

ÖZET
YEDİ BOYUTLU ISING MODELİNİN
CREUTZ “CELLULAR AUTOMATON”INDA
İNCELENMESİ

Dine ATİLLE

Gaziosmanpaşa Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı

Yüksek Lisans Tezi, 74 sayfa

Danışman: Doç. Dr. Ziya MERDAN

Jüri: Prof. Dr. Abdullah GÜNEN

Jüri: Prof. Dr. İskender ASKEROĞLU

Jüri: Doç. Dr. Ziya MERDAN

Yedi-boyutlu Ising modelinin, doğrusal boyutu $L=4,6,8$ olan periyodik sınır şartlı hiperkübik örgülerde, sonsuz örgü kritik sıcaklığı yakınında ve beş “bit”li demonlar kullanılarak Creutz “Cellular Automaton”ında simülasyonu yapılmaktadır. Sonlu örgü ölçekleme bağıntıları kullanılarak daha önceki çalışmada incelenmiş olan düzen parametresi ve manyetik alınganlığa ilave olarak, özısı ve Binder parametresinin sıcaklığa bağlı değişimleri ile bu niceliklerin ölçeklenmiş değerlerinin ölçeklenmiş sıcaklığa bağlı değişimleri incelenip, bu nicelikler için teoremin öngördüğü ölçekleme bağıntıları doğrulanmıştır. Sonsuz örgü kritik sıcaklığı için manyetik alınganlık eğrilerinin kesişme noktasından, sonsuz örgü kritik sıcaklığı için özısı eğrilerinin kesişme noktasından ve Binder parametresi eğrilerinin kesişme noktasından sırasıyla $T_c^Z(\infty)=12.8709(32)$, $T_c^C(\infty)=12.8744(64)$ ve $T_c=12.87(2)$ sıcaklık değerleri elde edilmiştir. Bu değerler daha

önceki çalışmada, manyetik alınganlığın sonlu örgülerdeki maksimumlarına karşılık gelen sıcaklık değerlerinden elde edilen $T_C = 12.8700(42)$ değeri ile uyum içindedir. Özısı kritik üssü için elde edilen $\alpha = 0.011(76)$ değeri teorinin öngördüğü $\alpha = 0$ değeri ile uyumludur.

Anahtar Kelimeler: Ising modeli, “Cellular Automaton”lar, sonlu örgü ölçekleme teorisi, kritik üsler.

ABSTRACT**STUDY OF THE SEVEN-DIMENSIONAL ISING MODEL ON THE CREUTZ
CELLULAR AUTOMATON****Dine ATİLE****Gaziosmanpaşa University
Graduate School of Natural and Applied Science
Department of Physics Science****Masters Thesis, 74 Pages****Supervisor: Doç. Dr. Ziya MERDAN****Jury: Prof. Dr. Abdullah GÜNEN****Jury: Prof. Dr. İskender ASKEROĞLU****Jury: Doç. Dr. Ziya MERDAN**

The seven-dimensional nearest-neighbor Ising model is simulated on the Creutz cellular automaton by using five-bit demons and the finite-size lattices with the linear dimensions $L=4, 6, 8$. In addition to the order parameter and the magnetic susceptibility investigated in the previous study, the temperature dependence of the specific heat and the Binder parameter and the plots of the corresponding scaled quantities are obtained. The finite-size scaling relations predicted by the theory are verified. The temperature dependence and finite-size scaling plots of the Binder parameter and the specific heat verify the theoretically predicted expressions about the infinite lattice critical temperature. The approximate values for the critical temperature of the infinite lattice $T_c^{\chi}(\infty)=12.8709(32)$, $T_c^C(\infty)=12.8744(64)$ and $T_c=12.87(2)$ are obtained from the intersection points of the magnetic susceptibilities, the specific heat and the binder parameter curves, respectively.

They are in agreement with the more precise value of $T_C = 12.8700(42)$. Obtained from the maxima of the magnetic susceptibilities, of the finite-size lattices in the previous study. The value obtained for the critical exponent of the specific heat $\alpha = 0.011(76)$ is also in agreement with $\alpha = 0$ predicted by the theory.

Key words: Ising model, cellular automata, finite-size scaling theory, critical exponents.

TEŞEKKÜR

Bu çalışmamı yürütmemde değerli yardımlarını esirgemeyen kıymetli tecrübelerinden yararlandığım saygıdeğer hocam Doç. Dr. Ziya MERDAN'a sonsuz teşekkürlerimi sunarım. Tez dönemi boyunca beni motive eden destekleriyle her zaman yanımda olan Araş. Gör. Arife Seda EKENOĞLU, Araş. Gör. Erhan ESER ve Araş. Gör. Necati BAŞMAN'a teşekkürü borç bilirim.

Tezin yazılımda yardımlarını esirgemeyen en büyük destekçim eşim Murat SARIATEŞ ve hayatım boyunca gösterdikleri maddi-manevi destek ve sabırlarından dolayı değerli anne-babama en içten teşekkürlerimi sunarım.

İÇİNDEKİLER

ÖZET.....	i
ABSTRACT	iii
TEŞEKKÜR.....	v
İÇİNDEKİLER.....	vi
ŞEKİLLER LİSTESİ.....	viii
ÇİZELGELER LİSTESİ.....	x
1. GİRİŞ.....	1
2. LİTERATÜR ÖZETLERİ.....	10
2.1. Ising Modeli.....	10
2.2. Örgü Gazı.....	11
2.3. Evrensel Davranış.....	12
2.4. Ising Modelde Termodinamik Nicelikler.....	13
2.4.1. Düzen Parametresi.....	13
2.4.2. Manyetik Alınganlık.....	14
2.4.3. Özısı.....	16
2.4.4. İç enerji.....	18
2.5. Kendiliğinden Mıknatıslanma M , Manyetik Alınganlık χ ve Özısı C 'nın Sıcaklık Bağımlılıkları.....	19
2.6. Spin-Spin Korelasyon Fonksiyonu $g(r)$	20
2.7. Temel Ölçekleme Postulatu	21
2.8. Hiperkübik Örgü Geometrisi.....	23
3. MATERYAL VE METOD	27
3.1. Ising Modelinin Simülasyonu İçin Gerekli Algoritmalar.....	27
3.1.1. Metropolis Algoritması.....	27
3.1.2. Creutz'un Gezgin "Demon" Algoritması.....	28
3.2. Ising Modelinin Simülasyonu için "Cellular Automaton" lar.....	29
3.2.1. Cellular Automaton.....	29
3.2.1.1. Bir Boyutlu "Cellular Automaton" Kuralları.....	30

3.2.2. Q2R “Cellular Automaton” 1.....	32
3.2.3. Creutz “Cellular Automaton” 1.....	32
3.2.4. Demon Enerjisinin Hesaplanması.....	35
3.2.5.Creutz “Cellular Automaton” ında Termodinamik Niceliklerin Hesabı.....	41
4. ARAŞTIRMA SONUÇLARI VE TARTIŞMA.....	44
4.1. Sonlu Örgü Sıcaklık Değerinden Sonsuz Örgü Sıcaklık Değerlerinin Elde Edilmesi.....	45
4.2 Düzen Parametresinin Sıcaklık ile Değişimi ve Sonsuz Örgü Kritik Sıcaklığında Düzen Parametresinin Sonlu Örgü Ölçekleme Bağıntısı.....	48
4.3. Manyetik Alınganlığın Sıcaklık ile Değişimi ve Sonsuz Örgü Kritik Sıcaklığında Manyetik Alınganlığın Sonlu Örgü Ölçekleme Bağıntısı....	51
4.4. Özısının Sıcaklık ile Değişimi ve Sonsuz Örgü Kritik Sıcaklığında Özısının Sonlu Örgü Ölçekleme Bağıntısı.....	54
4.5. Binder Parametresinin Sıcaklık ile Değişimi ve Sonsuz Örgü Kritik Sıcaklığında Binder Parametresinin Sonlu Örgü Ölçekleme Bağıntısı...	61
KAYNAKLAR.....	65
ÖZGEÇMİŞ	

