

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

**DÖRT BOYUTLU ISING MODELİN  $L=24, 26, 28$**   
**ÖRGÜLERİNDE CREUTZ CELLULAR AUTOMATON**  
**İLE SİMÜLASYONU**

**Fatih YALÇIN**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**  
**FİZİK ANABİLİM DALI**

**KIRŞEHİR**

**HAZİRAN 2016**

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

**DÖRT BOYUTLU ISING MODELİN  $L=24, 26, 28$**   
**ÖRGÜLERİNDE CREUTZ CELLULAR AUTOMATON**  
**İLE SİMÜLASYONU**

**Fatih YALÇIN**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**  
**FİZİK ANABİLİM DALI**

**DANIŞMAN**  
**Yrd. Doç. Dr. Ganimet MÜLAZIMOĞLU KIZILIRMAK**

**KIRŞEHİR**

**HAZİRAN 2016**

## **Fen bilimleri Enstitüsü Müdürlüğüne**

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

Başkan

Prof. Dr. Ziya MERDAN

Üye

Doç. Dr. Hülya ÖZTÜRK

Üye

Yrd. Doç. Dr. Ganimet MÜLAZIMOĞLU KIZILIRMAK

Onay

Yukarıdaki imzaların adı geçen öğretim üyelerine ait olduğunu onaylarım.

.../.../2016

İmza

Prof. Dr. Levent KULA  
Enstitü Müdürü

## **TEZ BİLDİRİMİ**

Tez içindeki bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edilerek sunulduğunu, ayrıca tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada bana ait olmayan her türlü ifade ve bilginin kaynağına eksiksiz atıf yapıldığını bildiririm.

Fatih YALÇIN

# DÖRT BOYUTLU ISING MODELİN YÜKSEK BOYUTLU ÖRGÜLERİNDE CREUTZ CELLULAR AUTOMATON İLE SİMÜLASYONU

(Yüksek Lisans Tezi)

**Fatih YALÇIN**

**AHI EVRAN ÜNİVERSİTESİ**  
**FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**Haziran 2016**

## ÖZET

En yakın komşu etkileşmeli dört boyutlu Ising modelin doğrusal boyutu  $L=24, 26, 28$  olan periyodik sınır şartlı örgülerde ve sonsuz örgü kritik sıcaklığı yakınında kinetik enerji değişkeni kullanılarak Creutz "cellular automaton"ında simülasyonları yapılmıştır. Sonsuz örgü kritik sıcaklık değerleri ( $T_c$ ), düzen parametresi ( $M$ ), manyetik alınganlık ( $\chi$ ) ve özısı ( $C$ ) değerleri simülasyon sonuçlarından elde edilmiştir ve statik kritik üsler hesaplanmıştır.

**Anahtar kelimeler:** Ising Model, Cellular Automaton, Kritik Sıcaklık, Manyetik Alınganlık, Öz ısı

Sayfa Adedi : 51

Tez Yöneticisi: Yrd. Doç. Dr. Ganimet MÜLAZIMOĞLU KIZILIRMAK

**SIMULATION OF FOUR-DIMENSIONAL ISING MODEL  $L = 24, 26, 28$   
LATTICES USING CREUTZ CELLULAR AUTOMATON**

**(M. Sc. Thesis)**

**Fatih YALÇIN**

**AHI EVRAN UNIVERSITY**

**GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCES**

**JUNE 2016**

**ABSTRACT**

The four dimensional Ising model with nearest-neighbor pair interactions is simulated on the Creutz "cellular automaton" by using kinetic energy variable near the infinite lattice critical temperatures with the linear dimensions  $L = 24, 26, 28$  periodic boundary conditions. Infinite lattice critical temperatures ( $T_c$ ), the order parameter ( $M$ ), magnetic susceptibility ( $\chi$ ) and specific heat ( $C$ ) values are obtained from the results of simulations and the static critical exponents were calculated.

**Key words:** Ising Model, Cellular Automaton, Critical Temperature, Magnetic Susceptibility, Specific Heat

Number of Pages : 51

Adviser of Thesis : Yrd. Doç. Dr. Ganimet MÜLAZIMOĞLU KIZILIRMAK

## TEŐEKKÜR

Çalıőmalarım boyunca deęerli yardım ve katkılarıyla beni yönlendiren hocam Yrd. Doç. Dr. Ganimet MÜLAZIMOĐLU KIZILIRMAK' a yine kıymetli tecrübelerinden faydalandığım Doç. Dr. Hülya ÖZTÜRK hocama, teşekkürü bir borç bilirim.

## İÇİNDEKİLER

|   | Sayfa |
|---|-------|
| ÖZET.....   | i     |
| ABSTRACT .....  | ii    |
| TEŞEKKÜR.....   | iii   |
| İÇİNDEKİLER .....   | iv    |
| TABLolar DİZİNİ .....   | vi    |
| ŞEKİLLER DİZİNİ.....  | vi    |
| SİMGELER VE KISALTMALAR.....  | ix    |
| 1. GİRİŞ.....   | 1     |
| 2. TEORİ.....   | 6     |
| 2.1. Faz Geçişi .....   | 6     |
| 2.2. Evrensel Davranış.....   | 8     |
| 2.3. Düzen Parametresi.....   | 9     |
| 2.4. Kritik Üsler.....  | 9     |
| 2.5. Ising modeli .....   | 12    |
| 2.6. Dört Boyutlu Ising Modeli .....  | 14    |
| 2.7. Serbest Enerji, İç enerji ve Öz ısı .....  | 14    |
| 2.8. Kendiliğinden Mıknatıslanma, Manyetik Alınganlık ve Özısı'nın Sıcaklık Bağımlılıkları..... | 16    |
| 3. ISING MODELİN SİMÜLASYONU İÇİN ALGORİTMALAR .....  | 18    |
| 3.1. Metropolis Algoritması .....   | 19    |
| 3.2. Swendsen-Wang Algoritması.....   | 20    |
| 3.3. Wolff Algoritması .....  | 21    |
| 3.4. Creutz'un Gezgin " Demon " Algoritması.....  | 22    |
| 3.5. "Cellular Automaton" lar.....  | 23    |
| 3.5.1. Q2R "Cellular Automaton" 1.....  | 23    |



|  | Sayfa |
|--|-------|
| 3.5.2. Creutz "Cellular Automaton" ı .....   | 24    |
| 3.5.3. Creutz cellular automatonda termodinamik niceliklerin hesabı .....            | 25    |
| 4. BULGULAR VE SONUÇ.....  | 27    |
| 4.1. Termodinamik Niceliklerin Sıcaklıkla Değişimleri .....                          | 27    |
| 4.1.1. Kendiliğinden Manyetizasyon .....   | 27    |
| 4.1.2. Manyetik Alınganlık .....   | 29    |
| 4.1.3. Özısı .....   | 30    |
| 4.2. Statik Kritik Üsler Olan $\beta, \beta', \gamma, \gamma'$ Hesabı .....          | 34    |
| 4.2.1. Manyetik Alınganlık Kritik üssü $\gamma$ ve $\gamma'$ .....                   | 39    |
| 4.3. Sonlu Örgü Sıcaklık Değerinden Sonsuz Örgü Sıcaklık Değerinin Belirlenmesi..... | 43    |
| 5. SONUÇ.....  | 47    |
| KAYNAKLAR .....  | 48    |

## TABLolar DİZİNİ

| <b><u>Tablo</u></b>  | <b><u>Sayfa</u></b> |
|--|---------------------|
| Tablo 1.1. Yaygın olarak bilinen ferromıknatısların $T_c$ (Kritik sıcaklık) değerleri ..... 1  |                     |
| Tablo 4.1. $L=24, 26, 28$ örgü boyutlarının simülasyon çalışmasında elde edilen manyetik alınganlık maksimumlarındaki kritik sıcaklık değerleri $T_c^x(L)$ ve özısı maksimumlarından elde edilen kritik sıcaklık değerleri $T_c^C(L)$ ..... 32 |                     |
| Tablo 4.2. $L=24, 26, 28$ periyodik sınır şartlı örgü boyutlarının simülasyon çalışmaları sonucu hesaplana düzen parametresinin kritik üsleri $(\beta, \beta')$ ..... 39   |                     |
| Tablo 4.3. $L=24, 26, 28$ periyodik sınır şartlı örgü boyutlarının simülasyon çalışmasında elde edilen düzen parametresinin kritik üsleri $(\gamma, \gamma')$ ..... 43   |                     |

## ŞEKİLLER DİZİNİ

| <u>Sekil</u>  | <u>Sayfa</u> |
|---|--------------|
| Şekil 2.1. $H=0$ da kendiliğinden manyetizasyon M-T grafiği.....  | 12           |
| Şekil 2.2.d=1,2,3 ve dört boyutlu örgülerin geometrik yapıları ve izdüşümleri. ....                               | 13           |
| Şekil 2.3. İki boyutlu Kare örgü için en yakın spinler .....  | 13           |
| Şekil 2.4. Özısı parametresi düz olarak artarken kritik sıcaklığın sağında ve solunda ani bir hızla yükselir..... | 16           |
| Şekil 4.1. Kendiliğinden mıknatıslanma (M)'nın sıcaklık (T) ile değişimi ( $L=24$ )..                             | 28           |
| Şekil 4.2. Kendiliğinden mıknatıslanma (M)'nın sıcaklık (T) ile değişimi ( $L=26$ )..                             | 28           |
| Şekil 4.3. Kendiliğinden mıknatıslanma (M)'nın sıcaklık (T) ile değişimi ( $L=28$ )..                             | 29           |
| Şekil 4.4. Manyetik alınganlık ( $\chi$ )'ın sıcaklık (T) ile değişimi ( $L=24$ ) .....                           | 29           |
| Şekil 4.5. Manyetik alınganlık ( $\chi$ )'ın sıcaklık (T) ile değişimi .( $L=26$ ) .....                          | 30           |
| Şekil 4.6. Manyetik alınganlık ( $\chi$ )'ın sıcaklık (T) ile değişimi .( $L=28$ ) .....                          | 30           |
| Şekil 4.7. Özısı (C)'nın sıcaklık (T) ile değişimi .( $L=24$ ).....   | 31           |
| Şekil 4.8. Özısı (C)'nın sıcaklık (T) ile değişimi .( $L=26$ ).....   | 31           |
| Şekil 4.9. Özısı (C)'nın sıcaklık (T) ile değişimi .( $L=28$ ).....   | 32           |
| Şekil 4.10. $L=24, 26, 28$ örgüleri için kendiliğinden mıknatıslanma (M)'nın sıcaklık (T) ile değişimi.....       | 33           |
| Şekil 4.11. $L=24, 26, 28$ örgüleri için özısı (C)'nın sıcaklık (T) ile değişimi .....                            | 34           |
| Şekil 4.12. $L=24, 26, 28$ örgüleri için manyetik alınganlık ( $\chi$ )'ın sıcaklık (T) ile değişimi .....        | 34           |

| <u>Sekil</u>  | <u>Sayfa</u> |
|---|--------------|
| Şekil 4.13. L=24 örgü boyutunda $\log M$ 'nin $\log \epsilon$ karşı grafiği.....  | 35           |
| Şekil 4.14. L=26 örgü boyutunda $\log M$ 'nin $\log \epsilon$ karşı grafiği.....  | 36           |
| Şekil 4.15. L=28 örgü boyutunda $\log M$ 'nin $\log \epsilon$ karşı grafiği.....  | 36           |
| Şekil 4.16. L=24 örgü boyutunda $\log(M/\log \epsilon^{1/3}) - \log \epsilon$ grafiği .....   | 37           |
| Şekil 4.17. L=26 örgü boyutunda $\log(M/\log \epsilon^{1/3}) - \log \epsilon$ grafiği .....   | 37           |
| Şekil 4.18. L=28 örgü boyutunda $\log(M/\log \epsilon^{1/3}) - \log \epsilon$ grafiği .....   | 38           |
| Şekil 4.19. L=24 örgü boyutunda $\text{Log } \chi$ - $\text{Log } \epsilon$ karşı grafiği .....   | 40           |
| Şekil 4.20. L=26 örgü boyutunda $\text{Log } \chi$ - $\text{Log } \epsilon$ karşı grafiği .....   | 40           |
| Şekil 4.21. L=28 örgü boyutunda $\text{Log } \chi$ - $\text{Log } \epsilon$ karşı grafiği .....   | 41           |
| Şekil 4.22. L=24 örgü boyutunda $\log(\chi/\log \epsilon^{1/3}) - \log \epsilon$ karşı grafiği.....                                     | 41           |
| Şekil 4.23. L=26 örgü boyutunda $\log(\chi/\log \epsilon^{1/3}) - \log \epsilon$ karşı grafiği.....                                     | 42           |
| Şekil 4.24. L=28 örgü boyutunda $\log(\chi/\log \epsilon^{1/3}) - \log \epsilon$ karşı grafiği.....                                     | 42           |
| Şekil 4.25. Sonlu örgülerin manyetik alınganlık kritik sıcaklığı $T_c^\chi(L)$ 'ye karşı $L - 1/\nu$ ( $\nu=1/2$ ) grafiği.....         | 44           |
| Şekil 4.26. Sonlu örgülerin özısı kritik sıcaklığı $T_c^C(L)$ 'ye karşı $L - 1/\nu$ ( $\nu=1/2$ ) grafiği .....                         | 45           |
| Şekil 4.27. Sonlu örgülerin özısı kritik sıcaklığı $T_c^C(L)$ ' ye karşı $L - 1/\nu - L - 1/\nu \log - 1/6L$ ( $\nu=1/2$ ) grafiği..... | 45           |
| Şekil 4.28. L=24, L=26, L=28 Sonlu örgülerinde Binder parametresi $g_L$ 'nin sıcaklık grafiği .....                                     | 46           |

## SİMGELER VE KISALTMALAR

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

| <b>Simgeler</b>                        | <b>Açıklama</b>                   |
|--|-----------------------------------|
| <b>T</b>                               | Sıcaklık                          |
| <b>T<sub>c</sub></b>                   | Kritik Sıcaklık                   |
| <b>d</b>                               | Uzay Boyutu                       |
| <b>M</b>                               | Manyetizasyon (Düzen parametresi) |
| <b><math>\beta, \bar{\beta}</math></b> | Manyetizasyon Kritik Üssü         |
| <b><math>\chi</math></b>               | Manyetik Alınganlık               |
| <b><math>\gamma, \gamma'</math></b>    | Manyetik Alınganlık Kritik Üssü   |
| <b>C</b>                               | Özısı                             |
| <b>v</b>                               | Korelasyon Uzunluğu Kritik Üssü   |
| <b>t</b>                               | İndirgenmiş Sıcaklık              |
| <b><math>\infty</math></b>             | Sonsuz                            |
| <b>k<sub>B</sub></b>                   | Boltzmann Sabiti                  |

| <b>Kısaltmalar</b> | <b>Açıklama</b>           |
|--------------------|---------------------------|
| <b>BEG</b>         | Blume Emery Griffiths     |
| <b>CA</b>          | Cellular Automaton        |
| <b>CCA</b>         | Creutz Cellular Automaton |
| <b>MC</b>          | Monte Carlo               |

## 1. GİRİŞ

Evrendeki sistemlerin bazıları belirli şartlar altında faz geçişine sahip olurlar. Genel olarak maddenin belirli bir durumundan parçacıklar arası ani etkileşim sonucu başka bir durumuna geçmesine faz geçişi denir.[1]. Günlük yaşantımızdaki en sık rastladığımız suyun faz değiştirmesidir. Ancak bunun dışında faz geçişine birçok örnek verebiliriz. Örneğin Demir (Fe), Kobalt (Co), Nikel (Ni) gibi manyetik özelliği olan maddeler Curie sıcaklığı olarak bilinen  $T_c$  kritik sıcaklığın altında mikroskobik bir manyetik alan oluşturacak şekilde aynı doğrultuya kendiliğinden kutulayarak ferromanyetik özellik gösterirken kritik sıcaklığın üstünde aniden paramanyetik özellik gösterir.

Tablo 1.1. Yaygın olarak bilinen ferromıknatısların  $T_c$  (Kritik sıcaklık) değerleri

| Materyal | Kritik Sıcaklık ( $T_c$ ) |
|----------|---------------------------|
| Fe       | 1043                      |
| Ni       | 1394                      |
| Co       | 631                       |

Manyetik maddenin bir fazda sahip olduğu manyetizasyon, duygunluk gibi bazı fiziksel özellikleri değiştirmesine manyetik faz geçişi adı verilir[2]. Manyetik faz geçişi maddenin mıknatıslanmasındaki değişimine dayanmaktadır. Mıknatıslanmanın (M) sebebi tanımlanmamış yörüngelerdeki çiftlenmemiş elektron spininden kaynaklanmaktadır. Herhangi bir maddenin ölçülen manyetik dipol momentinin, maddenin hacmine oranı maddenin mıknatıslanması olarak tanımlanır. Dipol momentler elektronların hem yörünge hareketlerinden hem de spin denen iç özelliklerinden kaynaklanmaktadır. Manyetik sistemler, paramanyetik, diyamanyetik ve ferromanyetik olmak üzere üç gruba ayrılır[3].

Paramanyetik maddeler (Al, O<sub>2</sub>, Fe, v.s) kalıcı (sürekli) manyetik dipol momente sahip atomlardan oluşmaktadır. Bu moleküller herhangi bir manyetik alana maruz kalmıyorsa manyetik momentleri geliş güzel yönlerde sıralanır ve mıknatıslanma vektörel olarak sıfır olur. Sürekli manyetik dipol momente sahip atomların varlığından dolayı paramanyetik maddeler pozitif fakat küçük bir manyetik

alınanlığa sahiptir. Uygulanan manyetik alan kaldırılırsa mıknatıslanma tekrar sıfır olur.

Diyamanyetik maddeler, dış manyetik alanın yönü ne olursa olsun manyetik alana zıt yönlü mıknatıslanma elde edilir ve manyetik alanın daha zayıf olduğu yöne doğru yönelirler[4].

Ferromanyetik maddeler ise zayıf bir dış alanda dahi birbirine paralel olarak yönelmeye çalışan manyetik momentlere sahiptir. Manyetik momentler paralel şeklini aldıktan sonra dış alan ortamdaki kaldırılırsa bile mıknatıslanmış olarak kalır. Ferromanyetik maddelere etkiyen çekme kuvveti oldukça büyüktür. Bu özellik sürekli mıknatısların yapımında kullanılır[5].

Ferromanyetik maddelerin mıknatıslanmasında sıcaklık bir etkidir. Sıcaklık mutlak sıfıra ulaştığında spinlerin hepsi aynı yöndedir ve sistem en düşük enerji durumundadır. Sistem ferromanyektir ve sıcaklık parametresini yükseltmeye başladığımızda spinler rastgele yönelmeye başlar. Yani maddenin mıknatıslanması azalarak kritik sıcaklık noktası olarak bilinen Curie sıcaklığında sıfır olur. Kritik sıcaklığın üzerine çıktığı vakit ( $T > T_c$ ) spinler rastgele sıralandıklarından dolayı madde paramanyetik özellik gösterir. Bu durumda sıcaklıktan kaynaklanan spin hareketleri, komşu atomlar arası etkileşimlerden ileri gelen kuvvetleri yenecek kadar büyür[6]. Bu tez çalışmasında manyetik faz geçişleri ve faz geçişleri için en iyi istatistik modellerinden biri olan Ising model kullanılmıştır.

Ising model, analitik çözümü 1925 yılında E. Ising tarafından bir boyutlu uzayda Spin1/2 Ising modelinin pozitif bir T sıcaklık değerinde faz geçişi yapmadığı öngörülmüştür[7]. Daha sonraları yapılan çalışmalar neticesinde  $T=0^0K$  ve kritik nokta olarak düşünülen bir noktada faz geçişine sahip olduğu anlaşılmıştır. 1971 yılında üç durumlu ve iki düzen parametrelili bir sistem olan Spin-1 Ising modelinde Blume Emery ve Griffiths tarafından tanımlanmıştır. Ising modelin ferromanyetik faz geçişi kısaca spin1/2 Ising modeli olarak temsil edilmektedir. Bu model iki durumlu ve tek düzen parametrelidir[8-17]. Bu tez çalışmasında spin 1/2 Ising model kullanılmıştır. Analitik çözümü sadece Spin1/2 Ising modelin bir - iki boyutlu uzayda ve dış manyetik alan yokluğunda mevcut olup üst boyutlarda henüz analitik çözümü yapılamamıştır.

Tam çözümleri açıklanamayan problemlerin çözümünde istatistiksel olarak yapılan yaklaşımlarla çözümleri mümkün olacaktır. Bu sebepten dolayı istatistiksel sistemlerin sayısal simülasyon çalışmaları oldukça önem kazanmaktadır[18-19].

