].

Örgü boyutu $6 \leq L \leq 10$ aralığında $1/L$ 'ye karşı $\bar{\beta}(L)$ grafiğinin kesim noktasından $\bar{\beta} = 0.2964(T_c(L))$, $\bar{\beta} = 0.3956(T_c(\infty))$ elde edilmiştir. Elde edilen bu değer teorik değer ($\bar{\beta} = 0.5$) ve diğer simülasyon çalışmalarıyla uyumludur [46-53]. $1/L$ 'ye karşı $\gamma(L)$ grafiğinin kesim noktasından $\gamma = 1.0198(T_c(L))$, $\gamma = 1.0198(T_c(\infty))$ elde edilmiştir. Elde edilen bu değer teorik değer ($\gamma = 1$) ve diğer çalışmalarla ($\gamma \cong 1$) uyum halindedir. $1/L$ 'ye karşı $\bar{\gamma}(L)$ grafiğinin kesim noktasından $\bar{\gamma} = 0.7982(T_c(L))$, $\bar{\gamma} = 1.0489(T_c(\infty))$ elde edilmiştir. Elde edilen bu değer teorik değer ($\bar{\gamma} = 1$) ve diğer simülasyon çalışmalarıyla uyumludur [46-53].

Şekil 4.2'de, $d=4$ için manyetik alınganlık (χ)'in sıcaklıkla değişim eğrileri $6 \leq L \leq 10$ için verilmiştir. Şekil 4.2'den manyetik alınganlık (χ)'in sıcaklıkla değişiminde örgü etkisi pik değerlerinin yüksekliğinde ve eğrinin şeklinde kendini göstermektedir. L büyüdükçe manyetik alınganlık değerleri T_c civarında daha keskin bir şekilde ıraksamaktadır. Kendiliğinden mıknatıslanma (M) için sonlu-örgü

ölçekleme bağıntıları ve logaritmik düzeltmeli ölçekleme bağıntıları kullanılarak $M_L L^{-\beta/\nu} \log^{-1/4} L$ 'nin $tL^{1/\nu} \log^{1/6} L$ 'ye karşı çizilen grafikten verilen ölçekleme bağıntısının doğruluğu Şekil 4.13'de görülmektedir. Şekil 4.3'te ise öz ısı (C)'nin $d=4$ için sıcaklıkla değişim eğrileri $6 \leq L \leq 10$ için verilmiştir. Şekil 4.3'de öz ısıda örgü etkisi pik noktalarının L büyüdükçe sola doğru kayması ve C'nin verileri $T > T_c$ de hızlı bir şekilde sıfıra doğru gitmesi şeklinde kendini göstermektedir. Şekil 4.14'de ise $\chi = L^{-\gamma/\nu} \log^{-1/2} L V(tL^{1/\nu} \log^{1/6} L)$ bağıntısına uygun olarak $\chi_L L^{-\gamma/\nu} \log^{-1/2} L$ 'ye karşı $tL^{1/\nu} \log^{1/6} L$ grafiğinden verilen ölçekleme bağıntısının doğruluğu görülmektedir. Ayrıca ölçekleme bağıntıları yardımı ile örgü boyutu $6 \leq L \leq 10$ aralığında $\alpha/\nu = 0.0626$, $\beta/\nu = 1.0215$, $\gamma/\nu = 2.0049$ kritik üsleri elde edilmiştir. Sonuçlar teorik değerlerle ve diğer simülasyon çalışmalarıyla uyumludur [46-53].

Bu çalışmanın esas amacı olan düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının CCA simülasyonları ile incelenerek, Monte Carlo simülasyonları ile yapılan çalışmalarla kıyaslamak için $L = 6, 8$ ve 10 doğrusal boyutlu örgüler belirlenen kritik sıcaklık değerlerinde manyetizasyon eksenindeki aralık 100 eşit parçaya bölünerek simülasyonları yapılmıştır. Şekil 4.19'de görüldüğü gibi kritik sıcaklıktaki eğriler örgü boyuna bağlı olarak değişim göstermektedir. Beklenildiği gibi [99] küçük örgülerde daha geniş ve tepesi kısa, örgü boyu büyüdükçe darlaşan ve boyu uzayan eğriler ortaya çıkar. Düzen parametresi olasılık dağılımı için yapılan ölçeklemede evrensel kritik üs değerleri kullanılmıştır. Dört boyutlu sistemlerde $\beta = 1/2$, $\nu = 1/2$ ve $\beta/\nu = 1$ sonsuz örgü kritik üs değerleri kullanılarak ölçekleme yapılmıştır. Yapılan ölçekleme sonucunda tüm eğrilerin yaklaşık olarak üst üste geldiği görüldü.