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

<u>Şekil</u>	<u>Sayfa</u>
2.1. Düzen parametresinin sıcaklıkla değişimi.....	14
2.2. Sonlu örgüler için manyetik alınganlığın T_c civarındaki davranış.....	15
2.3. Sonsuz örgüler için manyetik alınganlığın T_c civarındaki davranışı.....	15
2.4. Sonlu örgüler için özısının T_c civarındaki davranışı	17
2.5. Sonlu örgüler için özısının T_c civarındaki davranışı.....	17
2.6. 1-boyutlu hiperkübik örgü	23
2.7. 2-boyutlu hiperkübik örgü	23
2.8. 3-boyutlu hiperkübik örgü	24
2.9. 4-boyutlu hiperkübik örgü	24
2.10. 5-boyutlu hiperkübik örgü	25
2.11. 6-boyutlu hiperkübik örgü	25
2.12. 7-boyutlu hiperkübik örgü	26
3.1. Yedi boyutlu hiperkübik örgüde spinlerin ters çevrilmesi durumunda ΔH_I , Ising enerjisindeki değişimler.....	38
4.1. Manyetik alınganlık için $T_c^x(L)$ nin $L^{-d/2}$ ye karşı grafiği.....	46
4.2. Özısı için $T_c^C(L)$ nin $L^{-d/2}$ ye karşı grafiği.....	47
4.3. Manyetizasyonun sıcaklık ile değişimi.....	49
4.4. Ölçeklenmiş manyetizasyonun ölçeklenmiş sıcaklık ile değişimi.....	50
4.5. Düzen parametresinin M_c sonsuz örgü kritik sıcaklığındaki değerinin sonlu örgü doğrusal boyutuna karşı log-log grafiği ($4 \leq L \leq 8$)	51
4.6. Manyetik alınganlığın sıcaklık ile değişimi.....	52
4.7. Ölçeklenmiş manyetik alınganlığın ölçeklenmiş sıcaklık ile değişimi.....	53
4.8. Manyetik alınganlığın χ_c sonsuz örgü kritik sıcaklığındaki değerinin sonlu örgü	

doğrusal boyutuna karşı log-log grafiği ($4 \leq L \leq 8$).....	54
4.9. Özısının sıcaklık ile değişimi ($L=4,6$).....	55
4.10. Özısının sıcaklık ile değişimi ($L=6,8$).....	55
4.11. Özısının sıcaklık ile değişimi ($L=4,6,8$).....	56
4.12. Özısının singüler kısmının ölçeklenmiş sıcaklık ile değişimi.....	58
4.13. Özısının maksimum değerlerinin $C_{\max}$ sonlu örgünün doğrusal boyutuna karşı log-log grafiği ($4 \leq L \leq 8$).....	59
4.14. Özısının sonsuz örgü kritik sıcaklığındaki değeri C_c nin sonlu örgü doğrusal boyutuna karşı log-log grafiği ($4 \leq L \leq 8$).....	60
4.15. Binder parametresinin sıcaklık ile değişimi ($L=4,6$).....	61
4.16. Binder parametresinin sıcaklık ile değişimi ($L=6,8$).....	62
4.17. Binder parametresinin sıcaklık ile değişimi ($L=4,6,8$).....	62
4.18. Binder parametresinin ölçeklenmiş sıcaklık ile değişimi.....	64

ÇİZELGELER LİSTESİ

<u>Cizelge</u>	<u>Sayfa</u>
3.1. Bir boyutlu örgü için $(t+1)$. zaman adımında i . hücrenin en yakın komşuları.....	30
3.2. Hücre değişkeni iki hale sahip, bir boyutlu basit “cellular automaton” için kural 90.....	30
3.3. İki “bit”li demonların alabileceği tamsayı değerleri.....	35
3.4. Beş “bit”li demonların alabileceği tamsayı değeri.....	36
4.1. Manyetik alınganlığın maksimum olduğu sonlu örgü kritik sıcaklık değerleri.....	46
4.2.. Özısının maksimum olduğu sonlu örgü kritik sıcaklık değerleri.....	46
4.3. Yedi boyutlu Ising modelinin farklı çalışmalarda elde edilen kritik sıcaklık değerleri.....	48
4.4. Sonsuz örgü kritik sıcaklığında, $T_c = 12.8700(42)$ ve $L = 4, 6, 8$ örgülerinde düzen parametresinin değerleri.....	50
4.5. Sonsuz örgü kritik sıcaklığında, $T_c = 12.8700(42)$ ve $L = 4, 6, 8$ örgülerinde manyetik alınganlık değerleri.....	53
4.6. Özısının maksimum olduğu sonlu örgü kritik sıcaklık değerleri ile $T_c = 12.8700(42)$ sıcaklık değerine karşılık gelen özısı değerleri.....	56
4.7. Doğrusal boyut (L) aralığı için $C_L(T_c)$ nin L 'ye karşı ve C_{maks} 'ın L 'ye karşı log-log grafiklerinin eğimi.....	60
4.8. Sonlu örgü değerleri için Binder parametresi (g_L) ve özısının (C_L) sıcaklık ile değişim grafiklerinin kesim noktasından elde edilen sonsuz örgü kritik sıcaklık (T_c) değerleri.....	63

1. GİRİŞ

Kararlı yapıdaki bir maddenin sıcaklık değişimi sonucu belirli bir sıcaklıkta başka bir yapıya ani dönüşümüne faz geçişi denir. Suyun faz değiştirmesi, faz geçişi olayının en iyi bilinen örneklerdendir. Örneğin demir (Fe) kritik sıcaklığın (T_c) altında ferromanyetik özellik, kritik sıcaklığın (T_c) üstünde ise paramanyetik özellik gösterir. Faz geçişlerine örnek olarak sıvıdan gaza, normal iletkeniden süper iletkenliğe, paramanyetikten ferromanyetiğe geçişleri örnek olarak gösterebiliriz (Yeomans, 1992).

Çok sayıda elektronu bulunan atomlarda genellikle elektronların spinleri zıt yönlenecek şekilde çiftler oluşturur. Böylece spin manyetik momentler birbirlerini yok eder. Fakat tek sayıda elektronu olan atomların en azından bir tane çiftlenmemiş elektronu ve buna karşılık gelen bir spin manyetik momentini bulunur. Mıknatıslanma atomların çiftlenmemiş elektronların spinlerinden kaynaklanır.

Maddeler manyetik özelliklerine göre Ferromanyetik, Paramanyetik ve Diyamanyetik olarak gruplandırılır. Paramanyetik ve Ferromanyetik maddeler sürekli manyetik dipol momentlere sahip atomlardan oluşur. Diyamanyetik maddeler sürekli manyetik momente sahip olmayan atomlardan oluşur (Serway,1992). Ferromanyetizmayı paramanyetizmadan ayıran en önemli özellik komşu dipoller arasındaki etkileşmedir (Griffiths, 1992).

Ferromanyetik maddelere demir, kobalt, nikel gibi maddeleri örnek gösterebiliriz. Bu maddeler zayıf bir dış alan içerisinde bile manyetik dipol momentleri birbirine paralel olarak yönelmeye çalışır. Dış manyetik alan kaldırılrsa dahi mıknatıslanma devam eder. Bu sürekli yönelim komşu manyetik momentler arasındaki kuvvetli etkileşimden kaynaklanmaktadır. Ferromanyetizma aynı zamanda sıcaklığa bağlı olarak değişir. Sıcaklık arttıkça mıknatıslanma azalır ve Curie sıcaklığında (T_c) mıknatıslanma sıfır olur. Curie

sıcaklığın üstündeki sıcaklıkta madde paramanyetik faza geçer. Madde dış manyetik alan içerisine konulduğu zaman, atomik momentleri alan yönünde yönlenmeye zorlanır. Bu zorlama sırasında ayrıca termal sıcaklıktan kaynaklanan hareketler de momentleri rasgele yönlerde yönetmeye çalışır. Curie sıcaklığın altında manyetik momentler aynı yönde dizilerek böylece madde ferromanyetik olur. Curie sıcaklık civarında manyetik dipol momentlerin (spinlerin) aşağı ve yukarı yönde yönelimleri hemen hemen eşittir. Curie sıcaklığın üstünde ise manyetik momentler rasgele yönelir. Böylece madde paramanyetik hale geçer. Paramanyetik madde, manyetik dipol momentli atomların varlığından kaynaklanır. Manyetik dipol momentler birbirleri ile çok zayıf etkileşimde bulunurlar. Bu maddeler dış manyetik alan içerisine konulduğunda atomik dipoller alanla aynı yönde yönlenmeye zorlanarak madde mıknatıslanmış olur. Dış manyetik alan kaldırıldığında manyetik dipol momentler eski halini alır. Sürekli dipol momentlere sahip olmayan maddelere diyamanyetik maddeler denir. Diyamanyetik madde bir dış manyetik alan içerisine konulduğunda bu alana zıt yönde zayıf bir manyetik dipol moment oluşur ve madde mıknatıslanmış olur. Bu alanın kaldırılmasıyla manyetik dipol momentler tekrar eski halini alır (Serway, 1992).

Bu çalışmanın amacı manyetik faz geçişleri sırasında maddenin mıknatıslanmasındaki değişimleri incelemektir. Bir maddenin mıknatıslanma değeri manyetik dipol momentinin, maddenin hacmine oranına eşittir. Dipol momentler hem yörüngesel hareketten hem de spin denen elektronun iç özelliğinden kaynaklanmaktadır. Maddelerin çoğunda, atomundaki herhangi bir elektronun manyetik momenti yine aynı atomun ters yönünde dolanan diğer bir elektronun manyetik momenti tarafından dengelenerek etkisiz hale gelir. Sonuçta manyetik momente yörüngesel açısal momentten bir katkı gelmez.