Simülasyonu kısaca tanımı, gerçek bir sistemin modelini tasarlama aşaması ve sistemin işlenmesi için sistemin davranışını kavramak veya değişik görüşleri değerlendirmek amacıyla bu model üzerinde deneme çalışması yapmaktır. İstatistik mekanikte çözümleri net yapılamayan bazı problemlere yaklaşık çözümler getirmek mümkün olabilir. Fiziksel ortamlarda yapılan deneylerde yaşanan bir çok problemi ortadan kaldırması açısından simülasyon çalışmaları önemlidir. Fiziksel olayların simülasyon çalışmaları sayesinde sistemlerin incelenmesinde, model kurulmasında, model gelişiminin sağlanmasında, sonuçların elde edilmesinde ve bu sonuçların değerlendirilip yorumlanmasında teorik çalışmaların alt yapısını oluşturur. Düzensizlik, manyetik faz geçişi ve kritik nokta civarında termodinamik niceliklerin davranışları istatistiksel mekanik olarak birçok teorik ve sayısal modelle uzun yıllardır araştırma yapılmaktadır ve birçok model tanımlanmıştır. Bu modeller; Ising model, Pottsmodeli, Küresel model, Örgü gazı modeli, Percolation modeli ve X-Y ve Heisenberg modelidir.

İstatistiksel sistemlerde sayısal simülasyon, faz geçişi ve kritik olay en temel araçlardır. Sayısal simülasyonda kullanılan Monte Carlo ve Molekül Dinamiği İstatistiksel sistemler faz geçişi ve kritik olay çalışmalarında kullanılmaktadır. Monte Carlo yaklaşımı, rastgele sayı üretici olarak kullanılır. Başlangıçta genel olarak tüm spinlerin yönü aynı yöndedir. Bu tür algoritmalarda sıcaklık parametresi önceden belirlenir ve giriş değişkeni olarak kullanılmakta ve sabit sıcaklık değerinde tüm spinler tek tek durumlarını değiştirme teşebbüsünde bulunmaktadır[20].

Başka bir yöntem olarak bilinen Molekül dinamiği yöntemi, Monte Carlo yönteminin bir alternatifi olarak düşünülebilir. Kullanılan metot çok parçacıklı sistemlerin dinamik özelliklerini incelemeye kullanılır. Zamana bağlı olarak atom veya moleküllerin konum, hız veya yönelim parametrelerinin nasıl değiştiği bulunur. Sonuç olarak, Molekül dinamiği yöntemi katı ve sıvıların molekül yapılarını, enerji hareketlerini ve "bulk"(parçacıklarının sayısının sonsuz olduğu durum) gibi özelliklerin detaylı bir şekilde incelenmesine imkân tanır.



En çok tercih edilen ve kullanılan yöntemlerden biride, Markov algoritmasıdır. İlk olarak 1953 yılında Metropolis ve arkadaşları tarafından kullanılmıştır. Bir diğer Molekül dinamiği arasında yer alan simülasyon yöntemi de 1983'de M. Creutz tarafından geliştirilmiştir. Bu yöntem gezgin demon modeli olarak adlandırılır. 1986'da M. Creutz iki boyutlu uzayda Ising modelinin belirli bir kurala bağlı kalarak bir "Cellular Automaton(CA) kuralıyla simüle edilmiştir. "Cellular Automaton" (CA) ilk olarak Neuman ve Ulam tarafından biyolojik sistemlerde simülasyon için kullanılmıştır. "Cellular Automaton"(CA) 0 veya 1 değerleri alabilen bir hücre veya örgü noktaları satırından oluşur. Belirtilen bu değerler belirli bir kural içerisinde kesikli zaman adımlarında tekrarlar ve hücreleri herhangi bir boyutta düzenli bir örgü üzerinde sıralanabilir. Bu model ilk olarak 1983 yılında Wolfram tarafından temelleri atılmıştır. Birçok alanda dinamik sistemleri için pek çok uygulama vardır[21-28].

Fizik problemlerinin ve Ising modelin bir " Cellular Automaton"(CA) simülasyonu Vichniac tarafından önerilmiştir. İki farklı CA cellular automaton Ising model simülasyonunda kullanılır. Bunlar; Q2R algoritması ve Creutz tarafından ileri sürülen cellular automaton dur. Q2R algoritmasında simülasyon sırasında iç enerjinin sabit kaldığı konfigürasyonlar ortaya çıkmakta ve bunun neticesinde öz ısı hesaplanamamaktadır. Q2R algoritmasında ortaya çıkan bu sorunu iç enerji dalgalanmalarının dikkate alındığı Cellular Automaton (CA) simülasyonunda sorun olarak ortadan kaldırmaktadır. 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 ve daha yüksek boyutlu Ising modelin analitik çözümü mümkün olmamıştır[29-33].

Bu tez çalışmasında dört boyutlu Ising modeli için, doğrusal boyutu  $L=24,26,28$  olan periyodik sınır şartlı örgülerde ve sonsuz örgü kritik sıcaklığı yakınında kinetik enerji bitleri yerine kinetik enerji değişkeni kullanılarak Creutz Cellular Automaton ile simülasyon yapılmıştır. Kinetik enerji değişkeni kullanılarak Creutz Cellular Automaton algoritması ile  $L=24,26,28$  örgülerinde yapılan simülasyon sonuçlarında enerji giriş değişkeni olarak kullanılmış ve sıcaklık, manyetizasyon, manyetik alınganlık, özısı ve Binder parametresi gibi termodinamik nicelikler yapılan simülasyon sonuçlarından elde edilmiştir. Sonlu örgü ölçekleme

bağlantıları kullanılarak, sonsuz örgü kritik sıcaklık değerleri, manyetizasyon, manyetik alınganlık ve özısı için kritik üstler elde edilmiştir.

## 2. TEORİ

### 2.1. Faz Geçişi

Ehrenfest meşhur faz geçişlerini n. dereceden faz geçişleri şeklinde sınıflandırmıştır. Faz geçişinde serbest enerji veya uygun bir termodinamik potansiyelin bileşenlerinden birinin n. türevinde süreksizlik görülür. Tabii ki o zamanlar örneğin öz ısı gibi birçok termodinamik niceliğin ikinci derece geçişlerde Ehrenfest'in iddia ettiği gibi süreksizlik değil, aslında ıraksama gösterdiği bilinmiyordu. Üstelik 2. derecenin üzerinde faz geçişleri olduğuna dair deneysel bir kanıt da yoktu. Faz geçişlerinin sınıflandırılmasında Fisher'in teklif ettiği yöntem daha kullanışlıdır. Buna göre faz geçişi, serbest enerjinin birinci türevleri sürekli ise sürekli faz geçişi, en az bir tanesi süreksiz ise birinci dereceden faz geçişi, birinci türevinin sürekli ikinci türevi süreksiz ise ikinci dereceden faz geçişi olarak nitelendirilir.

Gizli ısı içeren faz geçişleri birinci derecedendir. Bir madde yüksek sıcaklıktaki bir fazdan düşük sıcaklıktaki bir faza birinci dereceden faz geçişini şu şekilde yapar: Geçiş sıcaklığı denilen bir T sıcaklığı civarında sıcaklığın küçük aralıklarından geçerek soğurken sıfırdan farklı bir ısıyı dışarı verir. Geçişteki bu ısı yayımı maddenin yapısında T sıcaklığında köklü bir yeniden düzenlenme olduğunu gösterir. Örneğin su-buz geçişi gizli ısı düzensiz ve çözülme sıklıklarında başboş gezinmektense H<sub>2</sub>O molekülleri kendini fcc (yüzey merkezli kübik örgü) yapısına dönüştürürken dışarı verir[34].

Birinci dereceden faz geçişine örnek vermek gerekirse,  $T_c = 1043^0$  K Curie sıcaklığında (Kritik Sıcaklığında) demirin paramanyetik şekilden ferromanyetik şekle geçmesidir. Normalde  $T > T_c$  sıcaklıklarında demir, bakır ve çinko gibi paramanyetiktir. Bu maddeleri  $T > T_c$  sıcaklıklarında manyetik bir dış alan içerisine konulduğu zaman atomik dipoller alan yönüne yönelmeye zorlanırlar. Mıknatıslanma aslında tamamlanmamış yörüngelerdeki çiftlenmemiş elektron spininden kaynaklanmaktadır. Yani dış manyetik alan yokluğunda madde mıknatıslanmaz eğer zayıf bir H alanı uygulanırsa maddenin hacim başına manyetik dipol momenti, uygulanan alanla orantılıdır;

$$M \approx \mu H \quad (2.1)$$

Kendiliğinden mıknatıslanma ferromanyetizmanın tanımlayıcı özelliğidir. Ferromanyetik durumda son yörüngesinde elektron çiftlenimi olmayan atomlardaki 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 kaldırılabilirse bile 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 bağlıdır. Sıcaklık mutlak sıfıra ( $0\text{ }^{\circ}\text{K}$ ) ulaştığında spinlerin hepsi aynı yöndedir ve sistem en düşük enerji durumundadır. Bu sistem ferromanyetikdir. Sistemin  $T$  sıcaklığı yükselirken spinlerde rastgele yönelmeye başlar. Yani maddenin mıknatıslanması azalarak Curie sıcaklığı adı verilen  $T_c$  sıcaklığında sıfır olur. Curie sıcaklığının üstündeki sıcaklıklarda spinler rastgele yöneldiklerinden dolayı madde paramanyetik fazda bulunur. Bu durumda sıcaklıktan kaynaklanan hareketler, komşu atomlar arası etkileşimlerden ileri gelen kuvvetleri yenecek kadar büyür. Kritik sıcaklık dışardan uygulanan manyetik alanla değiştirilebilir. Dış alanın varlığı kritik sıcaklığın değerini büyütür. Yani madde daha yüksek sıcaklıkta faz değiştirir. Örneğin oda sıcaklığındaki demir çubuk incelendiğinde sıcaklık artarken sıfır manyetik alandaki kendiliğinden manyetizasyonun ( $M_0$ ) azaldığı görülür [1-6].

İkinci Derece Faz Geçişi, serbest enerjinin birinci türevinin sürekliliği, ikinci türevinin süreksizliği ile tanımlanır. İkinci dereceden faz geçişini Fe, Ni, Co gibi manyetik malzemelerde görülen ferromanyetizmadan paramanyetizmaya, ikili alaşımlarda görülen düzenden düzensizliğe ve süper akışkanlarda görülen süper akışkanlardan akışkana faz geçişlerinde görmek mümkündür. Bir manyetik sistemde görülen faz geçiş sıcaklığında görülen manyetizasyon ve iç enerjide görülen sürekliliğe ek olarak alınganlık, özısıda görülen ıraksama ve korelasyon uzunluğunun faz geçiş noktasında sonsuza yönelmesi ikinci dereceden faz geçişinin karakteristik özellikleridir. Yapılan simülasyon çalışmalarının sonlu sistemler üzerinden yapılabilmesi, ikinci dereceden faz geçişlerinde gerçekleşen sonsuz korelasyon uzunluğunun örgü boyu ile sınırlanmasını beraberinde getirmektedir. Buna göre,

sonsuz hacim limitinde, geiş noktasında, termodinamik niceliklerde ortaya ıkan sonsuz deęerler örgü büyüklüęüne baęlı olarak sonlu deęere sahip olur.

## 2.2. Evrensel Davranış

Farklı sistemlerin aynı kritik üslere sahip olması özellięine evrensellik denir. Argon, Kripton, Azot ve Oksijen gibi gazların sıvı ve buhar yoğunluklarının gerçek deęişimleri evrensel bir özellięin davranışını gösterir. Sıcaklık ve yoğunluk gibi fiziksel nicelikler normalize edildięi zaman, birbirinden farklı gazlar için veri deęerleri hemen hemen aynı birlikte var olma eğrisinin üzerine düşer.

Sıcaklık  $T$ , kritik sıcaklık  $T_c$ ' ye yaklaşırken sıvı ve buhar yoğunlukları farkı  $\sim |t^\beta|$  baęıntısındaki  $\beta$  kritik üssüne baęlı olarak azalır. Burada,  $t = (T - T_c)/T_c$  boyutsuz birimlerde sıcaklığın kritik deęerden sapmasını ölçen indirgenmiş sıcaklık,  $\beta$  ise kritik üs olarak belirlenir ve sıvının cinsine baęlı deęildir. Sıvı ve gaz yoğunlukları arasındaki farkı;

$$\rho_{\text{sıvı}} - \rho_{\text{gaz}} \approx |t^\beta| \quad (2.2)$$

İndirgenmiş sıcaklık deęeri olan ( $t = (T - T_c)/T_c$ ) (2.2) denkleminde yerine yazalım;

$$\rho_{\text{sıvı}} - \rho_{\text{gaz}} \approx t = ((T - T_c)/T_c)^\beta \quad (2.3)$$

$T \rightarrow T_c$  olduęu zaman sıvı ve buhar yoğunlukları farkı  $\rho_{\text{sıvı}} - \rho_{\text{gaz}} \approx |t^\beta|$  kritik üste baęlı olarak sifıra gider. Burada  $t$  boyutsuz birimlerde sıcaklığın kritik deęerden sapmasını ölçen indirgenmiş sıcaklık,  $\beta$  ise kritik üs olup sıvının cinsiden baęımsızdır.  $\beta$  kritik üssünün maddelerin kritik sıcaklıkları farklı olmasına raęmen sıvı gaz geişleri deneysel olarak  $\beta \approx 0,31$  civarlarında deęer aldığı gözlemlenmiştir. Aynı mantıkla mıknatısın kritik sıcaklıktaki manyetizasyon farkı;

$$M^\uparrow - M^\downarrow \approx t = ((T - T_c)/T_c)^\beta \quad (2.4)$$

Manyetizasyonun indirgenmiş sıcaklığa baęlılık gösterdięi ve farklı manyetik maddeler olsa bile bu kritik üssün deneysel ve teorik deęerinin tek doęrultu eksenli olmak (sadece yukarı ve aşağı gibi) şartıyla  $\beta \approx 0,31$  civarında olduęu tespit edilmiştir. Bu durum 1970'ler de RG (renormalizasyon grup) teorisinin boyut ve simetriyle belirledięi "evrensellik" terimiyle izahı yapılmıştır.

Sonuç olarak evrensellik farklı sistemlerin aynı kritik üste sahip olmasıdır. Yani aynı evrensellik sınıfındaki tüm sistemler aynı kritik üstlere sahiptir[35].

### 2.3. Düzen Parametresi

Belirtilen sistemin gruplandırılmasına bağlı tensörel bir niceliktir ve  $\Psi$  ile gösterilir. Düzen parametresi tek bileşenli akışkanlar için yoğunluk, akışkan karışımları için, mol kesirleri arasındaki fark, süper akışkanlar için ise kompleks düzlemde ve iki bileşenli bir vektördür. Örneğin; manyetik sistemlerde düzen parametresi manyetizasyon olarak bilinir ve üç bileşenli vektör olarak düşünülebilir, M harfi ile gösterilir. Manyetizasyon sıfır olduğunda sistem tamamen düzensiz bir halde bulunur. Düzen parametresi geçişin bir tarafında değişmez bir şekilde hiç kalmazken diğer bir tarafında sıfırdan itibaren değişir. Düzen parametresini belirlemede herhangi bir kural yoktur problemin akışına göre belirlenir[36].

### 2.4. Kritik Üsler

Kritik yerde serbest olan enerjinin 1.türevi, manyetizasyon parametresini sürekli olmasına rağmen ikinci türevi olan öz ısı ve manyetik alınganlığı ıraksar. Bütün spin sistemlerdeki mikroskobik durum;

$$\{\sigma\} = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots\} \quad (2.5)$$

Bölüşüm fonksiyonu;

$$Z_N = \sum_{\{\sigma\}} \exp(-\beta E(\{\sigma\})) \quad (2.6)$$

Serbest enerji;

$$A = -kT \ln Z_N \quad (2.7)$$

Ortalama Manyetizasyon;

$$M(H, T) = \langle \sigma \rangle = -1/N (\partial A(H, T)) / \partial H \quad (2.8)$$

Alınganlık;

$$\chi = \frac{\partial M(H, T)}{\partial H} = -\frac{1}{N} \left[ \frac{\partial A(H, T)}{\partial H} \right]^2 \quad (2.9)$$

Enerji;

$$U=A-T \frac{\partial A(H,T)}{\partial T} =T^2 \frac{\partial A(H,T)/T}{\partial T} \quad (2.10)$$

Özısı;

$$C = \frac{\partial U(H,T)}{\partial T} \quad (2.11)$$

Faz geçişi kavramının tanımını yaparken kritik noktalarda niceliklerin singüler (tekil) davranışında belirlemek gerekir. Kritik olayın modern teorilerinin bir başarısı da ölçekleme teorisidir. Bu teori değişik kritik üsler arasında bağlantı kurar. Şimdilik kritik üsleri  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  ve  $\delta$ ' dir. Bunlar öz ısının, düzen parametresinin, alınganlığın ve durum denkleminin tekilliklerini tarif eder.

İndirgenmiş sıcaklık:  $t = \frac{T-T_c}{T_c}$  cinsinden onları şu şekilde tarif edebiliriz;

$$\text{Öz ısı} \quad C \propto |t|^{-\alpha} \quad (2.12)$$

$$\text{Manyetizasyon} \quad M \propto |t^\beta| \quad (2.13)$$

$$\text{Alınganlık} \quad \chi \propto |t|^{-\gamma} \quad (2.14)$$

$$\text{Durum denklemleri} \quad M \propto |H|^{-1/\delta} \quad (2.15)$$

Kritik üsler, özellikle kritik sıcaklık civarında birçok fiziksel büyüklüğün nasıl davrandığını gösterdiğinden dolayı önem taşımaktadır. Söz konusu kritik sabitler şu şekildedir:

$\beta$ = ısısal magnetizasyon sabiti

$\delta$ = magnetizasyon sabiti

$\alpha$ = öz ısı sabiti

$\gamma$ = duygunluk sabiti

Stanley kritik üslerin elde edilmesindeki matematiksel mantığı şu şekilde tarif etmektedir[35]. Kritik nokta civarında genel bir  $f(t)$  fonksiyonun davranışında rolü olan kritik üssü tanımlamak için;

$$\varepsilon = \frac{T-T_c}{T_c} = \frac{T}{T_c} - 1 \quad (2.16)$$

İndirgenmiş sıcaklık tanımı kullanılacak. Bu  $f(t)$  fonksiyonunun yeterince küçük ve pozitif  $t$  değerleri için tanımlı olduğu ve

$$\lambda = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\ln f(t)}{\ln t} \quad (2.17)$$

Limitinin var olduğu varsayılacak. Buradaki  $\lambda$  kritik üstür.  $f(t) \sim t^\lambda$  şeklinde davrandığı düşünülebilir ama termodinamik fonksiyonlar bu kadar basit bir şekilde sahip değildir, genellikle düzeltme terimleri içerirler.

$$F(t) = At \lambda (1 + Bt^y + \dots) \quad (y > 0) \quad (2.18)$$

Kritik sıcaklığın çok yakınlarında fonksiyonun tam şekli belirlenemese bile ilk terimler yeterince baskın olacağından dolayı kritik üssün bilinmesi fonksiyonun davranışı hakkında oldukça tatmin edici bilgi verir. Bu bölgedeki deneysel verilerin log-log grafiği çizildiğinde (genelde bu bir doğru olacaktır) eğimi kritik üssü verir yani fonksiyonun tam şekli belirlenemese bile kritik üssün belirlenmesi mümkündür.

$\lambda < 0$ , için  $f(t)$  fonksiyonu kritik sıcaklıkta sonsuza ıraksarken,

$\lambda > 0$ , için  $f(t)$  fonksiyonu kritik sıcaklıkta sifıra yaklaşmaktadır

$\lambda = 0$  olması durumunda ise logaritmik ıraksama, sivri uçlu tekillik veya analitik bir fonksiyonun sıçrama süreksizliği durumlarından biri olabilir.

Örnek olarak;

$$\frac{M_o(T)}{M_o(0)} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^\beta [1 + \dots] = B \quad (2.19)$$

$$M \sim (-t)^\beta \quad (2.20)$$

$M_o(0)$  normalizasyon sabiti  $B$ , sistemden sisteme küçük farklılıklar gösterebildiği için konulmuştur.



$$\frac{\chi_T}{\chi_T^0} = \begin{cases} 1'(-t)^{-\gamma} (1 + \dots) & [T < T_c] \\ 1t^{-\gamma} (1 + \dots) & [T > T_c] \end{cases} \quad (2.21)$$

Burada  $\chi_T^0$  kritik noktada manyetik momentleri etkileşmeyen bir sistemin (paramanyetik) manyetik alınganlığıdır.

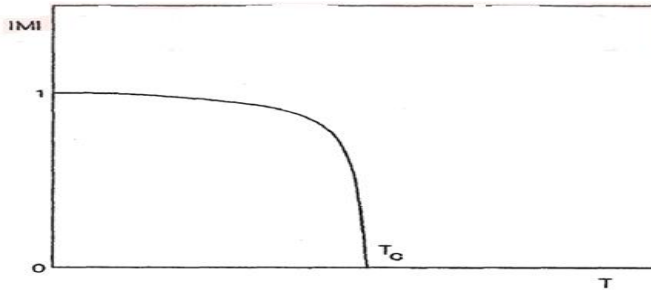
$$\frac{H}{H_C^0} = D |M_H(T = T_C) / M_0(T = 0)|^\delta [T = T_C] \quad (2.22)$$

$H_C^0 = \frac{kT_C}{M_0}$  burada  $M_0$  spin başına manyetik momenttir.