Bulgular dört boyutlu Ising modelinde düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı için eşitlik 3.40'da verilen sonlu örgü ölçekleme bağıntısının geçerli olduğunu göstermektedir.

Tez çalışması kapsamında ise Cellular Automaton simülasyonları için belirlenen örgü kritik sıcaklıklarındaki düzen parametresi olasılık dağılım analitik fonksiyon parametreleri belirlenmiştir.

Literatürde dört boyutlu Ising modelin Monte Carlo simülasyonları için sonsuz örgü kritik sıcaklığındaki düzen parametresi olasılık dağılım fonksiyonlarına analitik ifadeye göre fit yapılarak a ve c değerleri tespit edilmiştir. N. Aktekin [52] tarafından dört boyutta analitik fonksiyonun Monte Carlo algoritmasını kullanarak spin1/2 Ising model için L=8 ve 10 örgülerinde belirlenen Tablo 4.9'da verilen a ve c parametreleri ile karşılaştırılmıştır.

Termodinamik limitte P(M) fonksiyonları evrenselidir. Bu nedenle P(M) fonksiyonun analitik ifadesindeki a ve c sabitlerinin de evrensel olacağı düşünülmektedir [100]. Ancak Tablo 4.8 incelendiğinde a değerleri tüm örgüler için literatür değerleri ile uyumlu iken c değerleri oldukça farklı sonuçlar göstermektedir. Örgü boyutu arttıkça c değerlerinin de literatür ile uyumlu sonuçlara yaklaştığı bilinmektedir. Küçük örgülerde Monte Carlo ile yapılan simülasyon sonuçları CCA ile yapılan simülasyon sonuçlarından literatüre daha yakın sonuçlar göstermiştir. P(M) fonksiyonunun analitik incelenmesinde kritik sıcaklığın iyi belirlenmesi oldukça önemlidir. Bu noktada Monte Carlo simülasyonlarında sıcaklığın giriş parametresi olmasının önemli bir avantaj sağladığı düşünülmektedir.

$d = 4$ de Ising modelinin düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı için elde edilen sonlu örgü ölçekleme bağıntısı Cellular Automaton simülasyonlarıyla sayısal olarak doğrulanmıştır. Böylece, düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı için sonlu örgü ölçekleme bağıntısının yapı olarak $d = 4$, L=6,8 ve 10'da geçerli olduğu gösterilmiştir.

KAYNAKLAR

- [1]. Yeomans, J. M., "Statistical Mechanics of Phase Transitions", *Clarendon Press*, Oxford, 1-141 (1992).
- [2]. Griffiths, D. J., "*Elektromagnetik Teori*", Çeviren: Prof. Dr. Basri Ünal, Baran Ofset, Gebze/Kocaeli, 263 (2005).
- [3]. Serway, A. R., "Fen ve Mühendislik için Fizik Modern Fizik ilaveli", Çeviri Editörü, Kemal Çolakoğlu, *Palme Yayıncılık*, Ankara, 855-863 (1996).
- [4]. Turton, R., "*Katıların Fiziği*", Çeviren: Prof. Dr. Yahya Kemal Yoğurtçu, Bizim Büro Basımevi, Ankara, 239 (2007)
- [5]. Akgül, M., *İstatistik Mekaniksel Model Sistemlerde Faz Geçişleri ve Simülasyonlar*, Yüksek Lisans Tezi, Selçuk Üniversitesi, Konya (2007)
- [6]. Huang, K., "Statistical Mechanics", *John Wiley and Sons, Inc.*, 341-398 (1987).
- [7]. Merdan, Z., "Altı Boyutlu Ising Modelin Creutz "Cellular Automaton"ında İncelenmesi", Doktora Tezi, *Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Ankara, 5 (2003).
- [8]. Kalay, M., "Beş Boyutlu Ising Modelin "Creutz Cellular Automaton"ında İncelenmesi", Dr. Tezi, *Gazi Üniv. Fen Bilimleri Enstitüsü*, Ankara
- [9]. Binney, J. J., Dowrick, N. J., Fisher, A. J., and Newman, M. E. J., "The Teory of Critical Phenomena An Introduction to the Renormalization Group", *Oxford University Press*, Oxford, 55 (1992).
- [10]. Privman, V. (Ed.), "Finite-Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems" (*World Scientific*, Singapore, 1990).
- [11]. Landau, D.P., "Finite-Size Behavior of The Ising Square Lattice" *Phys.Rev.B.*, 14:2997-3011 (1976).
- [12]. Hahne, F.J.W., 'Lecture Notes in Physics, Critical Phenomena, *Springer-Verlag*' (1983)
- [13]. Baxter, R. B., "Exactly Solved Modern Statistical Mechanics", *Oxford Uni. Press*, Oxford, 1989
- [14]. Ising, E., "Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus", *Z.Physik* 31:253-258 (1925)
- [15]. Onsager, L., "Crystal Statistics I. A Two-Dimensional Model with an Order Disorder Transition" *Phys. Rev.*, 65:117 (1944).