Sıcaklık gibi bir termodinamik değişkenin küçük bir değişimiyle bir yada bir çok fiziksel özelliğin ani değiştiği noktada faz geçişi olayı gerçekleşmektedir. Bir sistemin enerjisi belli bir noktada süreksizliğe gidiyorsa o noktada faz geçişi olayı gerçekleşmiş demektir. Bu süreksizliğin nedeni sistemdeki çoğu parçacıkların birbirleri ile etkileşmesinden kaynaklanmaktadır. Birinci dereceden faz geçişi ve sürekli faz geçişi

olmak üzere iki tür faz geçişi vardır. Birinci dereceden faz geçişinde, termodinamik değişkenli serbest enerjinin birinci türevi süreksizliğe sahiptir. Sürekli faz geçişinde ise serbest enerjinin ikinci türevinde bir süreksizlik vardır. İkinci dereceden faz geçişine örnek olarak Ferromanyetik geçişi, Süper akışkanlık geçişi ve Bose-Einstein yoğunlaşmasını gösterilebilir (Merdan, 2003).

İstatistik mekanikteki spin modelleri, faz geçişinde ortak özellikler bulunmasında etkin rolü vardır. Fizik, kimya, biyoloji işletme gibi çoğu alanda kullanılmaktadır. Fizikte manyetik sistemlerin modellenmesinde büyük rol oynamaktadır.

Fiziksel olayları incelemede model kurmak, modelin gelişimini sağlamak, elde edilen gelişimden sonuçlar elde etmek ve bu sonuçları değerlendirmek teorik çalışmanın yapısını oluşturur. Teorik model sisteme uygulanır ve böylelikle sistemin fiziksel özellikleri tespit edilmiş olur. Fiziksel sistemlerin davranışlarını incelemek için birçok model tanımlanmıştır. Ising model, Örgü gazı, Heisenberg modeli önde gelen modellerdendir. Faz geçişi yapan sistemleri temsil eden, spinler arası etkileşimleri inceleyen model Ising modelidir. Ising model, ferromanyetik maddelerin termodinamik davranışları inceleyen bir modeldir. Ising modelinin en basit hali spin-1/2 Ising modeli olup iki duruma ve bir tane düzen parametreye sahip sistemden oluşur (Huang, 1987). Ayrıca üç durumlu iki tane düzen parametrelili Blume-Emery-Griffiths modeli olarak da adlandırılan spin-1 modeli de vardır (Blume, 1971; Mahan and Girvin, 1977; Jain and Landau, 1980; Yeomans, 1992; Honda, 1993; Badehdah et al., 1999; Keskin and Ekiz, 2000; Kutlu, 2001). En genel hamiltoniyen;

$$H = -H_s \sum_{j=1}^N S_j - H_Q \sum_{j=1}^N Q_j + \Delta \sum_{j=1}^N S_j^2 - J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - H_3 \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j (S_i + S_j) \quad (1.1)$$

şeklinde verilir. Burada $\langle ij \rangle$ en yakın komşu çifti, H_s ; dipol(iki kutuplu) momentten meydana gelen manyetik alan, H_Q ; kuadrupol(dört kutuplu) momentten meydana gelen manyetik alan, N örgü noktaları sayısı, Δ : Kristal alan etkileşme sabiti, J : Spinler arası

etkileşme sabiti, K : Bikuadratik değişme için etkileşme sabiti ve H_3 : üçüncü dereceden manyetik pertürbasyonu göstermektedir.

Bu tez çalışmasında Ising modelinin en basit hali olan iki durumlu bir tane düzen parametrelili bir sisteme sahip olan spin-1/2 Ising modeli ele alınmıştır. Spin-1/2 Ising modelinin bir boyutlu hali Ising tarafından 1925 yılında çözülmüştür.

Peryodik sınır şartları altında sonsuz kare örgü için Ising modelin tam çözümü Onsager (1944) tarafından gerçekleştirilmiştir. Boyutun faz geçişleri üzerindeki etkileri incelemek için uzay boyutu (d) ve örgü boyutu (L) artırarak pek çok çalışma yapılmıştır (Aktekin, 1996; Merdan and Aktekin, 2002; Merdan et al.,2005; Merdan et al., 2003; Merdan and Atille, 2006). Sonlu örgüler için Ising modelin analitik çözümü olmadığı için simülasyon tekniklerine başvurulmaktadır (Duran, 2005).

Ising model faz geçişi yapan sistemleri temsil eder. Faz geçişi olan sistemler için geliştirilen modelleri çözmek çok zordur. Her durumda tam çözümler elde edilememiştir. İki boyutlu uzayda Ising model Onsager (1944) tarafından manyetik alanın sıfır olduğu durumda tam olarak çözülmüş ancak manyetik alanın olduğu iki boyutlu Ising modeli ile üçten büyük boyutlu Ising modeller gibi tam çözümü yapılamayan modellere yaklaşımlar yaparak çözülebilir. Bu çözümlerin doğruluğunu kanıtlamak ve desteklemek açısından simülasyon önemlidir. Simülasyon, gerçek bir sistemin modelini tespit etmek ve sistemin işlemesi için sistemin davranışlarını anlamak amacıyla model üzerinde denemeler yapmaktadır. Simülasyon yöntemi, yüksek hassasiyetlik gerektiren ve karmaşık sistemlerin laboratuvar ortamında incelenmesi hem teknik açıdan çok zor hem de ekonomik açıdan pahalı ve çok zaman alması sebebiyle deneysel çalışmaların bilgisayar ortamında yapılabilmesi mümkün kılmakta ve sistemin termodinamik özelliklerin anlaşılmasını sağlamaktadır. Simülasyonu tamamlama süreci deneylerin yapılma süresinden çok daha kısa sürer. Yani simülasyon sonuçları, teorik sonuçların yanı sıra gerçek deney sonuçları ile de test edilir (Frenkel and Smit, 1996; Karabacak, 2001).

Monte Carlo (Frenkel and Smit, 1996; Creutz, 1983; Hoogland et al., 1983; Pearson et al., 1983) ve Molekül Dinamiği (Spohn, 1983; Frenkel, 1986) metotları en önemli simülasyon metotlarıdır (Merdan, 2003).

Monte Carlo yaklaşımında önceden bilinen sıcaklık, giriş parametresi olarak kullanılmakta ve bilgisayar ısı deposu gibi davranmaktadır. Bu yaklaşımda rasgele sayı üretici kullanılır. Hesaplamanın sonuçları büyük ölçüde kullanılan rasgele sayı üreticisine bağlıdır. Başlangıçta tüm spinler aynı yönde alınarak, sabit sıcaklıkta bu spinlerin teker teker durumları değiştirilir. Durumu değiştirilecek spin gelişi güzel seçilir. Algoritma, herhangi bir konfigürasyona rastlama ihtimali Boltzman dağılımına uyacak şekildedir.

Molekül Dinamiği yöntemi Monte Carlo yönteminin bir alternatifidir (Binney et al., 1992). Molekül Dinamiği simülasyonunu (Creutz, 1986; Merdan, 2003) uygulamak için sistemin bir çok parametreden oluşması gerekir. Molekül Dinamiğinde rasgele sayı üretici kullanılmaz. Sistemin belli kurala bağlı gelişimi uygun bir Hamiltoniyen yardımıyla gerçekleştirilmektedir. Molekül Dinamiği özellikle katıların ve sıvıların molekül yapılarını, enerji ve hareketleriyle “bulk” (parçacık sayıların sonsuz olduğu durum) özelliklerinin ayrıntılı şekilde araştırılmasına imkan tanır. Zamana bağlı olarak atom ve moleküllerin konum, hız, yönelimlerin durumu hakkında bilgi simülasyon yoluyla elde edilir. Molekül Dinamik simülasyonunda sisteme uygun potansiyel seçilir, hareket denklemlerini çözecek algoritma iyi kurulduğu takdirde sağlıklı çalışmalar elde edilebilmektedir. Molekül Dinamiğinde kuralın uygulandığı hücrenin, hacminin ve hücre içindeki parçacık sayısının korunuyor olması gerekmektedir. Toplam kinetik enerji;

$$E_k = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \frac{P_i^2}{m_i} \quad (1.2)$$

ve sistemin potansiyel enerjisi;

$$U(r) = \sum_{i < j} U(r_{ij}) \quad (1.3)$$

şeklindedir. Burada i ve j parçacıklar arasındaki uzaklığı göstermektedir. Sistemin Hamiltoniyeni aşağı şekilde ifade edilir.

$$H = \frac{1}{2} \sum \frac{P_i^2}{m_i} + \sum_{i < j} U(r_{ij}) \quad (1.4)$$

Metropolis ve arkadaşları tarafından 1952 yılında geliştirilen Markov yöntemi önemli algoritmalarından biridir (Metropolis et al., 1953; Binney et al., 1992). Metropolis ve arkadaşlarının algoritması ile Molekül Dinamik algoritması arasında yer alan diğer simülasyon yöntemi Creutz (1983) tarafından geliştirilmiştir. İki boyutlu uzayda Ising modelinin deterministik bir “Cellular Automaton” ile simülasyonu Creutz (1986) tarafından gerçekleştirilmiştir. Creutz bu modelinde kare hücreli örgü kullanmıştır. Örgünün her hücresi dört ikili “bit”lere karşı gelmektedir. Her hücredeki değişkenin alabileceği değerler, bir önceki zaman adımındaki kendi değeri ile ona en yakın komşunun değişkenleri değerinden elde edilmektedir. Bu dört ikili “bit” den ilki, Ising spinidir (B_i); “0” veya “1” değerlerini alabilir. Dış manyetik alanın olmadığı ($H = 0$) durumda $S_i = 2B_i - 1$ olmak üzere Ising spin enerjisi H_I aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır.