Kritik üsler arasında bazı bağıntılar vardır ki bunlar klasik teorilerden elde edilen üs değerleriyle bazen eşitsizlik bazen eşitlik olarak sağlanmakta; elde edilen bazı deneysel veriler hata sınırlarıyla birlikte ele alındığında ise eşitlik şeklinde sağlanmaktadır[37].

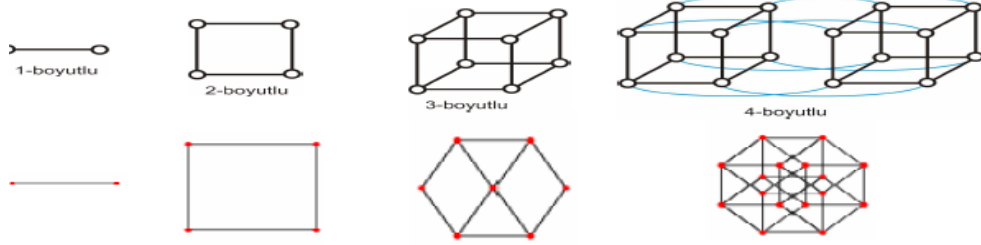
## 2.5. Ising modeli

Patria (1996) yapmış olduğu çalışmalar neticesinde Ising modelini, faz geçişi yapan sistemleri temsil eden, spinler arası etkileşimi içeren ferromanyetik maddelerin termodinamik niceliklerinin incelenmesini sağlayan bir model olarak tanımlamıştır. Bilindiği gibi ferromanyetik maddelerde (Fe, Ni, Co gibi) dış manyetik alan olmadığında bile Curie sıcaklığından düşük sıcaklıklarda kendiliğinden mıknatıslanma oluşturmaktadır. Kendiliğinden mıknatıslanma ferromanyetizmanın tanımlayıcı özelliğidir. Metalin sıcaklığı Curie sıcaklığına yaklaştığında kendiliğinden mıknatıslanma sıfıra gitmekte ve Curie sıcaklığının üzerinde sıfır olmaktadır. Diğer yandan Curie sıcaklığına her iki taraftan yaklaşıldığında ferromanyetik maddenin özısı ve manyetik alınganlığı iraksamaktadır[2,6].



Şekil 2.1.  $H=0$  da kendiliğinden manyetizasyon  $M$ - $T$  grafiği

Ising modelde incelenen sistem örgü konumları adı verilen  $N$  tane sabit noktadan meydana gelen  $n$  boyutlu periyodik bir örgüdür. Örgünün geometrik yapısı iki boyutta kare veya üçgen, üç boyutta kübik veya hegzagonal, dört boyutta hiperkübik şekilde olabilir.



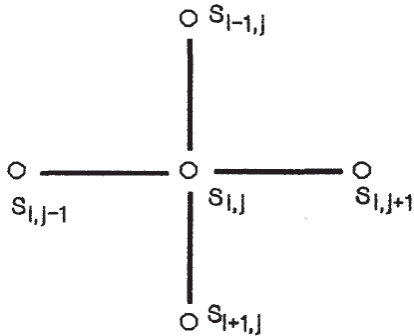
Şekil 2.2.  $d=1,2,3$  ve dört boyutlu örgülerin geometrik yapıları ve izdüşümleri.

Şekilde görülen örgü konumları için iki yönelim mevcuttur. Her bir örgü konumuna  $+1$  veya  $-1$  değerlerinin birisini alabilen  $S_i$  ( $i=1,2,\dots,N$ ) spin değişkeni takılmıştır ve bu durumda örgü  $2^N$  şekillenime sahiptir. Sistemde başka bir değişken yoktur.  $S_i=+1/2$  ( $\mu_i=+\mu_B$ )  $i$ . konumun spin yukarı durumda olduğunu  $S_i=-1/2$  ( $\mu_i=-\mu_B$ )  $i$  konumun spin aşağı durumda olduğunu belirtir.

$i$  ve  $j$  konumlarında komşu iki spinin  $I$  alt indisindeki toplam Ising etkileşme enerjisini kuantum mekaniğine göre tanımlayalım; ( $H$  dış manyetik alan)

$$E_I = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - H \sum_{i=1}^N S_i \quad (2.23)$$

$i,j$  koordinat sistemi üzerindeki kare örgü için aşağıda belirtildiği gibi dört en yakın komşu spinine sahiptir.



Şekil 2.3. İki boyutlu Kare örgü için en yakın spinler

Eğer spinler aynı yönde bir etkileşim içerisinde olurlarsa;  $J_{ij}=J$  alınmakta ve  $J>0$  olduğu durumda ferromanyetizmaya,  $J<0$  olduğu durumda ise antiferromanyetizmaya karşılık gelmektedir. Ising modelinde tüm termodinamik nicelikler  $E_1$  enerjili konfigürasyonlar üzerinden hesaplanmaktadır. Spin kümesi mikrokronik topluluk kavramına uymaktadır fakat analitik çalışmalarında kanonik topluluk kullanılmaktadır[20].

## 2.6. Dört Boyutlu Ising Modeli

Ising evrensellik sınıfı için üst kritik boyut dördür. ( $d=4$ ) Dört boyutlu Ising modelinin net bir sonucu bilinemediği için yapılan nümerik çalışmalar oldukça önemlidir. Dört boyutlu Ising modelinin kritik özelliklerini incelemek için en kullanışlı yöntem olan Monte Carlo yöntemi kullanılmaktadır. Renormalizasyon grup yaklaşımı üst kritik boyutun altında kritik olayın incelenmesinde başarılı olmuştur. Üst kritik boyutun üstü için ortalama alan teorisi geçerlidir. Renormalizasyon grup teorisi, üst kritik boyutta ( $d=4$ ) ortalama alan davranışına logaritmik düzeltmeler gerektiğini vurgular. Kuvvet kanunu ıraksamaları için bu tahmin edilen logaritmik düzeltmeler dört boyutlu ısing modelinin ilk seri açılım sonuçlarında ortalama alan verilerinden kritik üslerin belirli sapmalarını izah etmek için kullanılır. Monte Carlo sonuçları ortalama alan teorisi için logaritmik düzeltmeleri ve marjinal davranışın bazı kanıtlarını belirtmektedir. Ancak modelin sonlu örgü ölçekleme analizinde sistemlilik yoktur ve sonlu sistemlerinin doğrudan Monte Carlo simülasyonlarıyla bu etkileri gözlemek ilginçlik arz etmektedir. Dört boyutlu Ising modelin reel manyetik sistemlere uygulanmamasına rağmen üst kritik boyutta logaritmik düzeltme olasılığının bir genel durum oluşturması beklenilmektedir. Üst kritik boyut  $d=3$  olduğu zaman bu logaritmik düzeltmeler gerçekte deneysel olarak gözlenebilir. Üstelik dört boyutlu Ising modelinin sonuçları sonlu örgü ölçekleme teorisi için ilginçlik göstermektedir[38-44].

## 2.7. Serbest Enerji, İç enerji ve Öz ısı

Termodinamik limitte spin başına serbest enerji;

$$f(H,T)=-kT \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \ln Z_1(H,T) \quad (2.24)$$

Şeklinde belirtilir. Burada N sonsuza giderken işlem yapıldığı gösterir. Klasik bir sistem büyük hacim(V) içerisinde çok sayıda N molekül topluluğundan meydana

geldiği düşünülebilir. N ve V 'nin yaklaşık büyüklüğü  $N \sim 10^{23}$  ve  $V \sim 10^{23}$  olduğu düşünülür. N ve V parametrelerinin değerinin çok büyük olduğundan dolayı bir limit(sınır)durumuyla ele almak gerekmektedir. Bu alınan limite Termodinamik limit adını veriyoruz.  $v=V/N$  özgül hacmi sonlu bir sayı olacak şekilde termodinamik limitte parçacık sayısı ve hacim sonsuza gider  $(N \rightarrow \infty, V \rightarrow \infty)$ . Fiziksel olarak büyük olan sistemlerin serbest enerji sistemin büyüklüğü ile orantılı olması gerekir. Örgünün eni boyu ve yüksekliğinin aynı anda veya sırasıyla sonsuza gitmesi durumunda aynı sonucu verir.

Termodinamik enerji spin başına serbest enerjiden elde edilmektedir. Termodinamik limitte  $(N \rightarrow \infty)$  manyetizasyon ve iç enerji serbest enerjinin dış alan ve sıcaklık niceliklerine göre birinci türevlerinden elde edilmektedir  $X(S_i)$  sistemin  $S_i$  durumuna karşılık gelen toplam enerji, iç enerji  $(H_I = \langle E \rangle)$  veya mıknatıslanma gibi gözlenebilir bir nicelik olmak üzere;

$$\langle X \rangle = Z^{-1} \sum_s X(s) \exp \left[ -\frac{E(s)}{kT} \right] \quad (2.25)$$

Şeklinde ifade edilir. Burada;

$$H_I = \langle E \rangle = Z^{-1} \sum_s E(s) \exp \left[ -\frac{E(s)}{kT} \right] \quad (2.26)$$

İfadesi yazılabilir. (2.25) ve (2.26) denklemleri kullanarak iç enerji ifadesini;

$$H_I = kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln Z \quad (2.27)$$

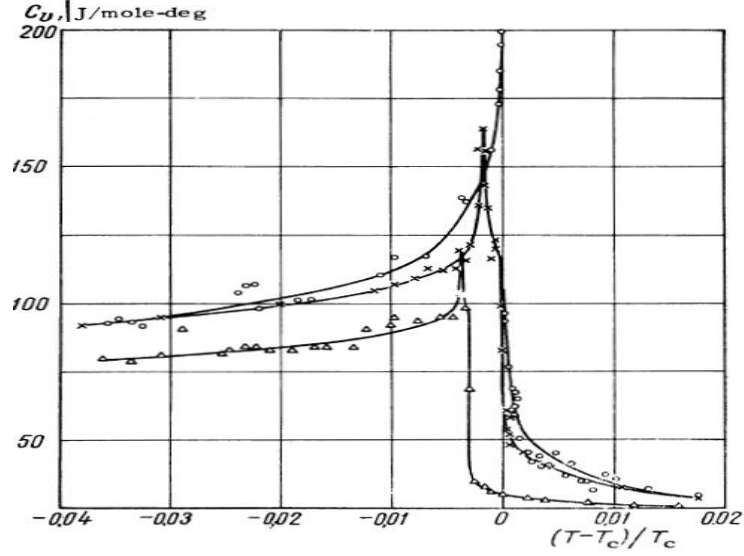
$$H_I = -kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \left\{ \frac{f}{kT} \right\} \quad (2.28)$$

İfadesi yazılabilir. Diğer yandan spin başına öz ısıyı;

$$C(H, T) = \frac{\partial H_I}{\partial T} \quad (2.29)$$

İfadesiyle belirtilir.

1963 yılında A. V. Voronel tarafından argonun  $T_c$  yakınında sabit hacimde öz ısısını ölçmüştür. Klasik teori öz ısının sadece kritik noktada süresiz sıçramaya sahip olduğunu tahmin eder.



Şekil 2.4. Özısı parametresi düz olarak artarken kritik sıcaklığın sağında ve solunda ani bir hızla yükselir.

$$C_V(TC^-) \neq C_V(TC^+)$$

Kritik sıcaklıkta  $C_V$ 'nin bir pike sahip olup olmadığı veya sonsuzda ıraksayıp ıraksamadığı oldukça önemlidir. Amerikalı teorik fizikçi Lars Onsager özısı parametresini;  $C_V(T) = A \ln(t) + \text{sonlu belirsizlik terimleri}$  şeklinde tanımlar.  $\alpha=0$  (log) olması özısının singüler olmayan bir kısmına sahip olmasındandır. Öz ısı  $T < T_c$  için  $\alpha'$  ve  $T > T_c$  için  $\alpha$  şeklinde iki üs ile tanımlanır. Teoriksel ve Deneysel sonuçlar  $\alpha = \alpha'$  olduğunu ispat etmiştir[45].

## 2.8. Kendiliğinden Mıknatıslanma, Manyetik Alınganlık ve Özısı'nın Sıcaklık Bağımlılıkları

Kritik sıcaklık olarak bilinen " $T_c$ " Curie sıcaklığında termodinamik niceliklerin davranışı indirgenmiş sıcaklık  $t$ 'ye bağlı olarak incelenmektedir.

$$\varepsilon = \frac{T - T_c}{T_c} \quad (2.16)$$

$\varepsilon \rightarrow 0$  limitinde herhangi termodinamik nicelik düzenli kısım ve ıraksayan "singüler" kısma ayrılabilir. Singüler kısımların  $t$ 'nin bir kuvveti ile orantılı olarak değiştiği kabul edilmektedir. Bu kuvvetler genelde kesirli ifadelerle sahiptir[20]. Termodinamik niceliklerden kendiliğinden mıknatıslanma (düzen parametresi)  $M$ , dış manyetik alanın olmadığı durumda kritik sıcaklığın altında  $T$ 'nin

azalan bir fonksiyonudur ve  $T_c$  sıfır(0)' dır. T' nin  $T_c$  ye çok yaklaştığı durumlar için M aşağıda belirtilen kuvvet kanuna uygun olarak değişmektedir.

$$M(0,T) \sim t^{\beta'} \quad t \rightarrow 0^+ \quad (2.30)$$

$$M(0,T) \sim -t^{\beta} \quad t \rightarrow 0^- \quad (2.31)$$

Yukarıda belirtilen  $\beta$  ve  $\beta'$  kendiliğinden mıknatıslanma kritik üsleri olarak ifade edilir ve iki boyutlu Ising modeli için  $\beta=0,125$ ,  $\beta'=0,875$  [46], üç ve dört boyutlu Ising modeli için sırasıyla  $\beta=0,30$ ,  $\beta' = 0.63$ , [47]  $\beta=0,50$   $\beta'=0,35$  [38-44] değeri verilmektedir. Dış manyetik alanın varlığında  $t=0$  için hal denklemi;

$$M \sim H^{-1/\delta} \quad (2.32)$$

Şeklindedir. Burada  $\delta$  bir diğer kritik üstür. Ancak yapılan bu çalışmada dış manyetik alan sıfır ( $H=0$ ) olduğu durum ele alınmayacaktır. Sıcaklık değeri olan T 'nin Curie sıcaklığı olarak bilinen  $T_c$ (kritik sıcaklık) çok yaklaştığı zaman manyetik alınganlık  $\chi$  iraksamaktadır. Manyetik alınganlığın kritikteki iraksak davranışı  $\gamma$  ve  $\gamma'$  kritik üsleri ile karakterize edilmektedir.

$$kT\chi(0,T) \sim t^{-\gamma} \quad t \rightarrow 0^+ \quad (2.33)$$

$$kT\chi(0,T) \sim 't^{-\gamma'} \quad t \rightarrow 0^- \quad (2.34)$$

Burada  $\gamma$  ve  $\gamma'$  birbirlerine eşittir ( $\gamma=\gamma'$ ) ve her iki haldeki orantı katsayıları birbirinden farklıdır.

Manyetik alınganlık kritik üssü için teorik olarak  $\gamma=\gamma'=0,99$  değeri verilmektedir. Dış manyetik alan yokluğundaki özısı C kritik sıcaklıkta singüler bir davranış göstermektedir. Verilmiş olan singüler davranışın kritik sıcaklığa yaklaşımı aşağıdan yukarıdan yaklaşılsa da aynı tipte kabul edilmektedir.

### 3. ISING MODELİN SİMÜLASYONU İÇİN ALGORİTMALAR

Birçok fiziksel sistemlerin davranışlarını inceleyebilmek için çeşitli modellemeler yapılmıştır. Örgü gazı modeli, Potts modeli, X-Y ve Heisenberg modeli, Gausyen ve küresel model, perkolasyon modeli v.s Ising modeli faz geçişi yapabilen bir sistemi en etkili şekilde anlatan modeldir. Ferromanyetik maddeler bu model ile modellenmekte ve termodinamik özellikleri incelenmektedir. Ising modeli ismini 1925 yılında bir boyutlu olarak uzayda çözümünü gerçekleştiren Ernest Ising 'den alır. Ernest bir boyutlu uzayda paramanyetizmadan ferromanyetizmaya geçişin olmadığını göstermiştir. Yani T sıfırdan farklı olması halinde faz geçişi yoktur.1944 yılında Lars Onsager tarafından iki boyutlu uzayda dış manyetik alan olmadığı durumda Ising modelin analitik tam çözümünü gerçekleştirmiştir. Gerçekleştirmiş olduğu bu çözümünden üslerin Landau teorisinin o zamana kadar doğru verdiği düşünülen kritik üslerden oldukça farklı olduğu görülmüştür. Ne dış manyetik alanın varlığında iki ve nede manyetik alanın olmadığı durumlarda üç boyutlu Ising modelinin çözülmesi yapılamamıştır. Ising modellemede faz geçişi gösterebilen sistemler için ortaya konulan modellemelerin analitik çözümü zor ve sağlıklı bir sonuç alabilmek için bilgisayarda simülasyon çalışması yapmak en mantıklı yöntem olacaktır [48,49].

Molekül Dinamiği ilk simülasyon çalışması 1953 yılında Nicholas Metropolis ve arkadaşları tarafından ortaya atılan algoritmaya dayanmaktadır. Belirli bir sistem içerisinde hareket boyunca enerjinin sabit kalması düşünülerek ortaya çıkmıştır. Toplam sabit enerjide klasik hareket denklemlerinin nümerik olarak çözmekten ibarettir. Mikrokanik 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  $\Delta t$  zaman adımında Newton hareket denklemleri çözülür. Kısa bir zaman sonrasında i. parçacığın  $X_i$  koordinatları ve  $V_i$  hızları aşağıdaki ifadelere göre bulunur.

$$X_i(t + \Delta t) = X_i(t) + V_i(t) \Delta t \quad (3.1)$$

$$V_i(t + \Delta t) = V_i(t) + \frac{f_i(t)}{m_i} \Delta t \quad (3.2)$$

Bu sistemde sonuç alabilmek için sisteme uygun potansiyellerin seçilmesi ve hareket denklemlerini çözecek algoritmaların iyi belirlenmesi gerekmektedir. Molekül dinamiği için öyle bir hücre tanımlanmalıdır ki parçacık sayısı ve hücrenin hacmi korunuyor olsun. Böyle bir sistemin toplam kinetik enerjisi

$$E_k = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{m_i} \quad (3.3)$$

Sistemin potansiyel enerjisi;

$$U(r) = \sum_{i<j} U(r_{ij}) \quad (3.4)$$

Buradaki  $r_{ij}$  parametresi  $i, j$  parçacıkları arasındaki mesafeyi göstermektedir. Böyle bir sistemin Hamiltoniyeni;

$$H = \frac{1}{2} \sum_i \frac{p_i^2}{m_i} + \sum_{i<j} U(r_{ij}) \quad (3.5)$$

Sistemin hareket denklemleri ise;

$$M \frac{dr_i}{dt} = P_i \quad \text{ve} \quad \frac{dP_i}{dt} = - \sum_{i<j} F(r_{ij}) \quad (3.6)$$

Yukarıda yapılan simülasyon çalışmaları zamanla geliştirilmiş ve birçok yeni simülasyon yöntemi ile algoritma ortaya çıkmıştır.

### 3.1. Metropolis Algoritması

1953 yılında Nicholas Metropolis ve arkadaşları tarafından ortaya atılan algoritma Markov yöntemi ile konfigürasyonlar üretir. Markov yöntemi ile sistemde var olan konfigürasyonlardan ( $\alpha$ ) yeni konfigürasyonlar ( $\alpha'$ ) geçmesi durumunda sistem enerjisindeki değişiklik hesaplanır. Enerji değişimi negatifse ki bu istenmeyen bir durumdur yeni bir konfigürasyon arayışına gidilir. Eğer değişim pozitif ise yeni konfigürasyon  $e^{-\beta(E_{\alpha'} - E_{\alpha})}$  ihtimali ile kabul edilir. Ising modelin simülasyonunda ilk olarak tek spinin ters çevrilmesiyle ilgilenir. Bu spin ya rastgele olarak belirlenebilir veya seçili bir spin ters çevrilebilir. Bir spinin ters çevrilmesi üzerine enerji değişimi sadece spinin en yakın komşularının değerini içerir. Bilgisayar aracılığıyla rastgele sayı üretici verilen olasılığa uygun olarak kabul veya red edilerek kullanılır[27,20].



Ayrıntılı olarak incelediğimiz vakit iki boyutlu Monte Carlo simülasyon algoritması şu aşamalardan meydana gelir;

1. Bir kenarında L sayıda spin olan ve toplam  $L^2$ spinden oluşan bir kare örgü alınır. İlk başta T sıcaklığında rastgele bir başlangıç noktası alınır. Tüm spinlere rastgele ( $\pm 1$ ) değerleri verilir ve E, M parametreleri gözlemlenir.