- [16]. Blume, M., Emery, V.J., Griffiths, R.B., "Ising Model for the λ transition and phase separation in He3-He4 mixtures", *Phys. Rev. A*, 4: 1071-1077 (1971).
- [17]. Rosengren, A., Häggkvist, R., "Rigorous solution of a two-dimensional Blume-Emery-Griffiths model", *Phys.Rev.Lett.* 63: 660-663(1989).
- [18]. Lapinskas, S., Rosengren, A., "Blume-Emery-Griffiths model on three dimensional lattices: Consequences for the antiferromagnetic Potts model", *Phys. Rev. B* 49: 15190-15196 (1994).
- [19]. Shick, M., Shih, W.H., "Spin-1 model of a microemulsion", *Phys. Rev. B* 34: 1797-1801 (1986).
- [20]. Kutlu, B., "The Simulation of 2D Spin-1 Ising Model with the bilinear and positive Biquadratic Interaction on a Cellular Automaton", *Int. J. of Mod. Phys. C*, 10:1305-1320 (2003).
- [21]. Solak, A., Kutlu, B., "The Critical Behavior of the 2D Ising Model with the Bilinear and Positive Biquadratic nearest neighbor interactions on a Cellular Automaton", *Int. J. Mod. Phys. C*, 15:1425-1438 (2004).
- [22]. Kutlu, B., Özkan, A., Seferoğlu, N., Solak, A. and Binal, B., "The Tricritical Behavior of the 3D Blume-Capel Model on a Cellular Automaton", *Int. J. Mod. Phys.C* 16: 933-950 (2005).
- [23]. Özkan, A., Seferoğlu, N. and Kutlu, B., "Critical Exponents of the Three Dimensional Blume-Capel Model on a Cellular Automaton", *Physica A*. 362:327-337 (2006).
- [24]. Seferoğlu, N. and Özkan, A. and Kutlu, B., "Finite Size Effect for the First-Order Phase Transition of the Three Dimensional Blume-Capel Model on a Cellular Automaton", *Chin. Phys. Lett.* 23: 2526-2529 (2006).
- [25]. Seferoğlu, N., Kutlu, B., "Reentrant Phase Transition of the Blume-Emery Griffiths Model for a Simple Cubic Lattice on a Cellular Automaton", *Physica A*. 374: 165-172 (2007).
- [26]. Frenkel, D., Smit, B., "Understanding Molecular Simulation: from Algorithms to Applications", *Academic Press*, 204 (1996).
- [27]. Hermann, D. W., "Computer Simulation Methods in Theoretical Physics", *Springer-Verlag*, (1989).