$$H_I = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad (1.5)$$

Burada $\langle ij \rangle$ örgü hücrelerinin en yakın koşuları üzerinden toplamdır. İkinci ve üçüncü “bit” spine eşlik eden momentuma (demon) karşılık gelmektedir. Bu bitler D_{1i} ve D_{2i} ile gösterilir. Bu bitler sıfırdan üçe kadar olan tamsayı değerleri alırlar. Bu tamsayı değerlerin dört katı kinetik enerjiyi (H_k) verir.

$$H_k = 4(D_{1i} \times 2^0 + D_{2i} \times 2^1) \quad (1.6)$$

Kinetik enerji bu değerleri aldığıında, bir spin ters çevrildiğinde sistemin Ising enerjisinde oluşabilecek en büyük enerji değişimi ($|\Delta E_I| = 8$) karşılanabilmektedir. Bu sırada toplam enerji $H = H_I + H_K$ korunmaktadır. Dördüncü “bit” “Cellular Automaton”ın zamanla dama tahtası düzeninde gelişimini sağlamakta, ve böylece Ising modelinin “Cellular Automaton” ile simülasyonunu mümkün kılmaktadır. Gelişim süresince dama tahtasının siyah(=1) hücrelerine ait spinlere kural uygulanarak ters çevirme girişiminde bulunulur ve rengi beyaza(=0) çevrilir; beyaz hücrelerin ise sadece rengi siyaha çevrilir. Rengi beyaza çevrilen siyah hücrelerin spini ters çevrilerek ($1 \rightarrow 0$ veya $0 \rightarrow 1$) Ising enerjisindeki ΔH_I değişimi hesaplanır. Eğer bu enerji değişimi, bu hücrenin momentum değişkenine aktarılabilecek veya momentum değişkeninden alınabilecek bir değerde ise ve toplam enerji korunuyor ise spin ters çevrilir. Buna uygun olarak momentum da değiştirilir; aksi halde spin de momentum da değiştirilmez. Bu işlem örgüdeki bütün siyah hücrelere aynı zaman adımıında uygulanmakta ve gelişim süresince periyodik sınır şartı kullanılmaktadır. Bu model, sistemin toplam enerjisi korunduğundan dolayı mikrokantoniktir; ancak sistemin kinetik ve iç enerjileri simülasyon süresince dalgalanmaktadır. Bu yüzden $T = 1/\beta$ sıcaklığında bir sistemde E_i kinetik enerjili bir konfigürasyona rastlama ihtimali Boltzman ağırlıklı üstel bir dağılıma uymaktadır.

$$P(E_i) \sim \exp(-4\beta E_i) \quad (1.7)$$

Burada $H_K = 4E_i$ ve $E_i = D_{1,i} + 2D_{2,i}$ dir. Bu dağılıma uygun olarak kinetik enerjinin beklenen değeri aşağıdaki şekilde ifade edilmektedir (Merdan,2003).

$$\langle E_I \rangle = \left(\sum_{n=0}^3 4ne^{-4n\beta} \right) / \sum_{n=0}^3 e^{-4n\beta} \quad (1.8)$$

“Cellular Automaton” ilk olarak Neuman ve Ulam tarafından biyolojik sistemlerin simülasyonları için elde edilmiştir (Wolfram,1983; 1984; 1986; Pires, 1989). 1983 yılında

Wolfram tarafından bu modelin ilk teorileri elde edilmiştir. Bu model fizik kimya ve biyolojideki dinamik sistemlerde birçok uygulaması yapılmıştır (Eken,1999; Turhan, 1997).

Ising modelin bir “Cellular Automaton” da simülasyonu ilk olarak Vichniac (1984) tarafından önerilmiştir. Ising modelin simülasyonu için iki “Cellular Automaton” algoritması vardır. Bunlardan biri *Q2R* olup Vichniac (1984) tarafından önerilmiş, Pomeau (1984) ve Hermann tarafından gerçekleştirilmiştir. Diğer Creutz “Cellular Automaton” olup Creutz tarafından önerilmiştir (Creutz, 1986). *Q2R* algoritmasında iç enerjinin korunduğu konfigürasyonlar üretmektedir. İç enerji sabit kaldığından dolayı özısı hesaplanamamaktadır (Vichniac, 1984; Pomeau, 1984; Packard and Wolfram, 1985; Hermann, 1986; Hermann et al., Lang and Stauffer, 1987; Schulte et al., Pomeau and Vichniac, 1988; Pires et al., 1989). Creutz “Cellular Automaton” da sistemin toplam enerjisi (iç enerjisi + kinetik enerjisi) korunur. Simülasyon boyunca enerjideki dalgalanmalardan özısı hesaplanabilmektedir.

Ising modeli iki boyutlu uzayda Onsager (1944) tarafından analitik olarak çözülmüştür. Üç ve üçten büyük boyutlarda ise tam olarak çözülmemiş ancak simülasyon yapılarak evrensel kritik üsler elde edilmiştir.

Sonsuz örgüler için Ising model analitik olarak çözülmüş, sonlu örgüler için tam olarak çözülememiştir (Kutlu and Aktekin, 1994; Aktekin, 1995; 1996, Merdan, Erdem, 2004; Merdan et. al., 2005; Merdan, Kalay 2005; Merdan, Günen and Mülazımoğlu, 2005; Merdan, Günen and Çavdar, 2005; Merdan, Günen and Çavdar, 2006; Merdan, Atille , 2006).

Ising model için termodinamik niceliklerin sonlu örgüdeki davranışları çeşitli Monte Carlo modelleriyle incelenmiş ve sonsuz örgü davranışları, sonlu örgü ölçekleme teorisi yardımıyla belirlenmiştir.

Bu tez çalışmasının amacı $d=7$ boyutlu Ising modeli için sonlu örgü ölçekleme bağıntılarının doğruluğunu bağımsız başka bir yöntemle araştırmaktır.

2. LİTERATÜR ÖZETLERİ

2.1. Ising Modeli

Ising model ferromanyetik maddelerin termodinamiğini inceler. Ising modelde sistem n-boyutlu periyodik örgüden oluşur. Örgünün geometrik yapısı iki boyutta kare veya üçgen, üç boyutta kübik veya hekzagonaldir. Her örgünün hücresinde +1 veya -1 değerleri alabilen $s_i (i=1,2,...,N)$ spin değişkeni takılmıştır. Sistemde bundan başka değişken yoktur. Eğer $s_i = +1$ ise i.hücredeki spinin yukarı doğru olduğu, $s_i = -1$ ise i.nci hücredeki spinin aşağı doğru olduğu düşünülür. Bir $\{s_i\}$ kümesi tüm sistemin konfigürasyonunu belirtmektedir. Bu konfigürasyona sahip sistemin enerjisi aşağıdaki şekilde ifade edilmektedir (Kutlu,1995).

$$E_I = -\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} s_i s_j - H \sum_{i=1}^N s_i \quad (2.1)$$

Burada I alt indisi Ising enerjisi, $\langle ij \rangle$ en yakın komşu spin çiftleri üzerinden toplamı göstermektedir. J_{ij} etkileşme enerjisi ve H dış manyetik alandır. İzotropik etkileşmelerde $J_{ij} = J$ alınmakta ve $J > 0$ olduğu durumda ferromanyetizma, $J < 0$ olduğu durumda ise antiferromanyetizmaya karşılık gelmektedir. Ising modelde termodinamik fonksiyonların tümü Ising enerjisinin konfigürasyonları üzerinden hesaplanmaktadır. E_I enerjili sistemin ağırlık fonksiyonu aşağıdaki şekilde ifade edilir.

$$Z_I(H, T) = \sum_{s_1} \sum_{s_2} \dots \sum_{s_N} e^{-\beta E_I(s_I)} \quad (2.2)$$

Her s_i spin değişkeni bağımsız olarak ± 1 değerleri alacağı için yukarıdaki toplam 2^N terimden oluşmaktadır. Spin başına serbest enerji aşağıdaki şekillerde ifade edilir.

$$f(H, T) = -kTN^{-1} \log Z_I(H, T) \quad (2.3)$$

Serbest enerjiye bağlı spin başına termodinamik nicelikler aşağıdaki şekillerde ifade edilir (Huang, 1987; Chandler, 1987).

$$U_I(H, T) = -kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{f}{kT} \right) \quad (2.4)$$

$$C_I(H, T) = \frac{\partial U_I}{\partial T} \quad (2.5)$$

$$M(H, T) = -\frac{\partial}{\partial H} \left(\frac{f}{T} \right) \quad (2.6)$$

$$\chi(H, T) = \frac{\partial M}{\partial H} \quad (2.7)$$

Burada U_I iç enerji, C_I özısı, M düzen parametresi ve χ manyetik alınganlığı simgeleri. Dış alan $H = 0$ olduğu durumda $M = (0, T)$ niceliğe düzen parametresi veya kendiliğinden mıknatıslanma denir. Ferromanyetik sistemlerde $M = (0, T)$ sıfırdan farklı olduğu için bu çalışmada ferromanyetizma ve dış manyetik alanın (H 'in) sıfır olduğu durum (yani $J > 0$ olduğu) düşünülür (Merdan, 2003).