2. Monte Carlo döngüsü: Örgüdeki spinlerden herhangi birisi seçilip alt üst edilir. Bu spinin x,y koordinatlarındaki indisleri i,j olsun. Belirtilen spinlerin komşularıyla olan  $\Delta E$  enerji yükselişi hesaplanır. İki durum olabilir. Bunlar;

i.  $\Delta E \leq 0$  ise yeni konfigürasyon doğrudan kabul edilir. Enerji ve manyetizasyonu hesaplanır.

ii.  $\Delta E > 0$  ise Boltzman formülü aracılığıyla geçiş olasılığı P hesaplanır.

$$P = e^{\frac{-\Delta E}{k_B T}} \quad (3.7)$$

Bu durumu kabul etmemek üzere [0,1] aralığında rastgele bir q sayısı alınır iki seçenek söz konusudur;  $q \leq p$  ise pozitif enerjili bu yeni konfigürasyon kabul edilir. Enerji ve manyetizasyon hesaplanır.  $q > p$  ise bu yeni konfigürasyon kabul edilmez eskisiyle devam edilir.

3. Monte Carlo döngüsü çoğu kez tekrarlanır ve her seferindeki manyetizasyon değeri birikimli olarak toplanır.

4. Döngü safhası bittiği zaman toplam manyetizasyon değeri spin sayısına bölünerek her spin başına elde edilen M (manyetizasyon) değeri bulunur.

5. Başka bir sıcaklık parametresinde yukarıdaki tüm aşamalar yinelenir.

### 3.2. Swendsen-Wang Algoritması

Bu yaklaşım daha önce Potts modelinde tanımlanan "bond grafik ve cluster" temeline dayanmaktadır.1987 yılında Swendsen-Wang tarafından ortaya atılan algoritma spinlerin kendiliğinden ters çevrilmesi ve spin kümelerinin "cluster" şeklinin belirlenmesine sistemin kendisini karar vermesi olarak tanımlanır. Bu algoritma Ising modelinde de uygulanabilir. Belirlenen spine en yakın l ve m hücresi seçilir. Belirlenen l ve m hücreleri arasındaki katkıların çıkarıldığı eskisine eşit yeni

bir hamiltonyen tanımlanır. Daha sonra  $S_i$  ve  $S_m$  spinlerinin aynı ya da zıt yönde olmalarına göre bu hamiltonyene uyan üleşim(partition) fonksiyonu hesaplanır. Swendsen ve Wang spin temsilinden bağ temsiline geçen ve tekrar geri dönen bir algoritma teklif etmişlerdir[50].

1. Başlangıç spinleri rast gele yönlendirilir. Komşu spinle arasında bağlantı ağı oluşturulur ve bu ağlar tek tek incelenir.

2. Birbirine komşu iki spin zıt yönde silinir, aynı yönlü ise bu bağlantılar  $1 - e^{4\beta J}$  ihtimali ile korunur veya  $e^{4\beta J}$  silinir. Böylece büyük spin kümeleri küçük kümelere bölünür.

3. Temel birimler olarak yeni daha küçük spin kümelerinin yönelimleri ele alınır ve eşit bir olasılıkla rastgele olarak aşağı ve yukarı olarak yönlendirilir. ( $p=1/2$ )

4. Başlangıçtaki spin örgüsü yeniden oluşturulur.

Bu adımların hepsi M.C (Monte Carlo) adımlarıdır. Benzer olan iki spin arasındaki bağın silinmesinin mümkün olması ve herhangi bir durum tek basmakta başka birinden elde edildiğinden, bu işlemin uygulanabilirlik kriterini desteklediği anlaşılmaktadır.

### 3.3. Wolff Algoritması

1989 yılında Wolff tarafından tanımlanmıştır. Bu algoritmanın mantığı Swendsen-Wang algoritmasının mantığına paraleldir ve Ising sistemi için tanımlanmıştır Swendsen-Wang algoritmasından tek farkı bu algoritmadaki küme  $p=1$  olasılıkla çevrilidir. Bu algoritma şöyledir;

1. Örgü üzerinde rastgele bir  $i$  hücresi seçilir.

2. Rastgele bir spin çekirdek spini olarak belirlenir ve bu spine benzer olan komşulardan bir çevre listesi oluşturulur.

3. Çevre listesinden bir spini silinir ve bu spini  $1 - e^{-2\beta J}$  olasılıkla kümeye bağlanır ve bir zaman adımında çevre spini ile komşulardan biri arasında bağ kurma denemesi yapılmışsa o komşuya bu zaman adımında bir daha uğranmaz.

4. Eğer çevre spin kümeye eklenmemişse paralel komşularını belirlenir, kümede ve çevre listesinde olmayanlar varsa çevre listesine eklenir

5. 3-4 basamaklarını yeni bir spin eklenmeyeceğine kadar tekrar eder ve spin kümesindeki bütün hücrelere ait spinler yönlerini ters çevrilip işlem tamamlanır.

Wolf algoritması ile Swendsen-Wang algoritması birbirlerine çok benzerdir. Spin kümesine yeni bir spin bağlanma ihtimali ile Swendsen-Wang algoritmasında bir bağı yakalama ihtimali aynıdır. İki algoritmada da spin kümesinin aynı ortalama üzerindedir. Ancak Swendsen-Wang algoritmasında tüm spin kümelerinde her basamakta bir spin yön değiştirir. Wolf yönteminde ise o sadece başlama spini içeren spin kümesidir. Daha büyük spin kümelerin bu işlemde daha sık yön değiştirdiklerini bu işlemde anlaşılmaktadır. Bu büyük spin kümelerinde algoritmayı daha etkili hale getirir[51].

#### **3.4. Creutz'un Gezgin " Demon " Algoritması**

Molekül Dinamik simülasyon çalışması Monte Carlo yönteminin bir alternatifidir. Basit olarak yöntem klasik bir dinamik sistem için Hamilton hareket denkleminin integrasyonunu içerir. Başlangıç şartı olarak  $p$  genelleştirilmiş momentum,  $q$  genelleştirilmiş koordinatlar belirlidir ve toplam enerji sabittir. Öncelikle "demon"(spine eşlenik momentum" denilen bir serbestlik derecesi tanımlanmaktadır. Belirtilen bu yeni parametre molekül dinamiğindeki eşlenik momentumun benzeridir.

Molekül dinamiğindeki eşlenik momentumun kinetik enerjinin hesaplanmasında kullanılmasına benzer şekilde "demon" da kinetik enerji içerir. Gezgin demon sistemde toplam enerjiyi koruyacak şekilde rastgele spinleri ziyaret eder. Bir hücreye demon ulaştığında uygun bir spini ters çevirmek için girişimde bulunur. Eğer spinin enerjisi düşükse "demon" spine enerji aktarır ve spinin yönünü ters yönünü ters çevirmesine yetecek enerjiyi aktarmış ise spini ters çevirir. Aksi takdirde başka uygun bir hücredeki spini ters çevirmek için yönelir. Demon, enerjisini üstel olarak aktarır. Büyük sistemlerde demonun enerjisi toplam enerjinin sadece küçük bir kısmını gösterir. Demonun spinleri rastgele ziyaret etmesinden dolayı bu algoritmaya Creutz' un gezgin demon algoritması adı verilir ve bu

algoritmada ister tek bir gezgin "demon" isterse birden fazla "demon" kullanılabilir[24,25].

### 3.5. "Cellular Automaton" lar

1983 yılında teorik fiziğe katkılarıyla bilinen Stephan Wolfram "Cellular Automaton"(CA)' lar için ilk temel teori katkısında bulunmuş ve devamında Neuman ve Ulam tarafından "cellular space" ismi ile biyolojik sistemlerin simülasyonu için önerilmiştir. Fizik, Kimya ve Biyolojide karşılaşılan birçok dinamik sistem için uygulama alanları vardır. Biyolojide, DNA'nın kopyasını yapan fonksiyonunun bulunması, kalbin yavaş veya hızlı çarpması,"filamentus" organizmaların büyütülmesi, Kimya'da ise uzaysal difüzyon ile çiftlenmiş reaksiyonların bir ağını içeren lineer olmayan sistemler için "Cellular Automaton"(CA) olarak modellenmiştir[25].

"Cellular Automaton"(CA) 'lar uzay ve zaman kesikli değerlere sahiptir ve sonsuza kadar genişleyen düzenli hücre örgülerinden oluşmaktadır. Örgünün her bir hücresindeki kesikli değerler alabilen değişkenlere sahiptir. "Cellular Automaton"(CA) kesikli zaman adımlarında gelişir. Gelişim sırasında bir hücrenin değişkenin değeri bölgesel bir kuralla bir önceki zaman adımında kendisi ve ona en yakın komşu hücrelerde değişkenlerin değerine bağlı olarak oluşmaktadır. Herhangi bir zaman adımında bütün hücrelerin değişkenlerinin değeri özdeş bir kural sayesinde eş zamanlı olarak elde edilmektedir. d boyutlu bir "Cellular Automaton"(CA) 'nın gelişimi periyodik sınır şartlarına uymaktadır. Bir fiziksel sistem için "Cellular Automaton"(CA) ile bir model oluşturmak için sistemin yapısına uygun düzenli bir örgü (Örneğin iki boyutlu kare) seçilir. Örgüyü meydana getiren hücrelerin sahip olabileceği haller değişken parametrelerle belirlenir.

#### 3.5.1. Q2R "Cellular Automaton" ı

Q2R algoritmasında rastgele bir konfigürasyon ile hesaba başlanır.Q2R "automaton" anda bir örgünün herhangi bir hücresinde +1 ve -1 değerleri alan bir spin yer alır.Q2R algoritmasındaki spin-spin etkileşme enerjisi (Ising Enerji veya İç Enerji ) sistemde oluşan toplam enerjiye karşılık gelmektedir. Her zaman basamağında eğer değişecek spin aynı sayıda paralel veya paralel olmayan komşu spinine sahipse veya ele alınan konfigürasyonda değişecek spin sisteminin toplam

enerjisinde bir deęişme olmazsa spinlerin yönü deęişir ancak toplam enerji sabittir. Böylece ters dönen spinin enerjisinde bir deęişiklik olmaz. Simülasyonun bu tipi sabit enerjili mikrokanonik kümeye uyar. Sabit sıcaklıklı kümeye uymaz. Bir kerde bütün spinler yenilenmez. Örgü iki alt örgüye bölünür. İlk başta bir yarısı daha sonra dięer yarısı yenilenir. Bu durumun nedeni "Feedback Catastrophe" olayında belli bir adımdan sonra hep aynı konfigürasyonlar türetilmekte ve bunun sonucu olarak ta istenilen adım sayısı kadar gidilememektedir. Q2R automaton'ında hiçbir manyetik alan dikkate alınmaz. İç enerji bütün simülasyon süresince sabit kaldığından özısı enerji dalgalanmaları kullanılarak hesaplanamamaktadır[24,31].

### 3.5.2. Creutz "Cellular Automaton" ı

1986 yılında M.Creutz tarafından geliştirilen simülasyon yöntemi Metropolis ve arkadaşlarının algoritması ile moleköl dinamięi arasına girmiştir. Creutz Ising modelde iç enerji ile spine eşlik eden momentuma karşılık gelen toplam kinetik enerji korunur. Böylece Creutz algoritması kullanılarak üretilen konfigürasyonlarda iç enerjiye baęlı termodinamik niceliklerin hesaplanması mümkün olmaktadır. Bu algoritma yaygın olarak kullanılan M.C metotlarından daha hızlı çalışmakta ve yüksek kalitede rastgele sayı üretene gereksinim duymamaktadır.

Creutz Cellular automaton'ı (CCA) algoritması kullanılarak dış manyetik alanın olmadığı durumda iki ve üç boyutlu Ising modelde yapılan hesaplamalar algoritmanın  $2 \leq d \leq 8$  boyutlu uzaylardaki Ising modellerinin simülasyonlarında oldukça iyi sonuçlar alınmıştır. Her bir hücreye altı ikili bit karşılık getirilmektedir. Hücre deęişkenlerinin alacağı deęerler o deęişkenin bir önceki zaman adımındaki kendi deęerleri ile en yakın komşu deęerlerinden elde edilmektedir. Altı ikili bitten ilki  $B_i$  Ising spinidir, 0 veya 1 deęerleri alabilir.  $S_i = 2B_i - 1$  olmak üzere sistemin Ising spin enerjisi;

$$H_i = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad (3.8)$$

Burada  $\langle ij \rangle$  en yakın komşu hücre çiftleri üzerinden toplamı göstermektedir. Kalan beş bitten 4 demon veya spine eşlik eden momentuma karşılık gelmektedir.  $D_1, D_2, D_3, \dots, D_{n-2}$  ile gösterilen bu bit'ler "0" veya "1" deęerini alabilmekte ve  $(2^0 \times D_1 + 2^1 \times D_2 + 2^2 \times D_3 + \dots + 2^{n-3} \times D_{n-2})$  ifadesine göre  $(0, 2^{n-2}-1)$  aralıęındaki tamsayıları oluşturmaktadır. Yerleşik demona ait kinetik enerji bu tamsayı deęerlerinin dört katını almaktadır. Sistemin toplam enerjisi;

$$H = H_i + H_K \quad (3.9)$$

$H_K$  Örgünün kinetik enerjisi olup toplam enerji korunur. Sistemin sıcaklık parametresi(T) yi kinetik enerjinin ortalama değerinden elde edilir.

$$\langle E_D \rangle = \frac{\sum_{m=0}^{2^{n-2}-1} 4me^{-4m\beta}}{\sum_{m=0}^{2^{n-2}-1} e^{-4m\beta}} \quad (3.10)$$

$T = \frac{1}{\beta}$  'dır "n" bit CA'nın zamanla dama tahtası düzeninde gelişimini sağlamakta ve böylece Ising modelinin CA ile simülasyonunu mümkün kılmaktadır. Her bir zaman adımında dama tahtasının siyah hücrelerine kural uygulanıp rengi beyaza çevrilir. Bir hücrenin yenilenmesi için spini ters çevrilir. Sistemin iç enerji değişimi hesaplanır. Toplam enerji parametresi olan H korunmak üzere, sistemin iç enerjisindeki değişim bu hücreye ait momentum değişkenine verilebilecek veya ondan alınabilecek bir değerde ise spin ters çevrilir. Aksi halde spinin yönü ve momentumu değiştirilmez. Başlangıçta bütün spinler aşağı veya yukarı yönde alınırlar. İlk kinetik enerji örgüye rast gele verilir. Toplam enerjide sınırlama devam ettiği müddetçe rastgele hareket, konfigürasyon uzayı boyunca devam eder. Demon enerjisinin hesabı yapılırken bit sayısı göz önünde bulundurulur. Çünkü demon enerjisinin alacağı enerji değerleri bit sayısına bağlı olarak değişmektedir[29,30].

### 3.5.3. Creutz cellular automatonda termodinamik niceliklerin hesabı

Toplam enerjinin korunumu altında mikrokanoik olan bu modelde kinetik enerji ve iç enerji simülasyonu süresince dalgalanmakta sonuç olarak sistem enerjisi kanonik olarak davranmaktadır.

Sistemde  $E_i$  kinetik enerjili konfigürsyona rastlama ihtimali Boltzman ağırlıklı üstel bir dağılıma uymaktadır.

$$P(E_i) \rightarrow \exp(-4\beta E_i) \quad (3.11)$$

Burada  $4E_i = H_K$  'dır. Buna göre kinetik enerjinin beklene değeri;

$$\langle E_D \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{15} 4ne^{-4n\beta}}{\sum_{n=0}^{15} e^{-4n\beta}} \quad (3.12)$$

Yukarıda verilen ifade  $T = \frac{1}{\beta}$  eşitlik sayesinde sıcaklık belirlenebilmektedir ve elde edilen sıcaklık değerine karşılık kendiliğinden mıknatıslanma;

$$M = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i \quad (3.13)$$

İç enerji (Ising Enerjisi)  $H_I$ ;

$$H_I = - \frac{1}{2N} \sum_{(ij)} S_i S_j \quad (3.14)$$

Elde edilen sıcaklık değerine karşılık manyetik alınganlık  $\chi$ , şöyle hesaplanır;

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} = L^4 \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{kT} \quad (3.15)$$

Bu çalışmada dış manyetik alanın sıfır olduğu durum göz önüne alınmaktadır. Dış manyetik alanın varlığındaki manyetik alınganlık  $H \rightarrow 0$  limitine karşılık gelmektedir. Sistemin Öz ısı(C) ve Binder parametresi;

$$C = \frac{\partial H_I}{\partial T} = N \left[ \frac{\langle H_I^2 \rangle - \langle H_I \rangle^2}{(kT)^2} \right] \quad (3.16)$$

$$g_L = 1 - \langle M^4 \rangle / (3 \langle M^2 \rangle^2) \quad (3.17)$$

Şeklinde elde edilir. Termodinamik niceliklerin zaman ortalamaları ise;

$$\langle a \rangle = \frac{1}{t} \sum_{i=1}^t a(t) \quad (3.18)$$

İle hesap edilir.

## 4. BULGULAR VE SONUÇ

Bu çalışmada en yakın komşu etkileşmeli dört boyutlu Ising modelin  $L=24$ ,  $L=26$ ,  $L=28$  periyodik sınır şartlı örgülerinde ve sonsuz örgü kritik sıcaklığı civarında kinetik enerji değişkeni içeren program kullanılarak simülasyonlar yapılmıştır. Simülasyonlarda  $L=24,26,28$  örgüleri için yaklaşık  $6 \leq \frac{kT}{J} \leq 7.3$  sıcaklık ve  $2.58 \leq \frac{E}{J} \leq 4.90$  toplam enerji aralığında çalışılmıştır. Her bir toplam enerji için bir bağımsız simülasyon yapılmıştır. Her simülasyonda  $1.10^6$  kere örgünün bütün spinlerine ters çevirme kuralı uygulanmıştır.

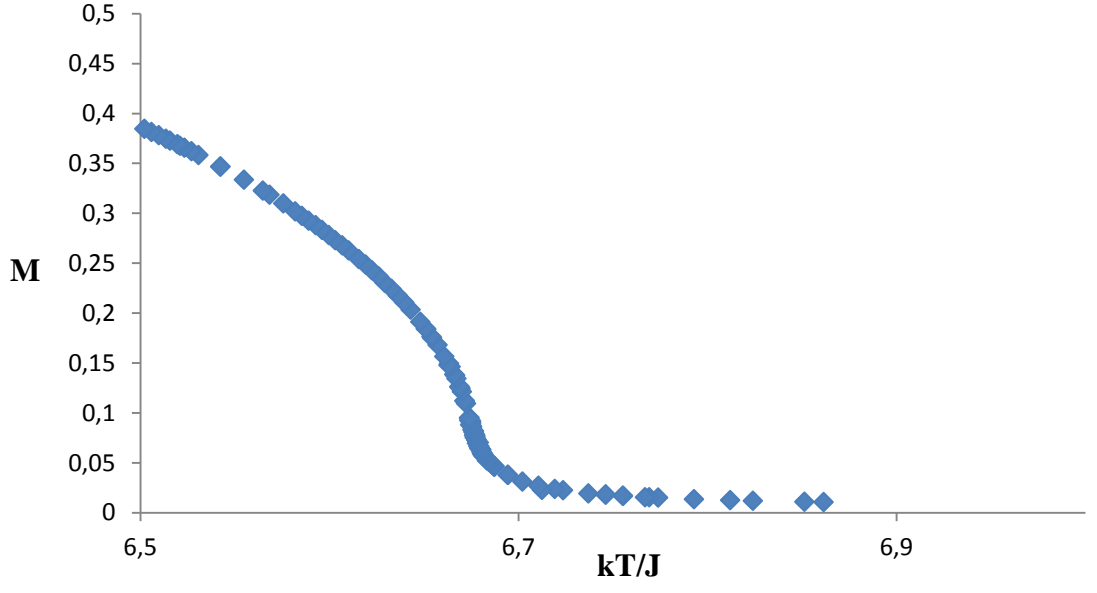
Yapılan simülasyon sonuçlarıyla Bölüm 4.1 de sıcaklık, manyetizasyon, manyetik alınganlık, özısı ve Binder parametresi gibi termodinamik niceliklerin sıcaklıkla değişimleri ve bunlara örgü etkisi tartışılmıştır. Ayrıca sonsuz örgü kritik sıcaklıkları ve kritik sıcaklıkta Termodinamik niceliklerin süreksizliklerini tanımlayan kritik üsler incelenmiştir.