- [28]. Metropolis, N. , Rosenbluth, A. W. , Rosenbluth, M. N. , Teller, E. , “Equation of State Calculations by Fast Computing Machines”, *J. Chem. Phys.* , 21, 1087 (1953).
- [29]. Creutz, M., “Microcanonical Monte Carlo Simulation, *Phys. Rev. Lett.*, 50, 1411 (1983).
- [30]. Creutz, M., “Deterministic Ising Dynamics”, *Annals of Physics*, 167, 62 (1986).
- [31]. Wolfram, S., “Theory and Applications of Cellular Automaton”, *World Scientific*(1986).
- [32]. Wolfram, S., “Universality and Complexity in Cellular Automata”, *Physica D* 10:1(1984).
- [33]. Wolfram, S., “Statistical Mechanics of Cellular Automaton”, *Rev. Mod. Phys.*, 55:601-642(1983).
- [34]. Vichniac, G.Y., “Simulating Physics with Cellular Automata”, *Physica D* 10: 96-116(1984).
- [35]. Pomeau, Y., “Invariant in Cellular Automata”, *J. Phys.A: Math. Gen.* 17:L415(1984).
- [36]. Herrmann, H.J., “Fast Algorithm for The Simulation of Ising Model”, *J. of Stat. Phys.* 45: 145(1986).
- [37]. Aktekin, N., “The Simulation of the Ising Model on the Creutz Cellular Automaton”, Annual Reviews of Computational Physics VII, edited by D. Stauffer, *World Scientific* ,Singapore, 1-23 (2000).
- [38]. Aktekin, N., “Simulation of the Two-Dimensional Ising Model on the Creutz Cellular Automaton” *Physica A*, 219, 436-446, (1995).
- [39]. Kutlu, B., “İki Boyutlu Ising Modelin Creutz Cellular Automaton’da İncelenmesi”, *Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Ankara, 5 (1996).
- [40]. Kutlu, B., “Critical Behavior of the Two-dimensional Ising Model with Next Nearest Neighbor Antiferromagnetic Interaction on the Creutz Cellular Automaton”, *Physica A* 234: 807-818, (1996).
- [41]. Kutlu, B., “Critical Exponents of the Two-Dimensional Ising Model with Next-Nearest-Neighbor and Four-Spin Interactions on the Creutz Cellular Automaton”, *Physica A*, 243:199-212 (1997).

- [42]. Kutlu B. , Aktekin N., “Critical Slowing Down in Ising Model for Creutz Algoritm”, *Physica A*, 208:423-430(1994).
- [43]. Aktekin N, Dinamical Critical exponent of the three-dimensional Ising model on the Creutz Cellular Automaton, *3rd Gen. Conf. Of the Balk. Phys. Un.*,Romania(Cluj-Napoca)
- [44]. Aktekin, N., “Simulation of the 3-Dimensional Ising Model on the Creutz Cellular Automaton” *Physica A*, 219:436-446 (1995).
- [45]. Özkan, A., “İki-Boyutlu Ising Model İçin Şekil Etkisinin Creutz Cellular Automaton ile İncelenmesi”, *Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Ankara, 5-6 (2001).
- [46]. Aktekin, N., “Simulation of The Four-Dimensional Ising Model on the Creutz Cellular Automaton”, *Physica A*, 232, 397-407 (1996).
- [47]. Aktekin N., Gunen A., Sağlam Z., “A finite-size scaling study of the four-dimensional Ising model on the Creutz cellular automation”, *Int. J. Mod. Phys.C*, 10, 621-633 (1999).
- [48]. Merdan, Z., Boyacıoğlu, B., Günen, A., and Sağlam, Z., “The Simulation of the Four-Dimensional Ising Model on the Creutz Cellular Automaton”, *Bul. of Pure App. Sci.*, 22 (2): 95-100, (2003).
- [49]. Merdan Z, Gunen A, Mulazimoglu G., “Effect of the number of energy levels of a demon for the simulation of the four-dimensional Ising model on the Creutz cellular automaton”, : *Int. J. Mod. Phys. C*, 16, 1269-1278 (2005)
- [50]. Mülazımoğlu, G., Duran, A., Merdan Z. and Günen A., “The effect of the increase of linear dimensions on exponents obtained by finite-size scaling relations for the four-dimensional Ising model on the creutz cellular automaton” *Mod. Phy. Lett. B*, 22, 1329-1341 (2008).
- [51]. Aktekin, N., “ Simulation of the Four Dimensional Ising Model on the Cellular Automaton” *Physica A*, 232: 397-407 (1996).
- [52]. Aktekin, N., “The finite-size scaling relation for the order-parameter probabiliti distribution of the four-dimensional Ising model”*G.Ü Fen Bil. Der.*, 17(3):59-70 (2004).
- [53]. Merdan, Z., Gunen A., Cavdar S., “Dynamical finite-size scaling function of the four dimensional Ising model for Creutz algorithm” *Phy. A-Stat. Mec. Its App*, 359:415-422 (2006).