2.2. Örgü Gazı

Örgü gazı için hamiltoniyen aşağıdaki şekilde ifade edilir (Toda, et al., 1992).

$$-H = V \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j + \mu \sum_i n_i \quad (2.8)$$

Burada V örgü hücrelerine yerleşmiş atomlar arasındaki potansiyel enerji ve μ kimyasal potansiyeldir. n_i i-inci hücrenin dolu veya boş olmasına bağlı olarak sırası ile 0 veya 1 değerlerini alabilmektedir. Ising modelindeki spin değişkeni $s_i = \pm 1$ değerlerini alabildiğinden;

$$s_i = 2n_i - 1 \quad (2.9)$$

şeklinde ifade edilir. Örgü gazı için hamiltonyen aşağıdaki şekilde ifade edilir

$$-H = \frac{1}{4}V \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j + V \frac{1}{4}(qV + 2\mu) \sum_i s_i + C \quad (2.10)$$

Ising modelindeki parametreler $s_i = 2n_i - 1$, $J = V/4$ ve $H = (qV + 2\mu)/4$ şeklinde alınarak, örgü gazı modeli Ising modele özdeş hale getirilebilmektedir (Baxter, 1989).

2.3. Evrensel Davranış

Farklı sistemlerin aynı kritik üstlere sahip olmasına evrensellik denir. Argon, Oksijen, Azot gibi sıvı ve buhar yoğunlukların gerçek değişimleri evrensel bir davranış özelliği gösterir. Örneğin Ksenon(Xe) ve Kükürt Florür(SF₂) farklı kritik sıcaklığa sahip oldukları halde kritik üstleri aynıdır (Yeomans, 1992; Binney, 1992).

2.4. Ising Modelde Termodinamik Nicelikler

2.4.1. Düzen Parametresi

Düzen parametresi faz geçişlerdeki parametrelerden biridir. Genellikle ψ ile gösterilir. Ferromanyetizmanın düzen parametresi manyetizasyondur. Manyetizasyon herhangi bir yöne serbestçe yönelebilmektedir. Termodinamik limitte mıknatıslanma (manyetizasyon) aşağıdaki şekilde ifade edilir.

$$M(H, T) = -\frac{\partial}{\partial H} \left(\frac{f}{T} \right) \quad (2.11)$$

Z_I ve f , H dış manyetik alanın çift fonksiyonudur. “Eşitlik 2.12” den görüldüğü gibi manyetizasyon tek fonksiyondur.

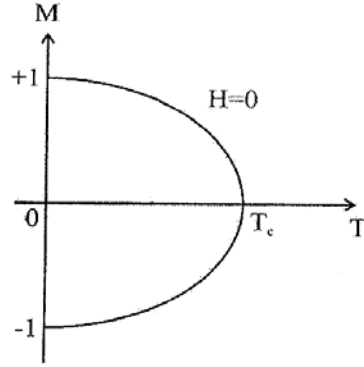
$$M(H, T) = -M(H, T) \quad (2.12)$$

Örgü başına mıknatıslanma;

$$M = N^{-1} (S_1 + S_2 + S_3 + \dots + S_N) \quad (2.13)$$

şeklinde ifade edilir.

$$M = N^{-1} Z_I^{-1} \sum_S (S_1 + S_2 + S_3 + \dots + S_N) e^{\left\{ -\left[\frac{E_o(S) - H \sum_i S_i}{kT} \right] \right\}} \quad (2.14)$$



Şekil 2.1. Düzen parametresinin sıcaklıkla değişimi

Düzen parametresi $-1 < M < +1$ değer aralığına sahiptir (Landau,1997).

Manyetisasyon üç bileşenli bir vektör olarak kabul edilir (M_x, M_y, M_z) . Düzen parametresinin bileşen sayısı n ile gösterilir ve basit akışkanlar için $n=1$, süper akışkanlar için $n=2$, izotropik akışkanlar için $n=3$ tür. Klasik teori kritik üsler arasında n bağımlılığını açıklayamaz. Düzen parametresinin simetrisi önemlidir (Hahne, 1983).

2.4.2. Manyetik Alınganlık

Manyetik alınganlık χ ;

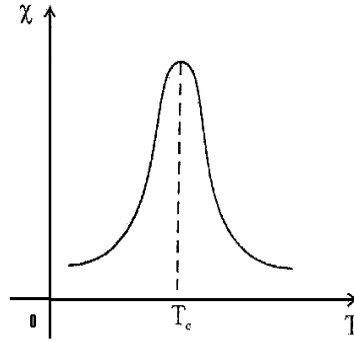
$$\chi(H, T) = \frac{\partial M}{\partial H} \quad (2.15)$$

$$\chi(H, T) = \left(\frac{N}{kT} \right) \{ \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \} \quad (2.16)$$

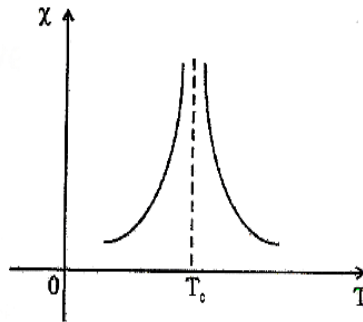
şeklinde ifade edilir.

$$M = \sum_i S_i \quad (2.17)$$

dir. Manyetik alınganlık pozitif bir büyüklüktür. Manyetik alınganlık sonsuz örgüler için T_C 'de süreksizliğe sahiptir. Sonlu örgüde ise T_C 'de maksimum değere sahiptir (Landau, 1997).



Şekil 2.2. Sonlu örgüler için manyetik alınganlığın T_C civarındaki davranışı



Şekil 2.3. Sonsuz örgüler için manyetik alınganlığın T_C civarındaki davranışı

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

$$\chi_T(T, H) = \left(\frac{\partial M}{\partial H} \right)_T \quad (2.18)$$

$$\chi_T^0(T) = \lim_{H \rightarrow 0^+} \chi_T(T, H) \quad (2.19)$$

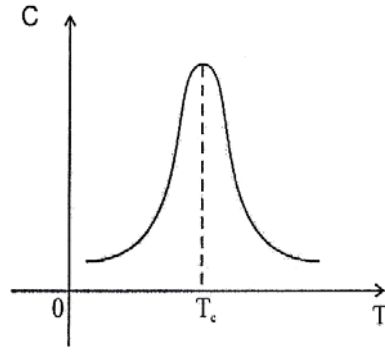
şeklindedir. χ_T bir mıknatısın manyetizasyonundan kolaylıkla bulunur. χ_T kritik noktada ıraksar. χ düzen parametresinin manyetik alanla değişiminden elde edilir. χ_T manyetik alınganlık γ üstüyle karakterize edilir ve $\chi \approx \frac{1}{t^\gamma}$ dır. $H=0$ da kendiliğinden manyetizasyon sıfır değildir. Sürekli simetriye sahiptir. $\chi_T(T, H)$, $T < T_c$ için $H \rightarrow 0^+$ giderken ıraksar. χ 'in bağlı olduğu sıcaklık γ' üstünü verir (Hahne, 1983).

2.4.3. Özısı

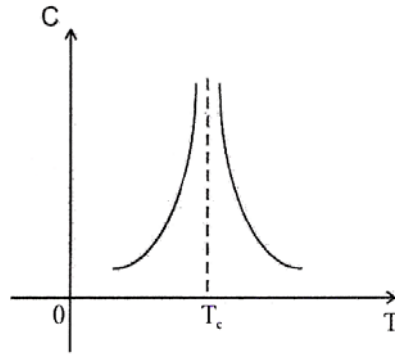
Spin başına özısı;

$$C(H, T) = \frac{\partial U_I}{\partial T} \quad (2.20)$$

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 (Landau, 1997).



Şekil 2.4. Sonlu örgüler için özısının T_c civarındaki davranışı



Şekil 2.5. Sonlu örgüler için özısının T_c civarındaki davranışı

Asimtotik olarak değişen özısının ifadesi aşağıdaki gibidir;

$$C_V(T) \approx |t|^{-\alpha} \quad (t \rightarrow 0^+) \quad (2.21)$$

Onsegar tarafından özısı;

$$CV(T) = A \ln(t) + \text{sonlu belisizlik terimler} \quad (2.22)$$

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 olarak $\alpha = \alpha'$ olduğu ispatlanmıştır (Hahne, 1983).