### 4.1. Termodinamik Niceliklerin Sıcaklıkla Değişimleri

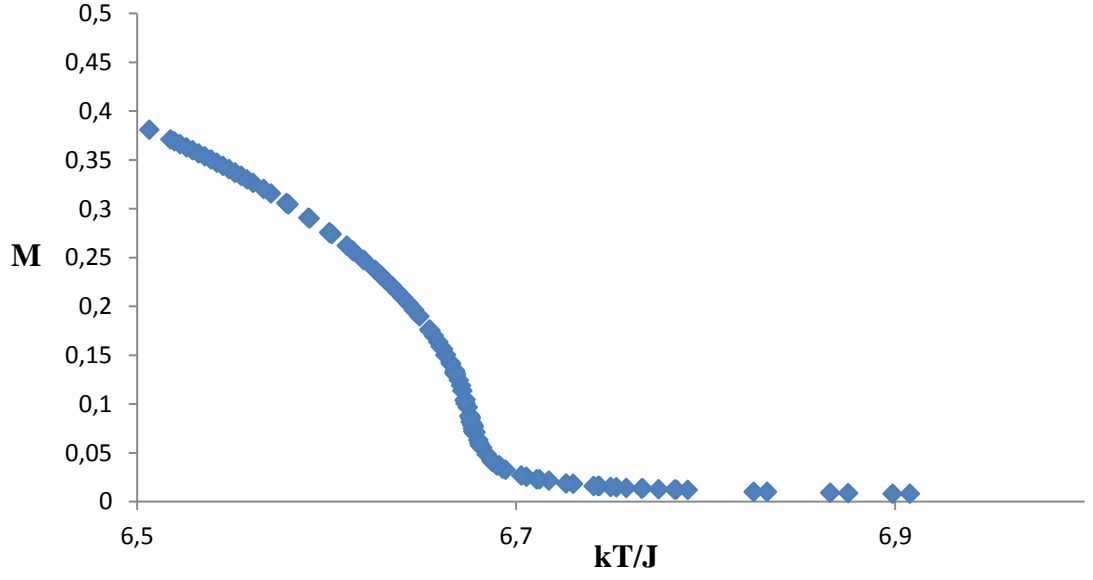
#### 4.1.1. Kendiliğinden Mıknatıslanma

$L=24$ ,  $L=26$ ,  $L=28$  sonlu örgüleri için kendiliğinden mıknatıslanma (M)'nin Denklem 3.13 ifadesi ile hesaplanan denge ortalama değerini kinetik enerjinin denge ortalama değerinden belirlenen sıcaklıkla değişimleri sırasıyla Şekil 4.1, Şekil 4.2 ve Şekil 4.3 ' de verilmiştir.

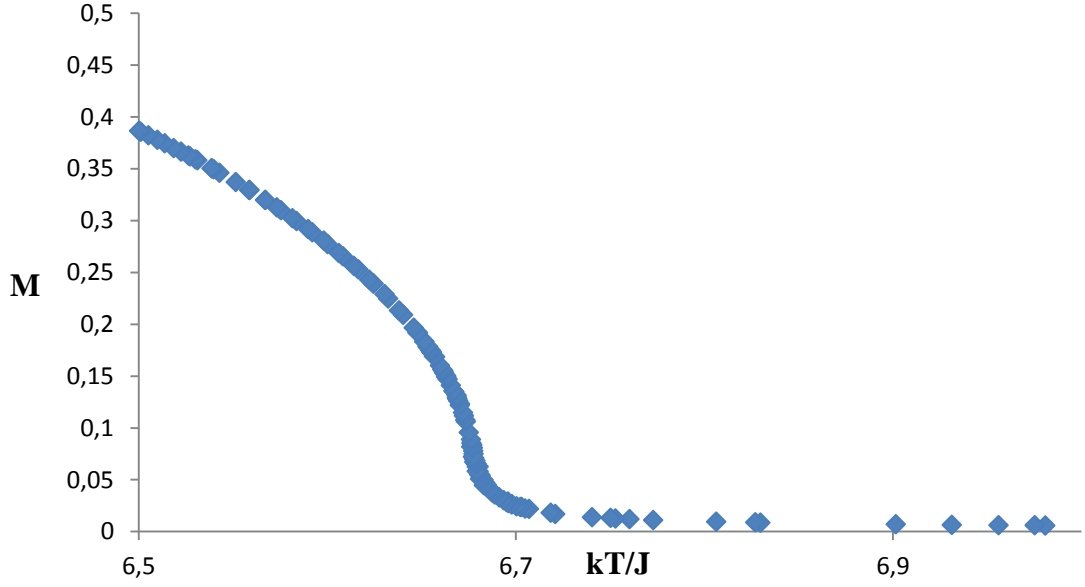




Şekil 4.1. Kendiliğinden mıknatıslanma (M)'nın sıcaklık (T) ile değişimi ( L=24)



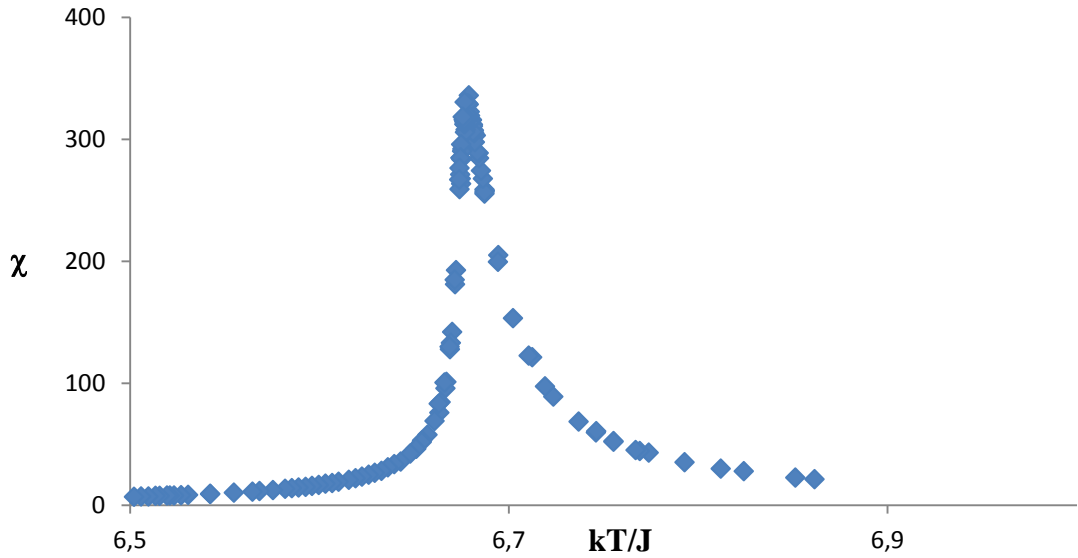
Şekil 4.2. Kendiliğinden mıknatıslanma (M)'nın sıcaklık (T) ile değişimi ( L=26)



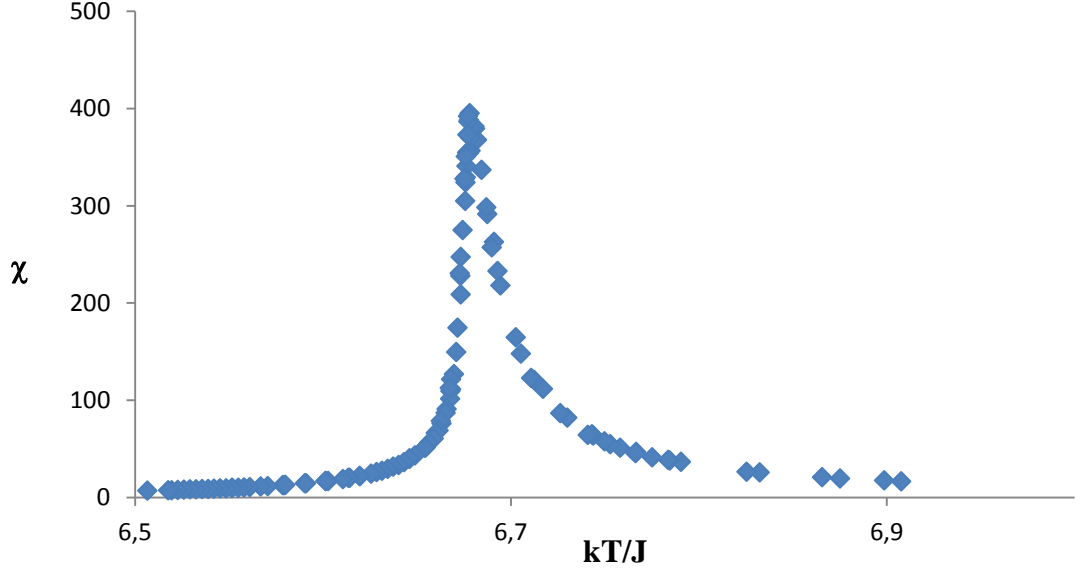
Şekil 4.3. Kendiliğinden mıknatıslanma (M)'nin sıcaklık (T) ile değişimi ( L=28)

#### 4.1.2. Manyetik Alınganlık

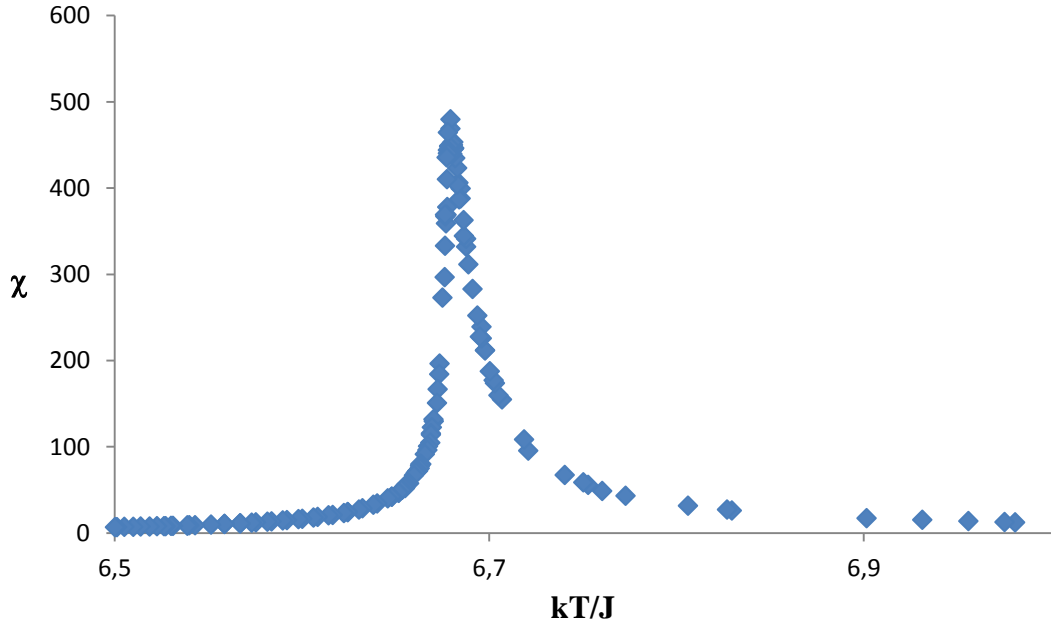
L=24, L=26, L=28 sonlu örgüleri için manyetik alınganlık ( $\chi$ )'ın Denklem 3.15 ifadesi ile hesaplanan denge ortalama değerini kinetik enerjinin denge ortalama değerinden belirlenen sıcaklıkla değişimleri sırasıyla Şekil 4.4, Şekil 4.5 ve Şekil 4.6 verilmiştir.



Şekil 4.4. Manyetik alınganlık ( $\chi$ )'in sıcaklık (T) ile değişimi ( L=24)



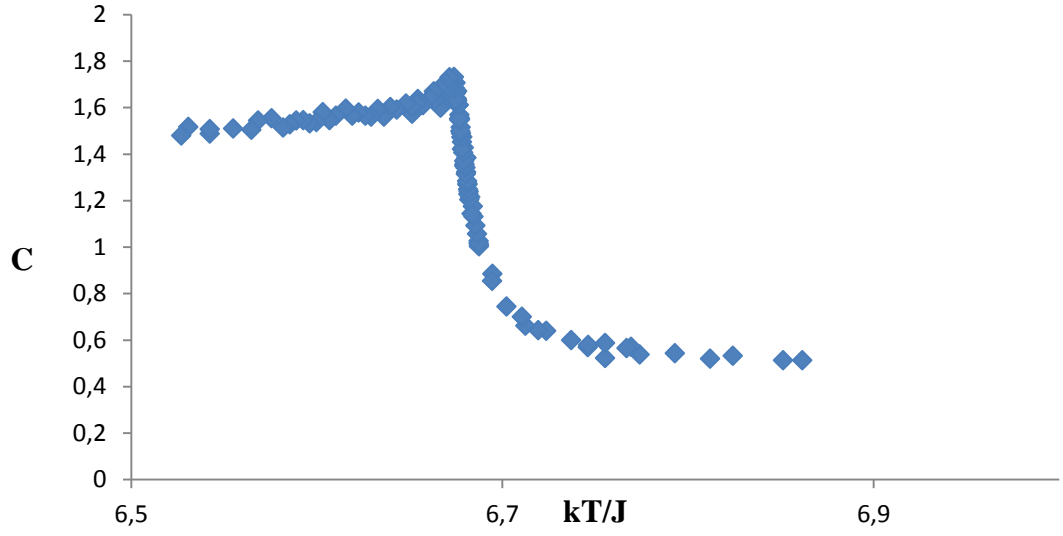
Şekil 4.5. Manyetik alınganlık ( $\chi$ )'ın sıcaklık ( $T$ ) ile değişimi ( $L=26$ )



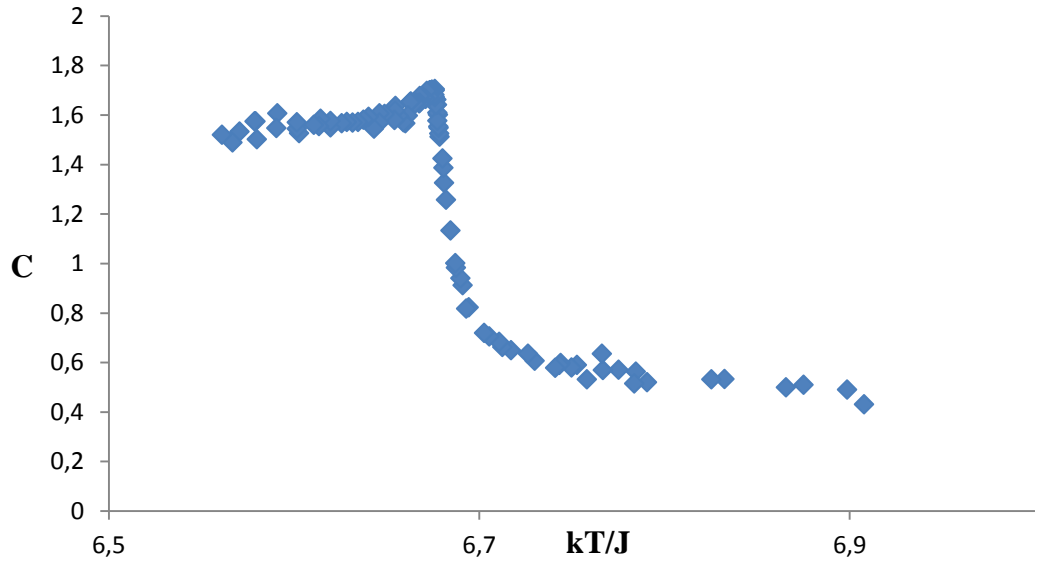
Şekil 4.6. Manyetik alınganlık ( $\chi$ )'ın sıcaklık ( $T$ ) ile değişimi ( $L=28$ )

### 4.1.3. Özısı

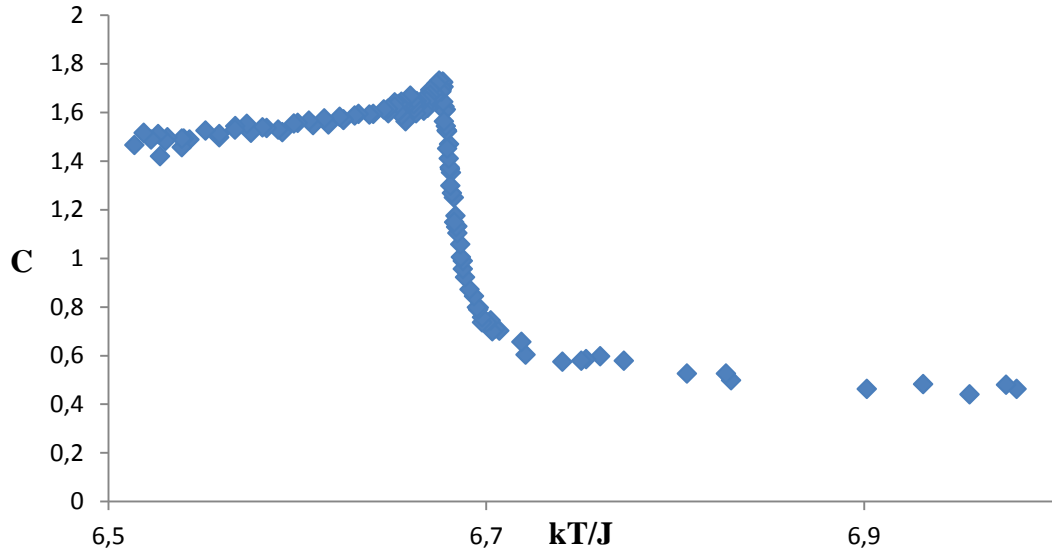
$L=24$ ,  $L=26$ ,  $L=28$  sonlu örgüleri için Özısı ( $C$ )'nın Denklem 3.16 ifadesi ile hesaplanan denge ortalama değerini kinetik enerjinin denge ortalama değerinden belirlenen sıcaklıkla değişimleri sırasıyla Şekil 4.7, Şekil 4.8 ve Şekil 4.9' da verilmiştir.



Şekil 4.7. Özısı (C)'nin sıcaklık (T) ile değişimi (  $L=24$ )



Şekil 4.8. Özısı (C)'nin sıcaklık (T) ile değişimi .(  $L=26$ )



Şekil 4.9. Özısı (C)'nin sıcaklık (T) ile değişimi .( L=28)

Manyetik alınganlık maksimumları  $T_c^X(L)$  ve öz ısı maksimumları  $T_c^C(L)$  göz önüne alınarak her bir örgü için sonlu örgü kritik sıcaklık değerleri tespit edilmiştir. Belirlenen sonlu örgü kritik sıcaklık değerleri Tablo 4.1'de verilmiştir. Sıcaklıkların belirlenmesinde hata pik genişliğinin yarısı alınarak tespit edilmiştir.

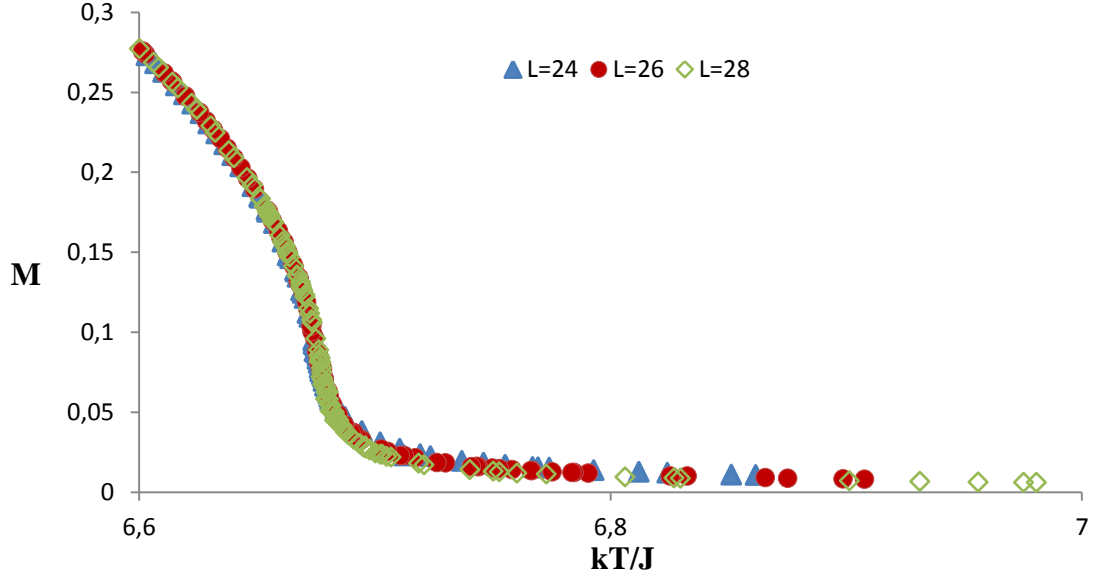
Tablo 4.1. L=24, 26, 28 örgü boyutlarının simülasyon çalışmasında elde edilen manyetik alınganlık maksimumlarındaki kritik sıcaklık değerleri ( $T_c^X(L)$ ) ve özısı maksimumlarından elde edilen kritik sıcaklık değerleri ( $T_c^C(L)$ )

|            | L=24            | L=26            | L=28            |
|------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| $T_c^X(L)$ | 6,67688±0,00015 | 6,67808±0,00358 | 6,67928±0,00001 |
| $T_c^C(L)$ | 6,67149±0,00079 | 6,67447±0,00102 | 6,67696±0,00004 |

#### 4.1.4. Termodinamik Nicelikler Üzerine Örgü Boyutu Etkisi

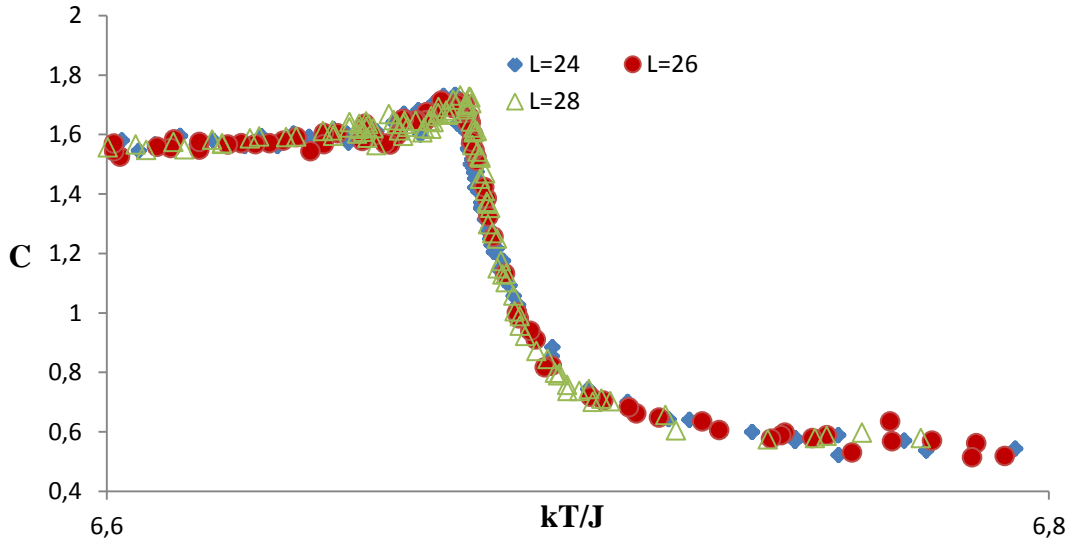
Şekil 4.10'da kendiliğinden mıknatıslanmanın farklı örgülerde sıcaklık değişimleri incelenmiştir. Belirli bir sıcaklık ( $T_c$ ) değerinden büyük sıcaklıklarda örgü etkisi görülmektedir. Sonsuz bir sistem için mıknatıslanma kritik sıcaklık ve daha büyük sıcaklıklarda sıfırdır. Şekil 4.10'da görüldüğü gibi sonlu örgülerde

yapılan hesaplamalarda belirli bir sıcaklık ( $T_c$ ) değerinden daha büyük sıcaklıklarda mıknatıslanma örgü büyüdükçe sifira daha çok yaklaşma eğilimindedir.