- [54]. Aktekin N., Erkoc S., Kalay M., “The test of the finite-size scaling relations for the five-dimensional Ising model on the Creutz cellular automaton” *Int. J. Of Mod. Phy. C* ,10:1237-1245 (1999).
- [55]. Kalay, M., Merdan Z “The finite-size scaling study of the specific heat and the binder parameter for the five-dimensional Ising model” *Mod. Phy. Lett. B*, 21: 1923-1931(2007).
- [56]. Merdan Z, Duran A, Atille D, Mülazimoglu G. and Günen A., “The test of the finite-size scaling relations of the Ising models in seven and eight dimensions on the Creutz cellular automaton”: *Physica A*, 366:265-272 (2006).
- [57]. Aktekin N “Simulation of the eight-dimensional Ising model on the Creutz cellular automaton” *Int. J. Of Mod. Phy. C*, 8:287-292 (1997)
- [58]. Aktekin, N., Erkoc S, Kalay M “The test of the finite-size scaling relation for the five-dimensional Ising model on the Creutz cellular automaton” *Int. J. Of Mod. Phy. C*,10:1237-1245 (1999)
- [59]. Aktekin, N., Erkoc S “The test of the finite-size scaling relations for the six dimensional Ising model on the Creutz cellular automaton”, *Physica A*, 284: 206 214 (2000).
- [60]. Privman, V. and Fisher, M. E., *Phys. Rev. B* **30**:322 (1984); Privman, V., in Finite-Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems, *World Scientific*, Singapore, 1–98 (1990).
- [61]. Binder, K., Nauenberg, M., Privman, V., and Young, A. P., “Finite-Size Tests Of Hyperscaling” *Phys. Rev. B* **31**:1498 (1985).
- [62]. Rickwardt, Ch., Nielaba, P., and Binder, K., “A Finite-Size-Scaling Study Of The 5-Dimensional Ising-Model” *Ann. Phys. (Leipzig)* 3:483 (1994);
- [63]. Mon, K. K., “Finite-size scaling of the 5D Ising model” *Europhys. Lett.* 4:399(1996);
- [64]. Blöte, H. W. J., and Luijten, E., “Universality And The Five-Dimensional Ising Model” *Europhys. Lett.* 38:565 (1997);
- [65]. Cheon, M., Chang, I., and Stauffer, D., “Monte Carlo investigation of three-exponent in the 5D Ising modell” *Int. J. Mod. Phys. C*. 10:131 (1999);
- [66]. Singh, S., and Pathria, R. K., Finite-Size Scaling Of O(N) Models In Higher Dimensions” *Phys. Rev. B* 38:2740 (1988).
- [67]. Binder, K., “Finite-size scaling analysis of Ising model block distribution functions” *Phys. Rev. Lett.* 47:693 (1981).

- [68]. Kenna, R., and Lang, C. B., “Renormalization-Group Analysis Of Finite-Size Scaling In The $\Phi(4)_4$ Model” *Nucl. Phys. B* 393:461 (1993).
- [69]. Brezin, E., “Finite Size Effects In Phase-Transitions” *J. Phys. (Paris)* 43:15 (1982).
- [70]. Singh, S., and Pathria, R. K., “Exact Results For A Finite-Sized Spherical Model Of Ferromagnetism At The Borderline Dimensionality-4” *Phys. Rev. B* 45:9759 (1992).
- [71]. Luijten, E., and H. Blöte, W. J., “Classical critical behavior of spin models with long-range interactions” *Phys. Rev. B* 56:8945 (1997).
- [72]. Shapiro, J., and Rudnick, J., “The Fully Finite Spherical Model” *J. Stat. Phys.* 43:51 (1986).
- [73]. Challa, M.s.s., Landau, D.P., Binder, K., “Finite Size effects at temperature driven first order transitions”, *Phys. Rev. B* 34: 1841-1852(1984).
- [74]. Binder, K., Landau, D.P., “Finite-size scaling at first order phase transitions”, *Phys. Rev. B* 30: 1477-1485(1984).
- [75]. Merdan, Z., Bayirli M “The effect of the increase of linear dimensions on exponents obtained by finite-size scaling relations for the six-dimensional Ising model on the Creutz cellular automaton” *App. Math. Comp.*, 167: 212-224 (2005).
- [76]. Merdan, Z., N. Aktekin, “The Simulation of the Six-Dimensional Ising Model on the Creutz Cellular Automaton” , *Balkan Phys. Lett.*, 10, 95-101 (2002).
- [77]. Merdan, Z., Erdem R “The finite-size scaling study of the specific heat and the Binder parameter for the six-dimensional Ising model”, *Phy. Lett. A*, 330: 403-407 (2004).
- [78]. Aktekin, N., “The finite-size scaling functions of the four-dimensional Ising model” *J. Of Stat. Phys.*, 104:1397-1406 (2001).
- [79]. Aktekin, N., “Effect of the number of energy levels of a demon on the simulation of the Ising models in five to seven dimensions on the Creutz cellular automaton”, *Int. J. Of Mod. Phys. C*, 10:621-633 (1999).
- [80]. Merdan, Z., Atille, D., “The finite-size scaling study of the specific heat and the binder parameter for the 7-dimensional Ising model” *Mod. Phys. Lett. B*, 21:215-224 (2007).