2.4.4. İç enerji

Spin başına serbest enerji;

$$f(H, T) = -kT \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \ln Z_l(H, T) \quad (2.23)$$

şeklindedir. Termodinamik nicelikler spin başına serbest enerjiden elde edilir. İç enerji aşağıdaki şekillerde ifade edilir (Baxter, 1989).

$$U = Z^{-1} \sum_s E(s) \exp[-E(s)/kT] \quad (2.24)$$

$$U = kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln Z \quad (2.25)$$

$$U = -kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{f}{kT} \right) \quad (2.26)$$

2.5. Kendiliğinden Mıknatıslanma M , Manyetik Alınganlık χ ve Özısı C 'nın Sıcaklık Bağımlılıkları

Kritik sıcaklık (T_c) civarında termodinamik niceliklerin davranışı indirgenmiş sıcaklığa (ε) bağlı olarak incelenir. İndirgenmiş sıcaklık;

$$\varepsilon = \frac{(T - T_c)}{T_c} \quad (2.27)$$

şeklinde tanımlanır. $\varepsilon \rightarrow 0$ limitinde herhangi bir termodinamik nicelik sonlu olan düzenli bir kısım veya ıraksayan “singular” bir kısma ayrılabilir. Dış manyetik alanın olmadığı ($H=0$) durumda ıraksayan kısımların ε ile orantılı olarak değiştiği kabul edilmektedir. Bu kuvvetler genellikle kesirlidir.

Kendiliğinden mıknatıslanma, dış manyetik alanın sıfır olduğu durumda kritik sıcaklık altında T ' nın azalan bir fonksiyonudur ve T_c de sıfırdır. T , T_c ' ye yaklaştığı durumda M aşağıdaki gibi değişmektedir.

$$M(0, T) \approx \varepsilon^{\beta'} \quad \varepsilon \rightarrow 0^+ \quad (2.28)$$

$$M(0, T) \approx (-\varepsilon)^{\beta} \quad \varepsilon \rightarrow 0^- \quad (2.29)$$

Burada β' ve β kendiliğinden mıknatıslanmanın kritik üsleridir.

Dış manyetik alan varken $\varepsilon = 0$ için hal denklemi;

$$M \approx H^{-1/\delta} \quad (2.30)$$

şeklindedir. δ kritik üstür. Fakat bu çalışmada dış manyetik alanın olmadığı ($H = 0$) durum göz önüne alındığından bu durum ele alınmayacaktır. Sıcaklık T , kritik sıcaklık T_C 'ye çok yaklaşıldığında manyetik alınganlık χ ıraksamaktadır. Manyetik alınganlığın kritikteki davranışı γ ve γ' kritik üsleri ile ifade edilir.

$$kT\chi(0,T) \approx \varepsilon^{-\gamma} \quad \varepsilon \rightarrow 0^+ \quad (2.31)$$

$$kT\chi(0,T) \approx (-\varepsilon)^{-\gamma'} \quad \varepsilon \rightarrow 0^- \quad (2.32)$$

Dış manyetik alanın olmadığı durumda kritik sıcaklıkta özısı (C) ıraksak bir davranış göstermektedir. Özısı kritik üsleri α , α' şeklinde simgelenir.

$$C(0,T) \approx (-\varepsilon)^{-\alpha} + b^+ \quad \varepsilon \rightarrow 0^+ \quad (2.33)$$

$$C(0,T) \approx (-\varepsilon)^{-\alpha'} + b^- \quad \varepsilon \rightarrow 0^- \quad (2.34)$$

Burada $b^\pm$ terimi düzeltme terimidir. Özısının üsleri ($\alpha = \alpha'$) birbirine eşittir. Özısı $\varepsilon = 0$ 'da sonlu süreksizliğe sahiptir (Huang,1987; Privman, 1990; Baxter, 1989).

2.6. Spin-Spin Korelasyon Fonksiyonu $g(r)$

Sistemin farklı kısımlarının nasıl ilişkili olduklarının ve etkileşmeler sonucunda ortaya çıkan dalgalanmalar hakkında bilgi verdiğinden dolayı korelasyon fonksiyonu çok önemlidir. Bir sisteminde i. ve j. spinler arasındaki korelasyon aşağıdaki gibidir (Kadonoff,1966; Kutlu, 1995).

$$g_{ij} = \langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle \quad (2.35)$$

Öteleme altında değişmez sistemler için $g_{ij} = g_{ij}(r_{ij})$ 'dır ve sadece i. ve j. spinler arasındaki vektör mesafesi r_{ij} ye bağlı olarak değişmektedir. Kritik sıcaklıktan yeterince büyük sıcaklıkta $g(r)$ ' nin büyük r' ler için sıfıra üstel olarak bozulması beklenmektedir (Huang, 1987).

$$g(xk) \approx x^{-\tau} e^{-x/\varepsilon} \quad x \rightarrow \infty \quad (2.36)$$

Burada τ belirli bir sayı ve ε , k yönünde korelasyon uzunluğudur. Korelasyon uzunluğu sıcaklığın bir fonksiyonudur ve kritik sıcaklıkta ıraksar.

$$\xi(0, T) \approx t^{-\nu} \quad t \rightarrow 0^+ \quad (2.37)$$

$$\xi(0, T) \approx (-t)^{-\nu'} \quad t \rightarrow 0^- \quad (2.38)$$

Burada ν' ve ν korelasyon fonksiyonunun kritik üsleridir. Kritik sıcaklıkta korelasyon fonksiyonu üstel olarak azalmak yerine kuvvet kanununa uygun olarak azalır.

$$g(r) \approx r^{-d+2-\eta} \quad (2.39)$$

η korelasyon fonksiyonunun kritik noktadaki davranışı belirleyen kritik üstür.

2.7. Temel Ölçekleme Postulatu

Termodinamik büyüklükler kritik nokta civarında sonsuza gider. Örneğin özısı $C(t, H; L)$ sistemin boyutu sonsuz olduğunda aşağıdaki gibidir (Merdan 2003).

$$C_s(t, 0; \infty) \approx (A_{\pm} / \alpha) |t|^{-\alpha} \quad (2.40)$$

Burada s , singüler kısmın incelendiğini göstermektedir. Sıfırdan farklı bir dış manyetik alanda standart ölçekleme ifadesi aşağıdaki şekildedir.

$$C_s(t, H; \infty) \approx |t|^{-\alpha} C_{\pm}(H|t|^{-\Delta}) \quad (2.41)$$

Burada $\approx$ işareti ölçeklemeye ilişkin ihmal edilmiş düzeltmeleri, $+$ ve $-$ sırasıyla $t > 0$ ve $t < 0$ durumunu göstermektedir. $C_{\pm}$ ölçekleme fonksiyonudur. α ve $\Delta = \beta + \gamma$ evrensel üslerdir. Sonlu sistemler için sistemin doğrusal boyutu L , sonsuz sistemin korelasyon uzunluğu $\xi(t, H; \infty)$ ile ölçeklenir. $L \gg \xi$ ise önemli sonlu boyut etkisi gözlenmemektedir. $L \ll \xi$ ise sistemin doğrusal boyutu uzun mesafeli korelasyonları kesmekte ve böylece kritik nokta ıraksamalarında dikkate değer bir eğilme ve yuvarlaklaşma meydana gelmektedir. Sonsuz örgünün korelasyon uzunluğu aşağıdaki şekilde ölçeklenir.

$$\xi(t, H; \infty) \approx |t|^{-\nu} \in_{\pm} (H|t|^{-\Delta}) \quad (2.42)$$

T_c yakınında $\xi \sim (T - T_c)^{-\nu}$ ile orantılıdır. $(T - T_c)^{-\nu} \approx L$ olduğunda sonlu boyut etkisi gözlenir. Sonlu örgü ölçekleme $L/t^{-\nu}$ şeklinde ifade edilir.

$$C_s(t, H; L) \approx |t|^{-\alpha} C_{\pm}(H|t|^{-\Delta}; L|t|^{\nu}) \quad (2.43)$$

$$\xi(t, H; L) \approx |t|^{-\nu} \in_{\pm} (H|t|^{-\nu}; L|t|^{\nu}) \quad (2.44)$$

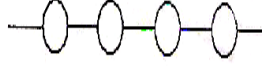
“Eşitlik 2.43” ve “Eşitlik 2.44” deki bağıntılar başka bağıntıların tahmin edilmesini sağlar. Bunlara örnek olarak aşağıdaki bağıntıları gösterebilir.