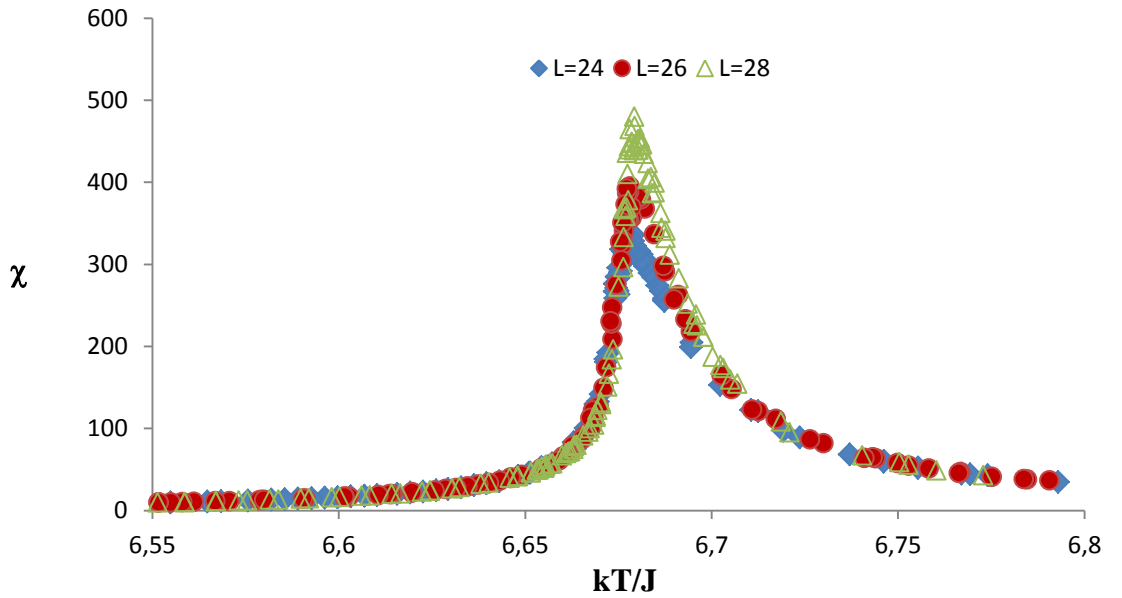


Şekil 4.10.  $L=24, 26, 28$  örgüleri için kendiliğinden mıknatıslanma ( $M$ )'nin sıcaklık ( $T$ ) ile değişimi

Şekil 4.11 ve Şekil 4.12'de görüldüğü gibi manyetik alınganlık ve iç enerji dalgalanmalarından hesaplanan özısının sıcaklıkla değişimleri incelendiğinde, kendiliğinden mıknatıslanma için örgü etkisinin başladığı sıcaklıklarda her bir örgü için manyetik alınganlık ve özısının pik verdiği görülmektedir.



Şekil 4.11.  $L=24, 26, 28$  örgüleri için özısı ( $C$ )'nın sıcaklık ( $T$ ) ile değişimi



Şekil 4.12.  $L=24, 26, 28$  örgüleri için manyetik alınganlık ( $\chi$ )'nın sıcaklık ( $T$ ) ile değişimi

#### 4.2. Statik Kritik Üsler Olan $\beta, \beta', \gamma, \gamma'$ Hesabı

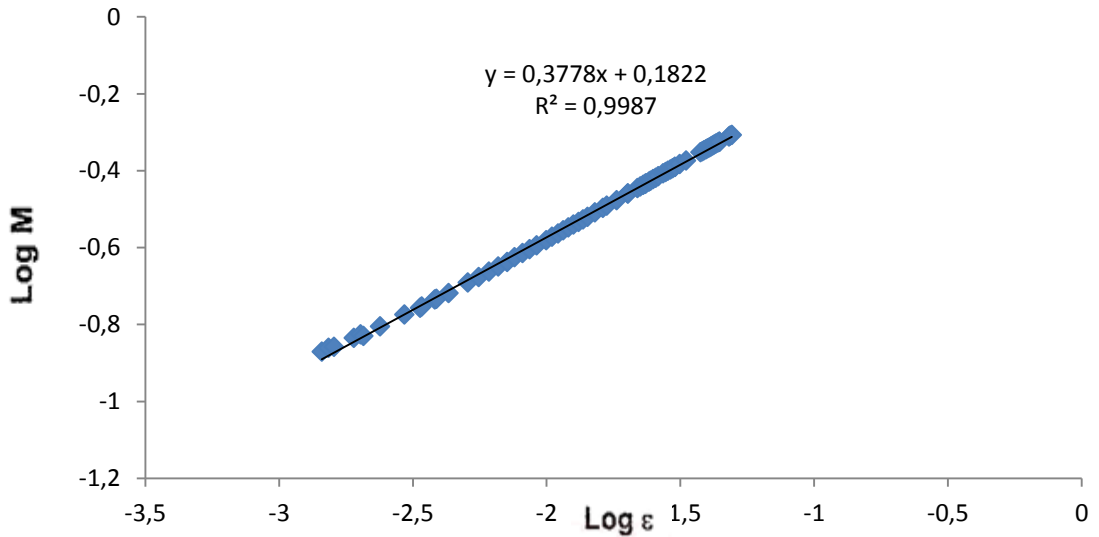
Kendiliğinden mıknatıslanma kritik üsleri olan  $\beta$  ve  $\beta'$  iki boyutlu Ising Model için  $\beta=0.125$ ,  $\beta'=0.875$ , üç boyutlu Ising model için  $\beta=0.30$ ,  $\beta'=0.63$  ve dört boyutlu Ising model için  $\beta=0.50$ ,  $\beta'=0.35$  olarak verilmektedir.[20].

Renormalizasyon grup teorisine göre sonsuz örgünün düzen parametresinin sıcaklığa bağlı ifadesi

$$M \propto \varepsilon^{\beta'} \quad T < T_c \quad (4.1)$$

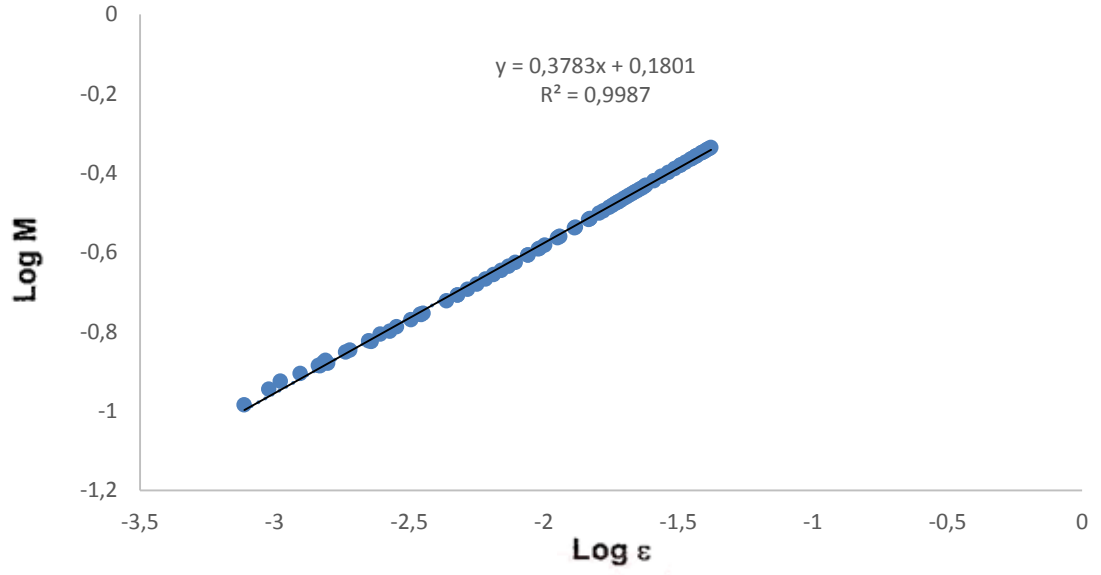
$$M \propto \varepsilon^{\beta} \log \varepsilon^{1/3} \quad T < T_c \quad (4.2)$$

ile verilmektedir. Burada,  $\varepsilon$  indirgenmiş sıcaklık olup  $\varepsilon = (T - T_c)/T_c$  dir ve yaklaşık  $0,001 < \varepsilon < 0,1$  aralığındadır.  $L=24, 26$  ve  $28$  örgüleri için sonlu örgü kritik sıcaklık değerleri kullanılarak hesaplanan  $\log M$ 'nin  $\log \varepsilon$ 'a ve  $\log(M/\log \varepsilon^{1/3})$ 'ün  $\log \varepsilon$ 'a göre grafikleri sırasıyla Şekil 4.13,Şekil 4.14,Şekil 4.15, Şekil 4.16, Şekil 4.17, Şekil 4.18' de verilmiştir. Grafiklerin eğiminden örgülere ait sonlu örgü kritik üs değerleri belirlenmiştir. Benzer şekilde sonsuz örgü kritik sıcaklıkları( $T_c(\infty)$ ) kullanılarak, sonsuz örgü kritik değerleri hesaplanmıştır. Hesaplanan kritik üsler Tablo 4.2'de verilmiştir.

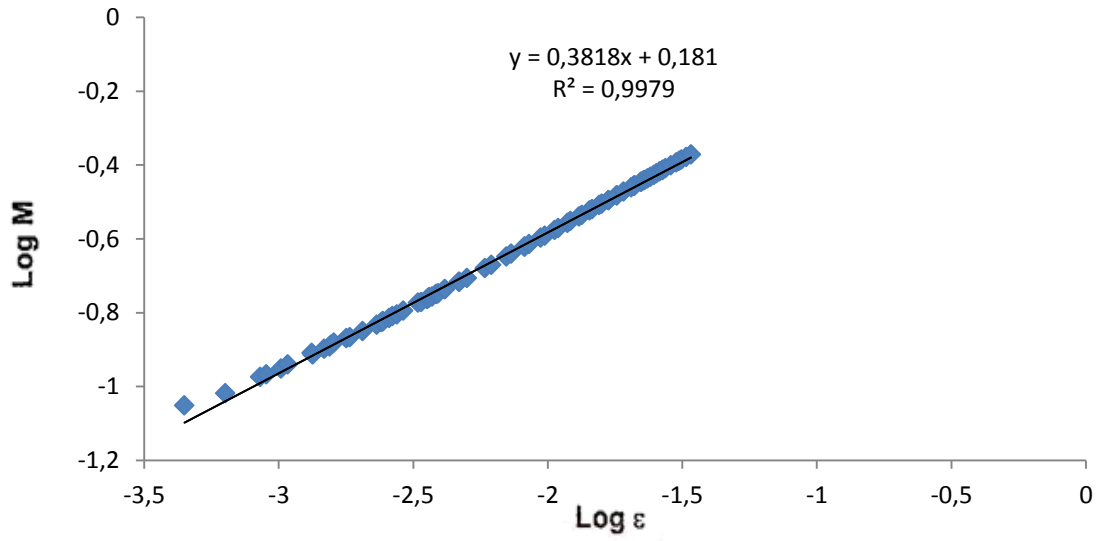


Şekil 4.13.  $L=24$  örgü boyutunda  $\log M$ 'nin  $\log \varepsilon$  karşı grafiği. Grafiğin eğiminden  $\beta'=0,3778(\pm 0,0013)$  elde edilir.

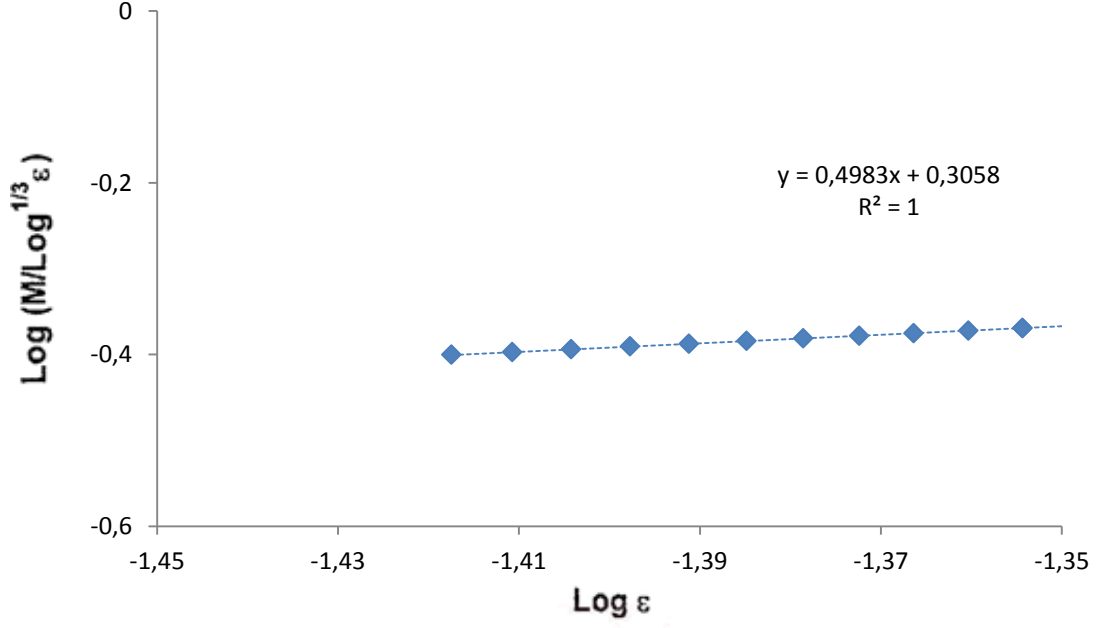




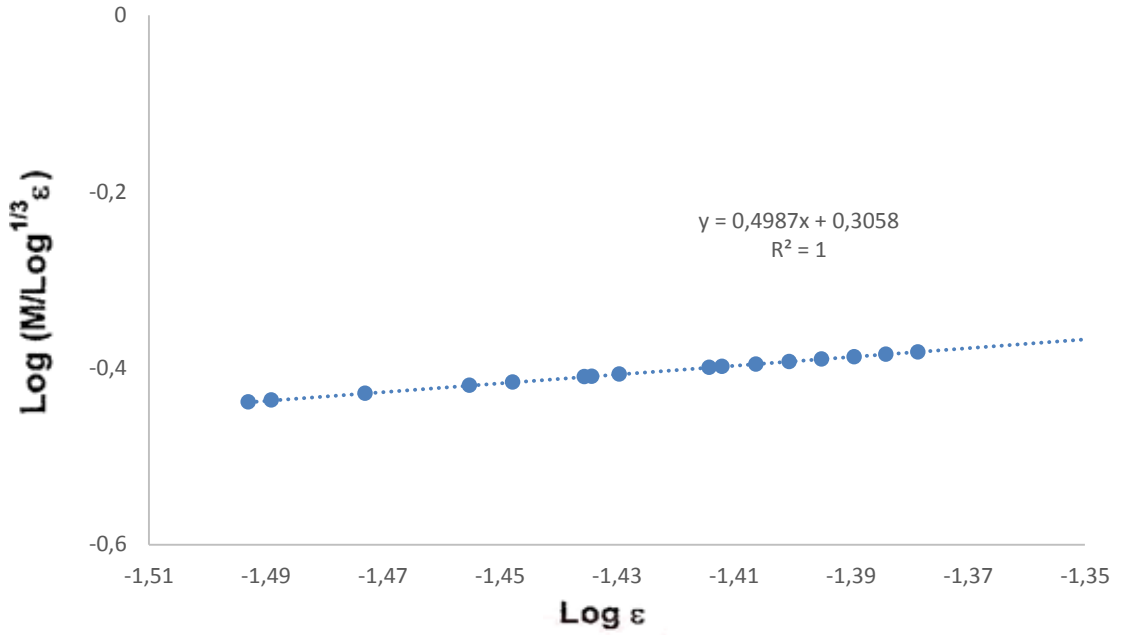
Şekil 4.14.  $L=26$  örgü boyutunda  $\log M$ 'nin  $\log \varepsilon$  karşı grafiği. Grafiğin eğiminden  $\beta'=0,3783(\pm 0,0013)$  elde edilir.



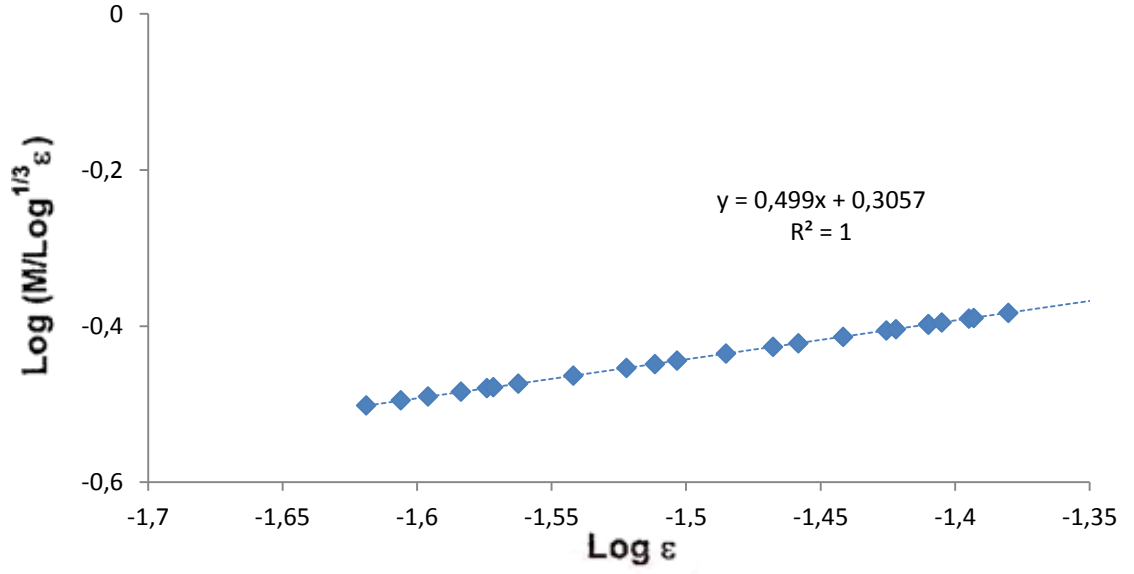
Şekil 4.15.  $L=28$  örgü boyutunda  $\log M$ 'nin  $\log \varepsilon$  karşı grafiği. Grafiğin eğiminden  $\beta'=0,3818(\pm 0,0001)$  elde edilir.



Şekil 4.16.L=24 örgü boyutunda  $\log(M/\log \epsilon^{1/3}) - \log \epsilon$  grafiği. Grafiğin eğiminden  $\beta=0,4983(\pm 0,0001)$  elde edilir.