- [81]. Merdan, Z., Atille, D., “The effect of the number of simulations on the exponents obtained by finite-size scaling relations for the seven-dimensional Ising model on the Creutz cellular automaton” *Phys. A-Stat. Mech Its App.*, 376:327-336 (2007).
- [82]. N.W.Dalton and D.W.Wood, *J. Math. Phys.* **10.**,127 (1969)
- [83]. Binder, K., “Finite-size scaling analysis of Ising model block distribution functions”, *Z. Phys. B*, 43: 119-140 (1981).
- [84]. Binder, K., “Critical properties from Monte Carlo coarse graining and renormalization”, *Phys. Rev. Lett.*, 47:696 (1981).
- [85]. Bruce, A.D., “Probability density functions for collective coordinates in Ising-like systems”, *J. Phys. C*, 14:3688 (1981).
- [86]. Binder, K., Nauenberg, M., Privman, V. and Young, A.P., “Finite-size tests of hyperscaling”, *Phys. Rev. B*, 31:1502 (1985).
- [87]. Brezin, E. and Zinn-Justin, J., “Finite-size effects in phase transitions”, *Nucl. Phys. B*, 257: 867- 893 (1985).
- [88]. Luijten, E., Binder, K. and Blöte H.W.J., “Finite-size scaling above the upper critical dimension revisited: The case of the five-dimensional Ising model”, *Eur. Phys. J B*, 9: 289-297 (1999).
- [89]. Rudnick, J., Guo, H. and Jasnow, D., “Finite-size scaling and the renormalization group”, *J. Stat. Phys.*, 41: 353-373(1985).
- [90]. Binder, K., “Some recent progress in the phenomenological theory of finite size scaling and Application to Monte Carlo studies of critical phenomena”, in *Finite-Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems*, edited by V. Privman, *World Scientific*, Singapore,173-221 (1990).
- [91]. Jasnow, D., “Finite-size scaling, hyperscaling and the renormalization group”, in *Finite-Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems*, edited by V. Privman, *World Scientific*, Singapore, 99-140 (1990).
- [92]. Bruce, A.D., “Universality in the two-dimensional continuous spin model”, *J. Phys. A*,18: 873- 877 (1985).
- [93]. Nicolaidis, D. and Bruce, A.D., “Universal configurational structure in two dimensional scalar models”, *J. Phys. A*,21: 233-244 (1988).
- [94]. Bruce, A.D. and Wilding, N.B., “Scaling fields and universality of the liquid gas critical point”, *Phys. Rev. Lett.*, 68:193-196 (1992).

- [95]. Parisi, G. and Ruiz-Lorenzo, J.J., “Scaling above the upper critical dimension in Ising models”, *Phys. Rev. B*, 54:3698-3701 (1996).
- [96]. Lai, P.-Y. and Mon, K.K., “Finite-size scaling of the Ising model in four dimensions”, *Phys. Rev. B*, 41: 9257-9263(1990).
- [97]. Stauffer, D. and Adler, J., ‘Logarithmic factors, critical temperature, and zero temperature flipping in the 4D kinetic Ising model’, *Int. J. Mod. Phys. C*, 8: 263-267 (1997)
- [98]. Kenna, R. and Lang, C.B., ‘Renormalization group analysis of finite-size scaling in the ϕ^4 model’, *Nucl. Phys. B*, 393: 461-479 (1993).
- [99]. Kutlu, B., Çivi, M., ‘Critical finite size scaling relation of the order-parameter probability distribution for the tree-dimensional Ising model on the Creutz cellular automaton’, *Chin. Phys. Lett.*, 10:2670 (2006)
- [100]. Tsypin, M.M. and Blöte, H.W.J., ‘Probability distribution of the order parameter for the three-dimensional Ising model Universality class: A high precision Monte Carlo study’, *Phys. Rev. E*, 62: 73-76 (2000).