$$C_s(0, 0; L) \propto L^{\alpha/\nu} \quad (2.45)$$

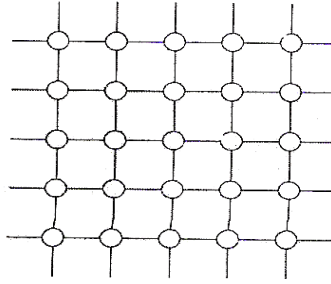
$$\xi(0, 0; L) \propto L \quad (2.46)$$

2.8. Hiperkübik Örgü Geometrisi

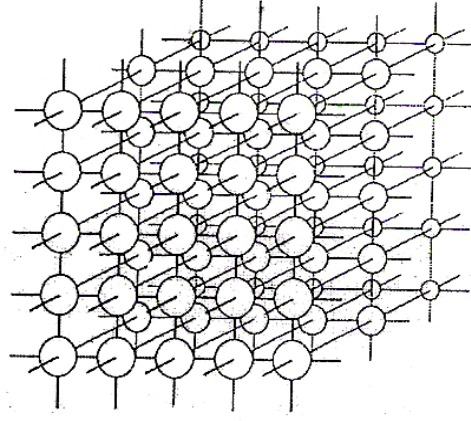
Spin modellerinde komşularla olan etkileşmeler dikkate alınır. Model oluşturulurken köşeleri birleştiren doğrulardan oluşan düzenli bir geometrik “örgü” yapısı seçilmelidir. Örgüdeki “hücre” diye adlandırılan bir köşe, bir spin tarafından işgal edilir. Böylece spinler, örgüdeki tüm hücreleri kaplar. Her hücre sadece bir spin tarafından işgal edilir. İki hücreyi birleştiren doğruya örgü uzunluğu denir. Doğruların birleştiği köşe sayısına koordinat sayısı denir. Koordinat sayısı, seçilen örgü yapısında etkileşecek komşuluk sayısını belirler. Spin modellerinde hiperkübik, elmas, üçgen v.s. örgüler kullanılmaktadır (Duran, 2005).



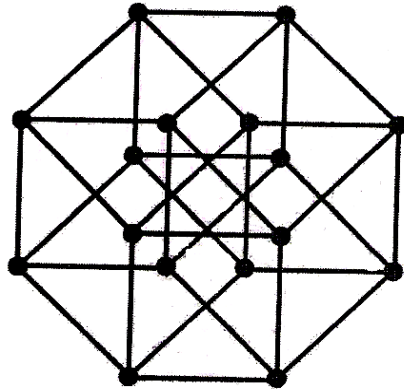
Şekil 2.6. 1-boyutlu hiperkübik örgü



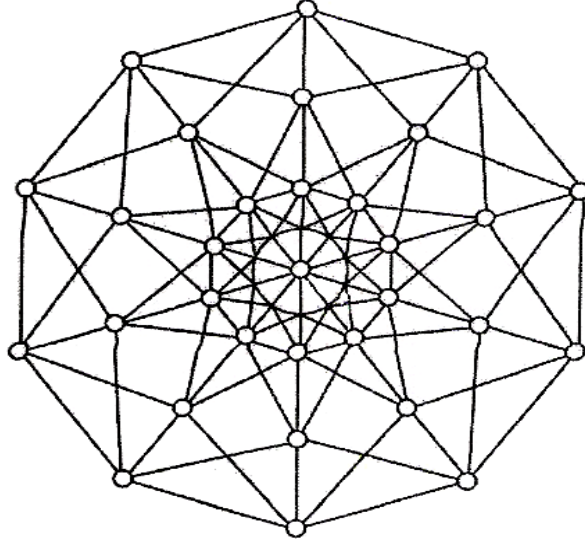
Şekil 2.7. 2-boyutlu hiperkübik örgü



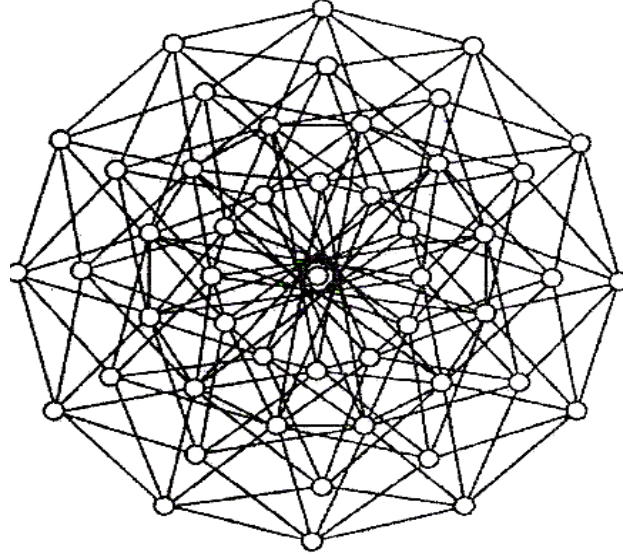
Şekil 2.8. 3-boyutlu hiperkübik örgü



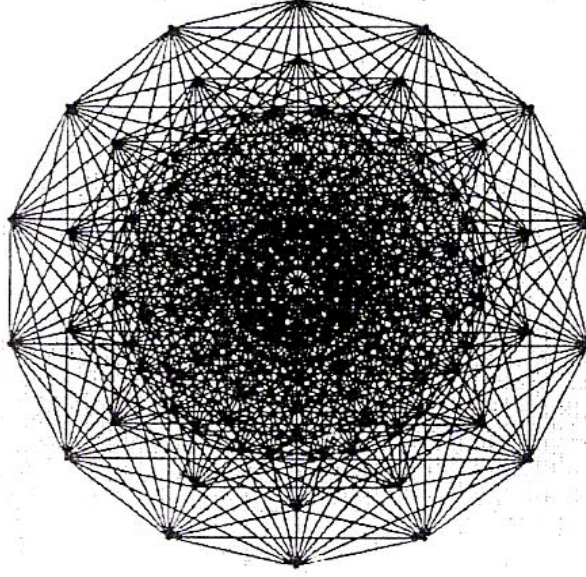
Şekil 2.9. 4-boyutlu hiperkübik örgü



Şekil 2.10. 5-boyutlu hiperkübik örgü



Şekil 2.11. 6-boyutlu hiperkübik örgü



Şekil 2.12. 7-boyutlu hiperkübik örgü

Bu çalışmada $d = 7$ hiperkübik örgüler kullanılmaktadır. Basit küp üç boyutludur. 0-boyutlu hiperküp, nokta; 1-boyutlu hiperküp, doğru; 2-boyutlu hiperküp, kare; 3-boyutlu hiperküp, küp; 4-boyutlu hiperküp, tesseract diye adlandırılır. Dörtten büyük boyutlarda ise kendi boyut isimleri ile adlandırılır. İki noktanın birleşmesi ile bir doğru, iki doğrunun birleşmesi ile bir kare, iki karenin birleşmesi ile bir küp, iki küpün birleşmesi ile bir tesseract, iki tesseract' ın birleşmesi ile bir 5-boyutlu hiperküp, iki 5-boyutlu hiperküpün birleşmesi ile 6-boyutlu hiperküp, iki 6-boyutlu hiperküpün birleşmesi ile 7-boyutlu hiperküp oluşmaktadır (Seigel, 1981; Hwang, 1984; Hillis, 1985; Modi,1988).

3. MATERYAL VE METOD

3.1. Ising Modelinin Simülasyonu İçin Gerekli Algoritmalar

3.1.1. Metropolis Algoritması

İlk olarak 1953 yılında Metropolis ve arkadaşları tarafından üretilmiştir. Metropolis algoritmasını Markovian bir yöntem ile konfigürasyonlar (spin konumları) üretir. Bu algoritma sistemin var olan konfigürasyonundan yeni bir konfigürasyon ürettiğinden dolayı Markov yöntemi için çok önemlidir (Binney et al., 1992; Metropolis, et al., 1953). İstatistik sistemlerin simülasyonu Metropolis ve arkadaşlarının geliştirdikleri algoritmaya dayanmaktadır. Konfigürasyonun α durumundan α' durumuna değişimi sonucunda sistemin enerjisindeki değişim hesaplanır. Enerji değişimi pozitif ise yeni konfigürasyon $e^{-\beta(E_{\alpha'} - E_{\alpha})}$ olasılığı şeklinde kabul edilir. Yani ;

$$P(\alpha \rightarrow \alpha') = \begin{cases} A^{-1} & E_{\alpha'} < E_{\alpha} \\ A^{-1} e^{-\beta(E_{\alpha'} - E_{\alpha})} & E_{\alpha'} > E_{\alpha} \end{cases} \quad (3.1)$$

şeklinde dir. Burada A normalizasyon sabitidir. $\sum_{\alpha'} P(\alpha \rightarrow \alpha') = 1$ denklemini sağlamak

için seçilir. α durumundan elde edilen α' durumu için yukarıdaki durum geçerli $\alpha' \neq \alpha$ dışındaki diğer tüm durumlar için sıfırdır. Ising modelinin simülasyonunda ilk olarak tek spinin ters çevrilmesi için uğraşılır. Bu spin rast gele olarak seçilir ya da örnek spinlerden her biri ters çevrilebilir. Daha sonra yeni ve eski konfigürasyonların enerjileri karşılaştırılır. Bir spinin ters çevrilmesi üzerine enerji değişimi sadece spinin en yakın

komşularının değeridir. Bilgisayar yoluyla rast gele sayı üretici verilen olasılığa uygun olarak ya kabul ya da ret edilerek kullanılır.