Şekil 4.17.L=26 örgü boyutunda  $\log(M/\log \epsilon^{1/3}) - \log \epsilon$  grafiği. Grafiğin eğiminden  $\beta=0,4987(\pm 0,0001)$  elde edilir.



Şekil 4.18. L=28 örgü boyutunda  $\log(M/\log \epsilon^{1/3}) - \log \epsilon$  grafiği. Grafiğin eğiminden  $\beta=0,499(\pm 0,0001)$  elde edilir.

Tablo 4.2. L=24, 26, 28 periyodik sınır şartlı örgü boyutlarının simülasyon çalışmaları sonucu hesaplanan düzen parametresinin kritik üsleri ( $\beta$ ,  $\beta'$ )

| L  | $\beta(T_c^X(L))$ | $\beta(T_c^X(\infty))$ | $\beta'(T_c^X(L))$ | $\beta'(T_c^X(\infty))$ |
|----|-------------------|------------------------|--------------------|-------------------------|
| 24 | 0.4983±0,0001     | 0.5007                 | 0.3778±0,0013      | 0.4022                  |
| 26 | 0.4987±0,0001     | 0.5006                 | 0.3783±0,0013      | 0.4025                  |
| 28 | 0.499±0,0001      | 0.5005                 | 0.3818±0,0001      | 0.4036                  |

Tablo 4.2 'de verilen kritik üs değerleri literatür ile uyum içerisinde ve örgü boyutu artışının kritik üsler üzerine etkisi görülmektedir.

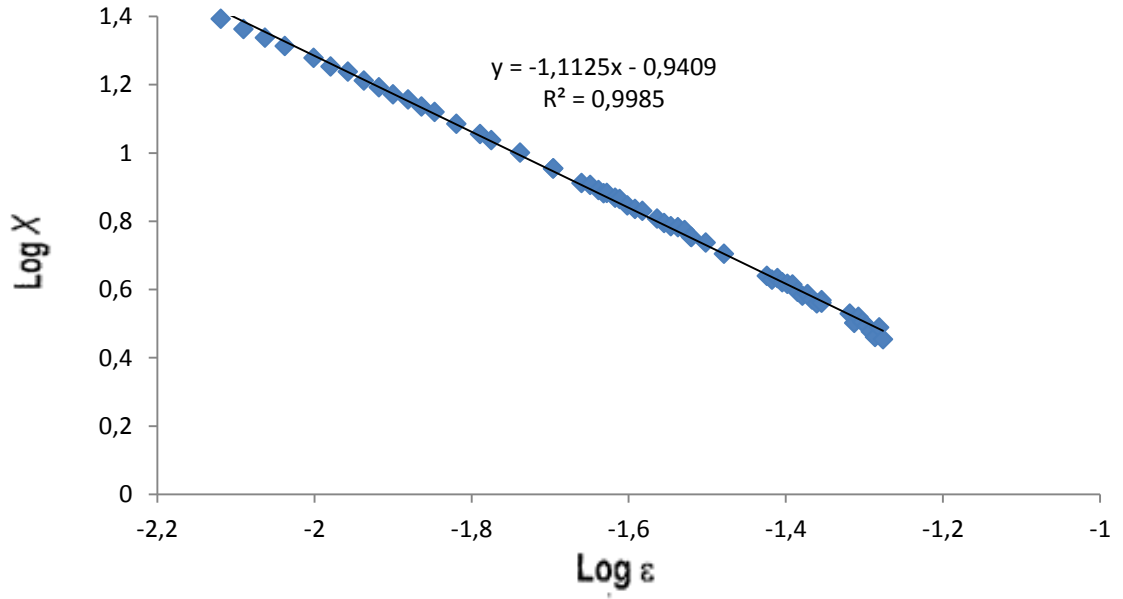
#### 4.2.1. Manyetik Alınganlık Kritik üssü $\gamma$ ve $\gamma'$

Manyetik alınganlık kritik üssü  $\gamma$  ve  $\gamma'$  olup, iki boyutlu Ising model için  $\gamma = \gamma' = 1.75$ , üç boyutlu Ising Model için  $\gamma = \gamma' = 1.25$ , dört boyutlu Ising model için  $\gamma = \gamma' = 1.02$  dir. Renormalizasyon grup teorisine göre manyetik alınganlığın indirgenmiş sıcaklığa bağlı ifadesi

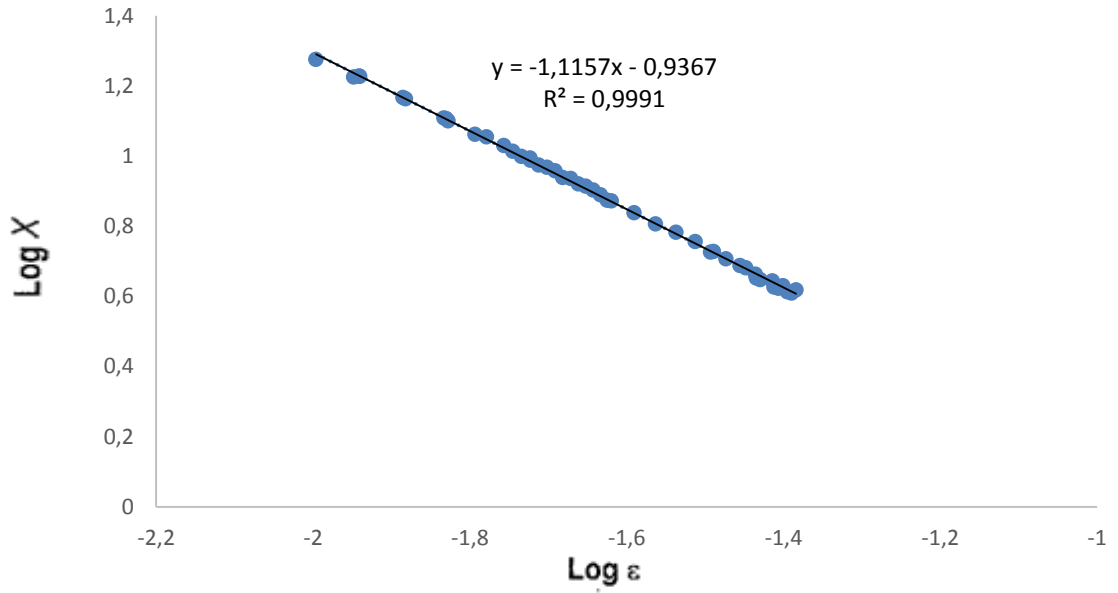
$$\chi \propto \varepsilon^{\gamma'} \quad T < T_c \quad (4.3)$$

$$\chi \propto \varepsilon^{\gamma} \log \varepsilon^{1/3} \quad T < T_c \quad (4.4)$$

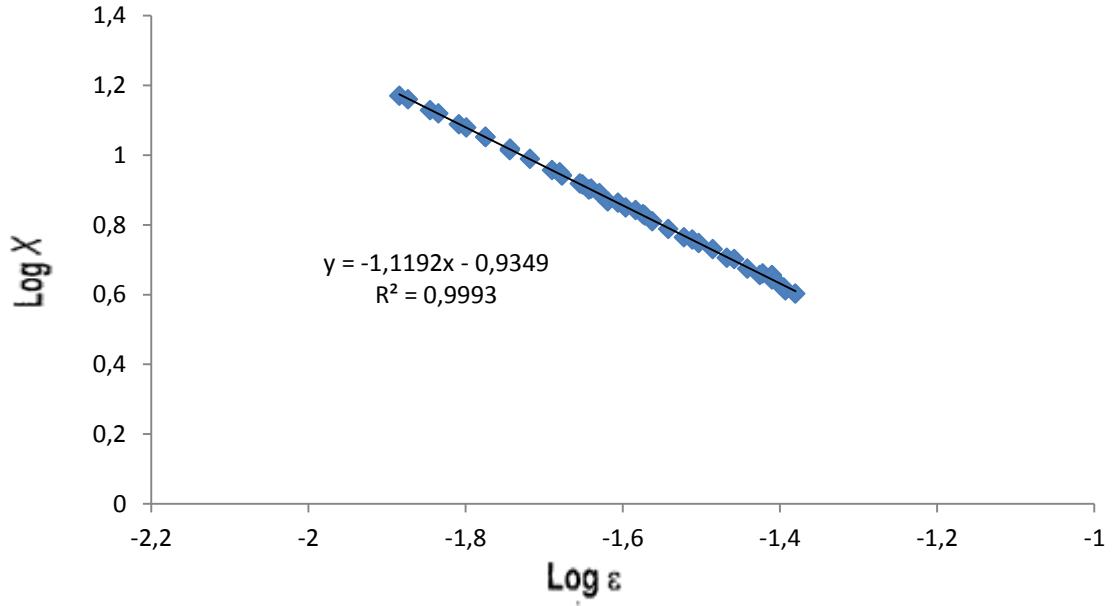
ile verilmektedir. Burada,  $\varepsilon$  indirgenmiş sıcaklık olup  $\varepsilon = (T - T_c)/T_c$  dir ve yaklaşık  $0,001 < \varepsilon < 0,1$  aralığındadır. L=24, 26 ve 28 örgüleri için sonlu örgü kritik sıcaklık değerleri kullanılarak  $\log \chi - \log \varepsilon$  'a göre ve  $\log(\chi/\log \varepsilon^{1/3}) - \log \varepsilon$  'a göre grafikleri sırasıyla Şekil 4.19, Şekil 4.120, Şekil 4.21, Şekil 4.22, Şekil 4.23, Şekil 4.24' de verilmiştir. Grafiklerin eğiminden örgülere ait sonlu örgü  $\gamma$  ve  $\gamma'$  kritik üs değerleri belirlenmiştir. Benzer şekilde sonsuz örgü kritik sıcaklıkları ( $T_c(\infty)$ ) kullanılarak, sonsuz örgü kritik üs değerleri hesaplanmıştır. Hesaplanan kritik üsler Tablo 4.3 de verilmiştir.



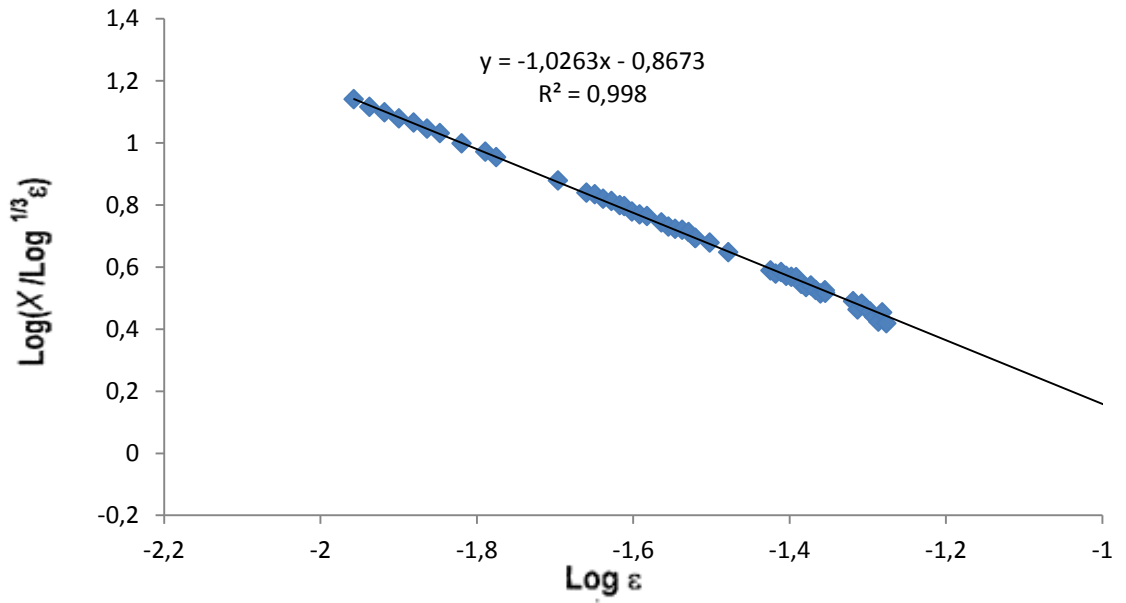
Şekil 4.19.  $L=24$  örgü boyutunda  $\text{Log } \chi$ - $\text{Log } \varepsilon$  karşı grafiği. Grafiğin eğiminden  $\gamma' = -1,1125(\pm 0,0015)$  elde edilir



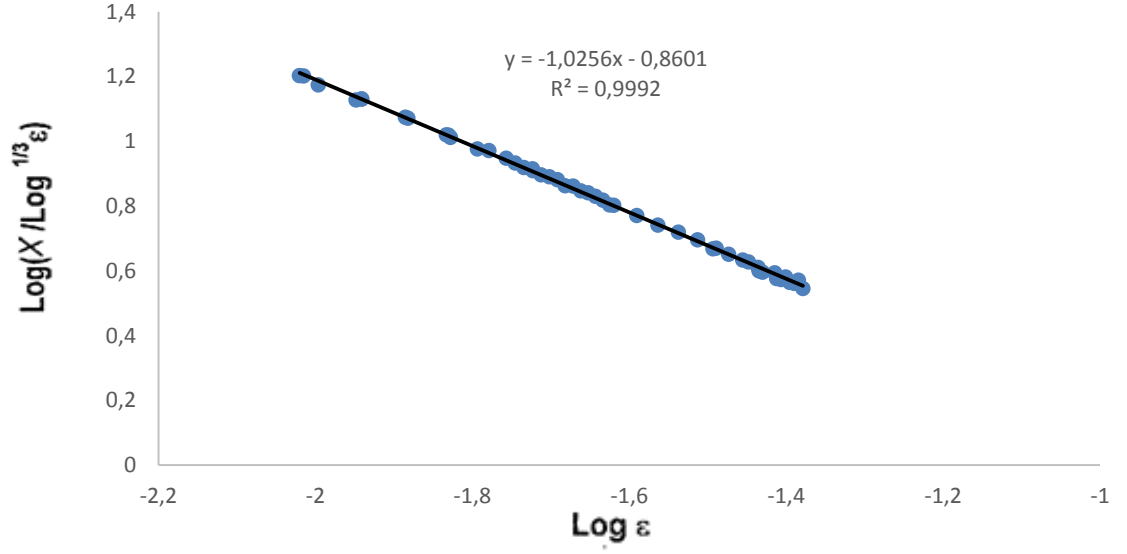
Şekil 4.20.  $L=26$  örgü boyutunda  $\text{Log } \chi$ - $\text{Log } \varepsilon$  karşı grafiği. Grafiğin eğiminden  $\gamma' = -1,1157(\pm 0,0009)$  elde edilir.



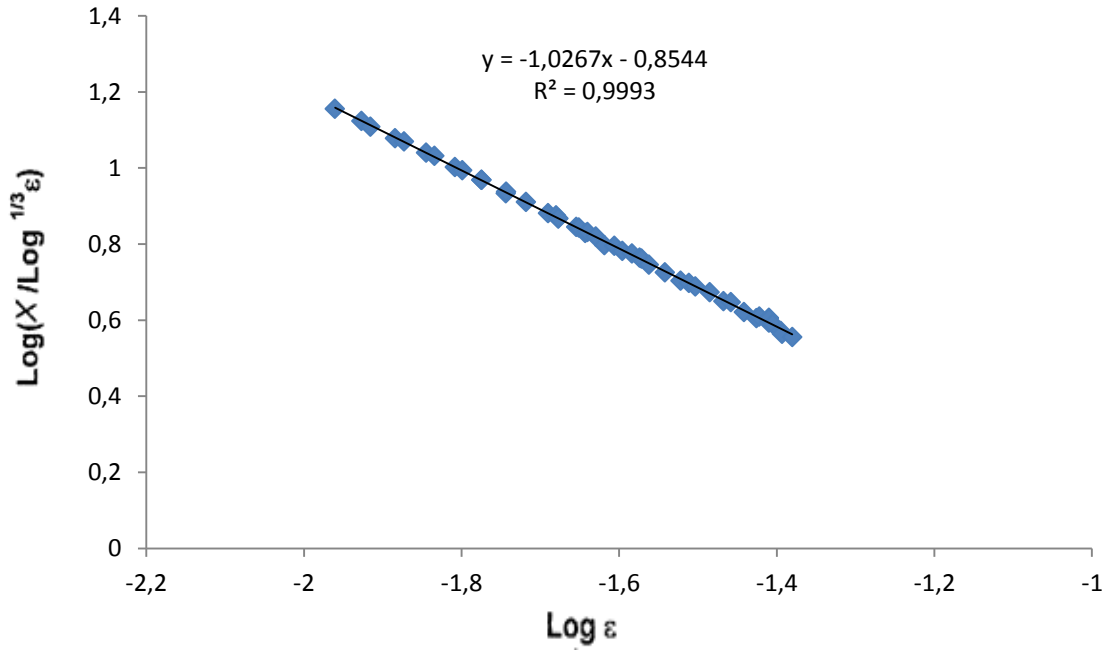
Şekil 4.21.  $L=28$  örgü boyutunda  $\text{Log } \chi$ - $\text{Log } \varepsilon$  karşı grafiği. Grafiğin eğiminden  $\gamma' = -1,1192(\pm 0,0007)$  elde edilir.



Şekil 4.22.  $L=24$  örgü boyutunda  $\text{log}(\chi/\text{log } \varepsilon^{1/3})$  -  $\text{log } \varepsilon$  karşı grafiği. Grafiğin eğiminden  $\gamma = -1,0263(\pm 0,0002)$  vermektedir.



Şekil 4.23. L=26 örgü boyutunda  $\log(\chi/\log \epsilon^{1/3})$  -  $\log \epsilon$  karşı grafiği. Grafiğin eğiminden  $\gamma = -1,0256(\pm 0,0008)$  elde edilir.



Şekil 4.24. L=28 örgü boyutunda  $\log(\chi/\log \epsilon^{1/3})$  -  $\log \epsilon$  karşı grafiği. Grafiğin eğiminden  $\gamma = -1,0267(\pm 0,0007)$  elde edilir.

Tablo 4.3. L=24, 26, 28 periyodik sınır şartlı örgü boyutlarının simülasyon çalışmasında elde edilen düzen parametresinin kritik üsleri ( $\gamma, \gamma'$ )

| L  | $\gamma (T_c^X(L))$ | $\gamma (T_c^X(\infty))$ | $\gamma' (T_c^X(L))$ | $\gamma' (T_c^X(\infty))$ |
|----|---------------------|--------------------------|----------------------|---------------------------|
| 24 | -1,0263±0,0002      | -1,0451                  | -1,1125±0,0015       | -1,1388                   |
| 26 | -1,0256±0,0008      | -1,0412                  | -1,115±0,0009        | -1,131                    |
| 28 | -1,0267±0,0007      | -1,0321                  | -1,119±0,0007        | -1,1244                   |

Tablo 4.3 'de verilen kritik üs değerleri literatür ile uyum içerisindedir ve örgü boyutu arttıkça kritik üsler teorik değer ile daha iyi uyum göstermektedir.

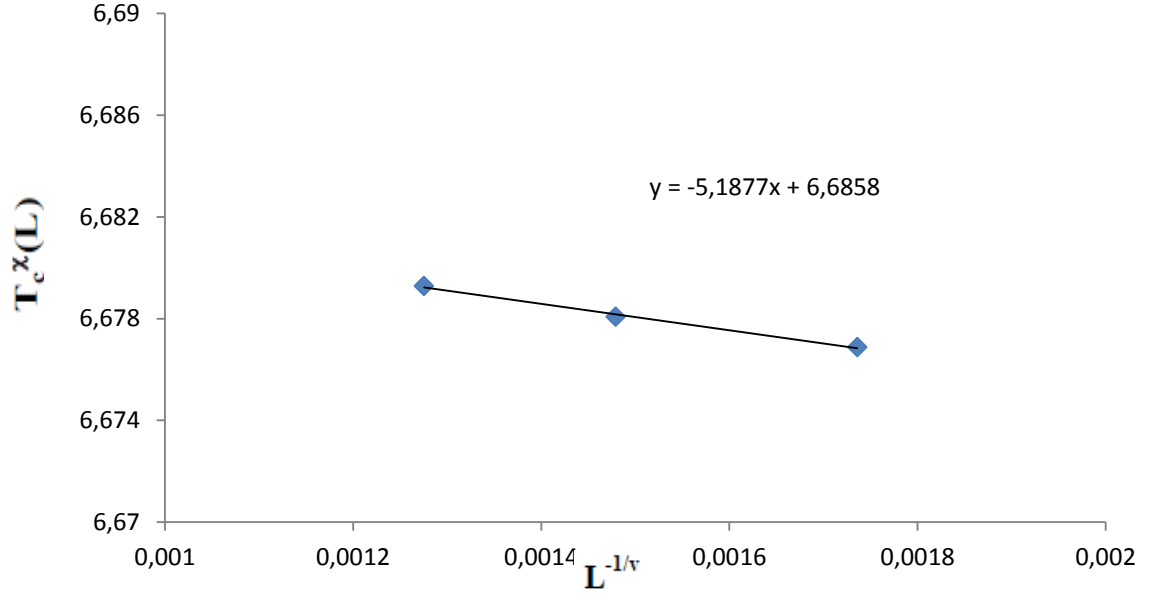
#### 4.3. Sonlu Örgü Sıcaklık Değerinden Sonsuz Örgü Sıcaklık Değerinin Belirlenmesi

Her bir örgü için manyetik alınganlık ve özışının maksimumuna karşılık gelen sıcaklık sonlu örgü kritik sıcaklığıdır. L=24, 26, 28 örgüleri için sonlu örgü maksimumlarından elde edilen  $T_c(L)$  sonlu örgü kritik sıcaklıkları Tablo 4.1' de verilmiştir. Kritik sıcaklığın boyuta bağımlılığı sonlu örgü ölçekleme teorisiyle ( $L^{1/\nu}$ ,  $\nu=0,5$ ) ile verilmektedir. Ayrıca çok küçük miktarda değişen bir logaritmik faktöre ( $\log L^{-1/6}$ ) sahiptir.

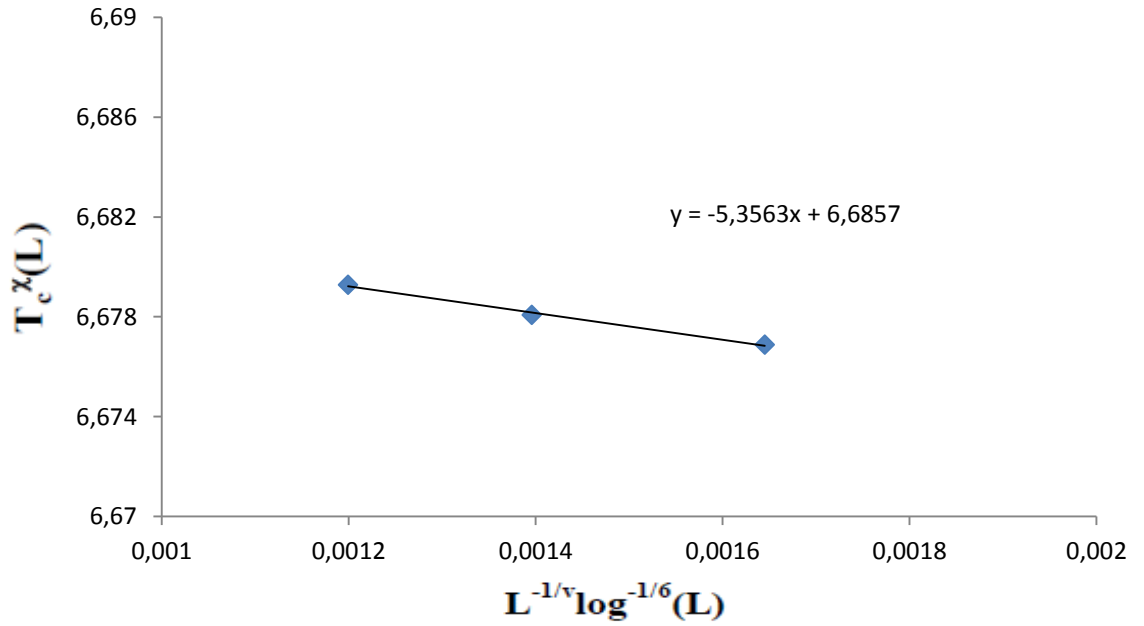
$$T_c(\infty) - T_c(L) = L^{-1/\nu} \log L^{-1/6} \quad (4.5)$$

Manyetik alınganlık değerlerinden elde edilen bu kritik sıcaklık değerlerinin  $L^{-1/\nu}$  ve  $L^{-1/\nu} \log^{-1/6} L$  ( $\nu=0,5$ )' ye karşı grafikleri Şekil 4.25 ve Şekil 4.26 'da verilmiştir.



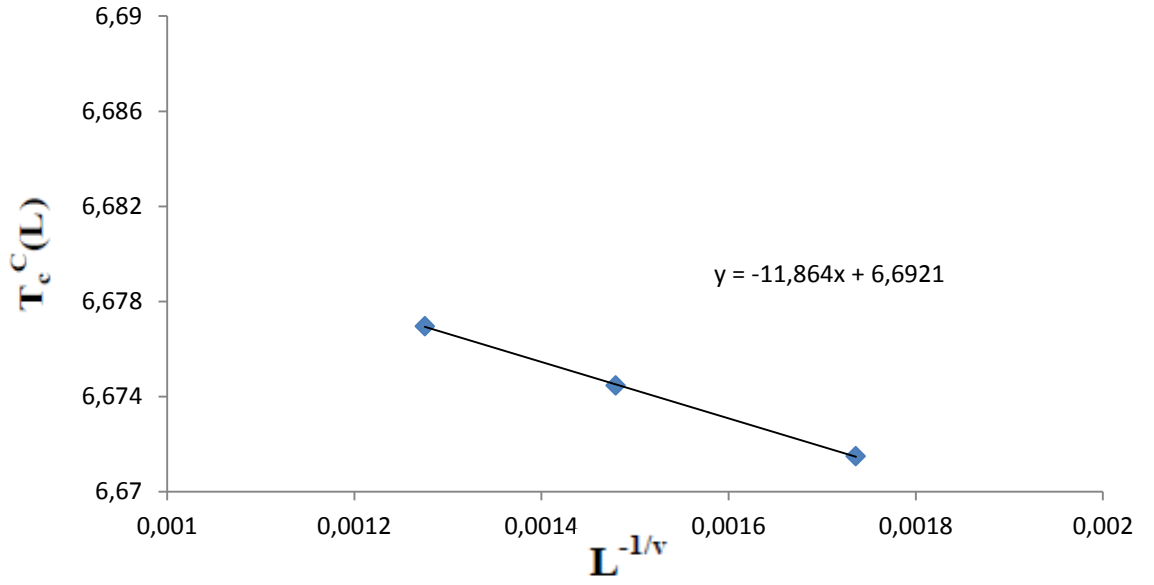


Şekil 4.25. Sonlu örgülerin manyetik alınganlık kritik sıcaklığı  $T_c^\lambda(L)$ ' ye karşı  $L^{-1/\nu}$  grafiği ( $\nu=1/2$ )

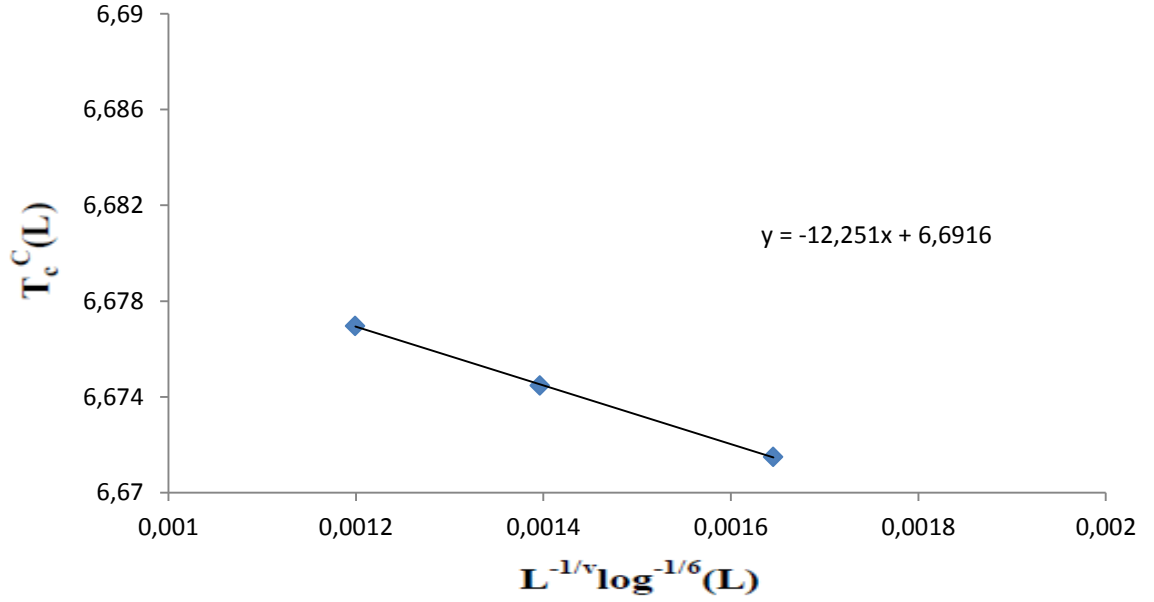


Şekil 4.26. Sonlu örgülerin manyetik alınganlık kritik sıcaklığı  $T_c^\lambda(L)$ ' ye karşı  $L^{-1/\nu} - L^{-1/\nu} \log^{-1/6} L$  grafiği ( $\nu=1/2$ )

Özısı maksimumlarından elde edilen kritik sıcaklık değerlerinin  $L^{-1/\nu}$  ve  $L^{-1/\nu} \log^{-1/6} L$  ( $\nu=0,5$ )' ye karşı grafikleri Şekil 4.27 ve Şekil 4.28 'de verilmiştir.



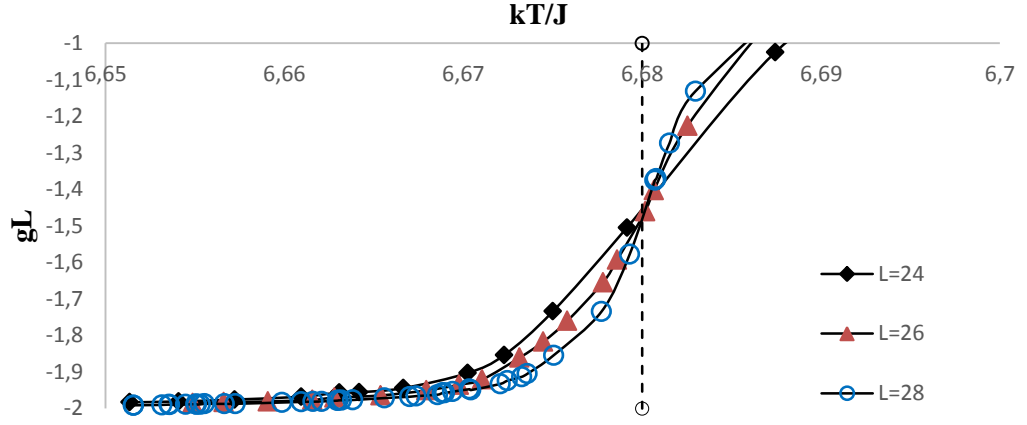
Şekil 4.26. Sonlu örgülerin özısı kritik sıcaklığı  $T_c^C(L)$ 'ye karşı  $L^{-1/\nu}$  grafiği ( $\nu=1/2$ )



Şekil 4.27. Sonlu örgülerin özısı kritik sıcaklığı  $T_c^C(L)$ 'ye karşı  $L^{-1/\nu} - L^{-1/\nu} \log^{-1/6}L$  grafiği ( $\nu=1/2$ )

Sonsuz örgü kritik sıcaklığını belirlemenin bir diğer yolu Binder parametresi-Sıcaklık grafiğini incelemektir.  $L=24$ ,  $L=26$ ,  $L=28$  örgüleri için  $g_L -$

$kT/J$  grafiđi Őekil 4.29 'da verilmektedir. Farklı örgüler için çizilen  $g_L$  'ye karşı  $kT/J$  grafiđinde belirli bir noktada kesiŐen eđriler o noktadan sonra birbirinden ayrılmaktadır. Örgülerin  $g_L$  eđrilerinin birleŐtiđi bu noktada sonsuz örgü kritik sıcaklık deđerini  $T_c = 6,68$  Őeklinde vermektedir.



Őekil 4.28.  $L=24$ ,  $L=26$ ,  $L=28$  Sonlu örgülerinde Binder parametresi  $g_L$  'nin sıcaklık ile deđiŐim grafiđi

## 5. SONUÇ

Bu tez çalışmasında Ising modeli için, doğrusal boyutu  $L=24,26,28$  olan periyodik sınır şartlı örgülerde ve sonsuz örgü kritik sıcaklığı yakınında kinetik enerji bitleri yerine kinetik enerji değişkeni kullanılarak Creutz Cellular Automaton ile simülasyonlar yapılmıştır. Kinetik enerji değişkeni kullanılarak Creutz Cellular Automaton algoritması ile  $L=24, 26, 28$  örgülerde yapılan simülasyon sonuçlarında sıcaklık, manyetizasyon, manyetik alınganlık, özısı ve Binder parametresi gibi termodinamik nicelikler çıkış parametresi olarak elde edilmiştir. Sonlu örgü ölçekleme bağlantıları kullanılarak, sonsuz örgü kritik sıcaklık değerleri, manyetizasyon, manyetik alınganlık ve özısı için kritik üstler hesaplanmıştır. Bu çalışmada , sonsuz örgü davranışı gösteren kritik örgü uzunluğunu belirlemede örgü boyutu attırmanın etkisi ve gerekliliği gösterilmiştir. Sonuçlar literatür de taranan diğer çalışmalarla ve evrensel parametrelerle uyumludur.

## KAYNAKLAR

- [1] Yeomans, J. M. *Statistical Mechanics of Phase Transitions*, Clarendon Pres, Oxford 1-141, 1992.
- [2] F, Emen, +3 Değerli Demir Ve Nikel İyonları İçeren  $LiFe_{1-x}Ni_xO_2$  Bileşiklerinin Manyetik Özellikleri. Yüksek Lisans Tezi. Çukurova Üniversitesi, Adana, 2005
- [3] Serway, A. R., *Fen ve Mühendislik için Fizik Modern Fizik ilaveli*, Çeviri Editörü, Kemal Çolakoğlu, Palme Yayıncılık, Ankara, 855-863, 1996.
- [4] Kürkcü, C, *Dış Manyetik Alan Varlığında Dört Boyutlu Ising Modelinin Creutz Cellular Automaton'ı ile Simülasyonu*, Yüksek Lisans Tezi Kırıkkale Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kırıkkale, 2010
- [5] B, Özçelik, 1986. *Oda Sıcaklığında Manyetik Maddelerin Miknatıslanmasını Ferromanyetizma Ölçen Bir Magnetometre Yapımı Kalibrasyonu ve Ön Ölçümler*, Yüksek Lisans Tezi. Çukurova Üniversitesi, 2008
- [6] Binney.J.J., Dowrick, N.J., Fisher, A.J., and Newman, M. E. J., *The Theory of Critical Phenomena*. Clarendon Press, Oxford, 1992.
- [7] Ising, E., Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus, Z. Physik, 31:253-258, 1925.
- [8] Blume, M., Emery, V.J., Griffiths, R.B., *Ising Model for the  $\lambda$  transition and phase separation in He3-He4 mixtures*, Phys. Rev. A, 4: 1071-1077, 1971.
- [9] Rosengren, A., Häggkvist, R., *Rigorous solution of a two-dimensional Blume-Emery-Griffiths model*, Phys.Rev.Lett., 63: 660-663, 1989.
- [10] 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.
- [11] Shick, M., Shih, W.H., *Spin-1 model of a microemulsion*, Phys. Rev. B, 34:1797-1801, 1986.
- [12] 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.
- [13] 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.
- [14] 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.

- [15] 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.
- [16] 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*, Chinese Phys.Lett., 23: 2526-2529, 2006.
- [17] 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.
- [18] Merdan, Z., *Altı Boyutlu Ising Modelin Creutz Cellular Automaton"ında İncelenmesi*, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 1-102, 2003.
- [19] Frenkel, D., Smit, B., *Understanding Molecular Simulation: from Algorithms to Applications*, Academic Press, 204, 1996.
- [20] Mülazımoğlu Kızılırmak G., *Dört boyutlu ising modelin (18,20,22 ) ve (18,20,22 )örgülerinde Creutz Cellular Automaton ile incelenmesi*, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 2009
- [21] Pearson, R. B., Richardson, J. L. and Toussaint, D., "A fast processor for Monte Carlo simulation", J. Comput.Phys., 51:241-246 1983
- [22] Frenkel, D., *Molecular Dynamics simulation of statical mechanical system*, Proceedings of The International School of Physics. Ed: G Ciccotti and W.G Hoover, Nort Holland ,151-180 (1986).
- [23] Spohn, H., *Molecular Dynamics simulation of statistical mechanical systems*, Proceedings of The International School of Physics, Ed: G. Ciccotti and W. G Hoover, Nort Holland, 304-352 (1986).
- [24] Hermann, D. W., *Computer Simulation Methods in Theoretical Physics*, Springer-Verlag, 1-148, 1989.
- [25] Hermann, H. J., *Fast algorithm for the simulation of Ising model* J.stat. Phys., 45:145-151 (1986).
- [26] 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.
- [27] Metropolis, N. , Rosenbluth, A. W. , Rosenbluth, M. N. , Teller, E. , *Equation of State Calculations by Fast Computing Machines*, J. Chem. Phys., 21, 1087,1953.
- [24] Creutz, M., *Microcanonical Monte Carlo Simulation*, Phys. Rev. Lett., 50,1411, 1983.

- [25] Creutz, M., *Deterministic Ising Dynamics* Ann. Phys.,167,62, 1986
- [26] Wolfram, S., *Theory and Applications of Cellular Automaton*, World Scientific, 1-50, 91-125, 343-357, 1986.
- [27] Wolfram, S., *Universality and Complexity in cellular Automaton*, Physica D,10.1, 1984.
- [28] Wolfram, S., *Statistical Mechanics of Cellular Automaton*, Rev. Mod. Phys., 55:601-651, 1983.
- [29] Vichniac, G.Y.,*Simulating physics with cellular automaton*, Physica D 10,96,1984
- [30] Vichniac, G.Y., *Simulating Physics with Cellular Automaton*, Physica D, 10: 96-116, 1984.
- [31] Pomeau, Y., *Invariant in Cellular Automata*, J. Phys.A: Math. Gen., 17:415-418, 1984.
- [33] Aktekin, N., *The simulation of the Ising Model on the Creutz Cellular Automaton*, Annual Reviews of Computational Physics Vol. VII, edited by D. Stauffer, World Scientific, Singapor, 2000.
- [34] Kıran, H., *Beş boyutlu Ising Modelinde düzen Parametresi İhtimaliyet Dağılımı için Sonlu Örgü Ölçekleme Bağlantısı*, Yüksek Lisans Tezi Kırıkkale Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kırıkkale, 2012
- [35] Erdem. İ., *Spin-1/2 Ising modelinin “Creutz Cellular” Automaton programının incelenmesi*, Yüksek Lisans Tezi, Pamukkale Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Denizli, 2006.
- [36] Hohné, F. J. W., “*Lecture notes in Physics*”, *Critical Phenomeno*, Springer-Werlog, 86-89 (1983)
- [37] Huang, K., *Statistical Mechanics*, John Wiley and Sons, Inc., 341-398, 1987.
- [38] Aktekin, N., *The finite-size scaling functions of the four-dimensional Ising model*, Journal Of Statistical Physics, 104:1397-1406, 2001.
- [39] Aktekin N., Gunen A., Saglam Z., *A finite-size scaling study of the fourdimensional Ising model on the Creutz cellular automation*, Int. J. Mod. Phys. C, 10, 621-633, 1999.
- [40] Mülazımođlu, G., Duran, A., Merdan Z. and Günen A., *The effect of theincrease of linear dimensions on exponents obtained by finite-size scaling relations for the four-dimensional Ising model on the creutz cellular automaton*,Modern Physics Letters B, 22:1329-1341, 2008

- [41] Merdan, Z., Boyacıoğlu, B., Günen, A., and Sağlam, Z., *The Simulation of the Four-Dimensional Ising Model on the Creutz Cellular Automaton*, Bulletin of Pure and Applied Sciences, 22 (2):95-100, 2003
- [42] Aktekin, N., *Simulation of the Four Dimensional Ising Model on the Cellular Automaton*, Physica A, 232: 397-407, 1996.
- [43] Aktekin, N., *The finite-size scaling functions of the four-dimensional Ising model*, G.Ü. Fen Bil. Der., 17(3):59-70, 2004.
- [44] Merdan, Z., Gunen A., Cavdar S., *Dynamical finite-size scaling function of the four dimensional Ising model for Creutz algorithm*, Physica A-Statistical Mechanics And Its Applications, 359:415-422, 2006.
- [45] Voronel, A. (25 Ocak 2016). Journal of Experimental and theoretical Physics Erişim:<http://www.jetp.ac.ru/cgi-bin/e/index?a=s&auid=416369>
- [46] Kutlu, B., *İki boyutlu Ising modelin Creutz cellular automaton ile incelenmesi*, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 1-12 (1995).
- [47] 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), 1997.
- [48] 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.
- [49] Onsager, L., *Crystal Statistics I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition*, Phys. Rev. 65: 117, 1944.
- [50] Swendsen, R. H., Wang, J-S., *Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations*, Phys. Rev. Lett., 58:86-88, 1987.
- [51] Wolff, U., *Collective Monte Carlo Updating for spin systems*, Phys. Rev. Lett.62, 361, 1989.