3.1.2. Creutz' un Gezgin “Demon” Algoritması

Molekül Dinamiği olarak bilinen yöntem Monte Carlo yönteminin bir alternatifidir. Molekül Dinamiği metodun fiziksel sistemi birkaç parçacıktan veya çok parçacıktan oluşmaktadır. Molekül Dinamiği özellikle katı ve sıvıların molekül yapıları , enerjileri ve hareketleri ile parçacık sayısının sonsuz olduğu durumun özelliklerini ayrıntılı bir şekilde araştırılmasını sağlamaktadır. Molekül Dinamiği ile ilgili hesaplamalarda rast gele sayı üretici kullanılmamaktadır. Bu tür algoritmalarda sıcaklık bir giriş parametresi olarak kullanılmamakta ve sıcaklık değeri farklı serbestlik dereceleri arasında enerjinin eş bölüşümü kullanılarak hesaplanmaktadır. Sistem uygun bir hamiltoniyen yardımıyla belli kurallara bağlı olarak gelişmektedir. Sistemin istatistik yapısı büyük faz uzayının karmaşıklığından meydana gelmektedir.

Metropolis ve arkadaşlarının algoritması ile molekül dinamiği arasına giren diğer bir simülasyon yöntemi Creutz (1983) tarafından geliştirilmiştir. Bu yöntemde 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” rast gele olarak spinleri ziyaret eder. Demon bir hücreye ulaştığı zaman uygun bir spini ters çevirmeye çalışır. 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 rast gele olarak spinleri ziyaret etmesinden dolayı bu

algoritmaya Creutz' un gezgin “demon” algoritması denir. Bu algoritmada tek bir gezgin “demon” kullanılacağı gibi birden fazla gezgin “demon” da kullanılabilir (Mülazımoğlu, 2003).

3.2. Ising Modelinin Simülasyonu için “Cellular Automaton” lar

3.2.1. Cellular Automaton

“Cellular Automaton” fiziksel sistemler için matematiksel bir modeldir. İlk temel teori 1983 yılında Wolfram tarafından öne sürülmüştür. “Cellular Automaton”lar ilk olarak Neuman ve Ulam tarafından biyolojik sistemlerin simülasyonu için önerilmiştir (Wolfram, 1983; 1984; 1986). “CA”lar da uzay ve zaman kesikli değerlere sahiptir. Sonsuza kadar genişletilebilen düzenli hücreler örgüsünden oluşur. Örgünün her bir hücresinde kesikli değerler alabilen değişkenlere sahiptir. “CA” kesikli zaman adımlarında gelişir. Gelişim sırasında bir hücre 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 tüm hücre değişkenlerinin değeri özdeş bir kural yardımıyla eş zamanlı olarak elde edilmektedir. d-boyutlu bir “CA” nın gelişimi periyodik sınır şartlarına uymaktadır. Herhangi bir fiziksel sistem için “CA” ile bir model oluştururken, sistemin yapısına uygun düzenli bir örgü (iki boyutlu kare vb.) seçilir. Örgüyü oluşturan hücrelerin sahip olabileceği haller değişkenlerle belirlenir. Hücrenin birbirleri ile etkileşim şeklini ve gelişimini sağlayan bir bölgesel kural tanımlanır.

Fiziksel problemlerin yanı sıra biyolojide DNA kopyalamasını yapan fonksiyonun bulunması, kalbin hızlı yada yavaş çarpması, kimyada ise uzaysal difüzyon ile çiftlenmiş reaksiyonların bir ağını içeren lineer olmayan kimyasal sistemler “CA” olarak modellenmiştir (Wolfram,1983).

3.2.1.1. Bir Boyutlu “Cellular Automaton” Kuralları

Bir çok Cellular automaton kuralı vardır (Wolfram, 1983; Vichniac, 1984; Packard et al., 1985). Bu kurallar etkileşmeye giren hücrenin sayısına ve durumuna bağlı olarak adlandırılır. Bir boyutlu “CA”nın üç tane komşu hücresi vardır.

Çizelge 3.1. Bir boyutlu örgü için $(t + 1)$. zaman adımında i . hücrenin en yakın komşuları

$t \dots$	a_{i-1}^t	a_i^t	a_{i+1}^t
$t + 1$		a_i^{t+1}	

Bunlar hücrenin bir önceki zaman adımında kendisi, sağ ve solundaki hücrelerdir. Bir boyutlu “CA”lar da i . durumlardaki bir hücrenin a_i değeri ;

$$a_i^{t+1} = f(a_{i-1}^t, a_i^t, a_{i+1}^t) \quad (3.2)$$

bir boyutlu örgüde her hücre değişkeni 0 veya 1 değerini aldığı anda üç hücre t . zaman adımında aşağıdaki gibi sekiz farklı duruma sahip olur.

Çizelge 3.2. Hücre değişkeni iki hale sahip, bir boyutlu basit “cellular automaton” için kural 90

t	<u>111</u>	<u>110</u>	<u>101</u>	<u>100</u>	<u>011</u>	<u>010</u>	<u>001</u>	<u>000</u>
$t + 1$	0	1	0	1	1	0	1	0

Bir merkezi hücre değişkeni $(t+1)$ 'inci zaman adımında t 'inci zaman adımındaki en yakın komşularının değerlerine bağlı olarak Çizelge 3.2'de gösterilen değerleri belli bir kurala göre alır. Bu kural Çizelge 3.2'de gösterilen düzenekte $(t+1)$ zaman adımında ulaşılan iki tabanına göre sayının ondalık sistemdeki karşılıkları aşağıdaki gibidir.

$$0 \times 2^7 + 1 \times 2^6 + 0 \times 2^5 + 1 \times 2^4 + 1 \times 2^3 + 0 \times 2^2 + 1 \times 2^1 + 0 \times 2^0 = 90$$

Buna bu yüzden kural 90 diye adlandırılır. Üç hücre değerinin sekiz farklı şekillenmesinden ulaşılan sekiz basamaklı ikili sayı bir kurala karşılık geldiğinden $2^8 = 256$ farklı Cellular Automaton kuralı oluşmaktadır. Bu kuralın bazı kısıtlamaları yüzünden geçersiz Cellular Automaton kuralı olarak kabul edilmektedir. İlk kısıtlamaya göre yansıma simetrisine sahip olmayan kurallar geçersizdir. Yani 100 ve 001 (110 ve 011) gibi haller aynı değere gitmelidir. İkinci kısıtlama ise 000 halini değişime zorlayacak bir durum olmadığından 1 ile biten bütün sekiz basamaklı ikili sayılara karşılık gelen kurallar geçersiz kabul edilmektedir. Geçerli bölgesel kurallar, komşuluklardaki hücre değerinin Boolean fonksiyonu olarak ifade edilmektedir. Kural 90 için Boolean ifadesi, a_i^t t -inci zaman adımında i -inci hücrenin değeri olmak üzere, $(t+1)$ -inci zaman adımında i -inci hücrenin değeri bir önceki zaman adımında ona komşu iki hücre değişkeninin mod2 toplamı ile oluşturulabilmektedir (Kutlu,1995).

$$a_i^{t+1} = a_{i-1}^t \oplus a_{i+1}^t \quad (3.3)$$

Burada $\oplus$; mod2'ye göre toplamdır.

3.2.2. Q2R “Cellular Automaton”ı

Q2R algoritmasında rasgele bir konfigürasyon ile hesaba başlanır. Q2R “Automaton”ında bir örgünün her hücresinde +1 ve -1 değer alan bir spin yer alır. Q2R algoritmasında spin-spin etkileşme enerjisi (iç enerji veya Ising enerji) sistemin toplam enerjisine karşılık gelmektedir. Her zaman adımında değişecek spin aynı sayıda paralel ve paralel olmayan komşu spine sahipse (göz önüne alınan konfigürasyonda değişecek spin sistemin toplam enerjisini değiştirmeyecek şekilde olursa) spinin yönü değişir ve sistemin toplam enerjisinde bir değişme olmaz. Bu yüzden simülasyonun bu tipi sabit enerjili mikrokantonik kümeye uyar. Sabit sıcaklıklı kanonik kümeye uymaz. Q2R “Automaton”ında bir kerede tüm spinler yenilenmez.. Belli bir adımdan sonra hep aynı konfigürasyonları üretmemek ve istenilen adım sayısına kadar gidebilmek için kare örgü iki alt örgüye bölünüp önce bir yarısını sonra diğer bir yarısını yenileme yöntemi uygulanır. Q2R “Automaton”ında dış manyetik alan dikkate alınmaz. Q2R kuralında bir bölgenin enerjisi sistemin toplam enerjisini ifade eder. Q2R algoritması ile toplam enerjinin korunduğu mikrokantonik bir küme oluşturmakta yani simülasyon süresince herhangi bir spin değişiminde iç enerjinin korunduğu konfigürasyonlar üretilmektedir. İç enerji tüm simülasyon boyunca sabit kaldığından özısı, enerji dalgalanmaları kullanılarak hesaplanamamaktadır (Vichniac, 1984; Pomeau, 1984; Packard, 1985; Hermann, 1986; Hermann et al., 1987; Schulte et al., 1987; Lang et al., 1987; Pomeau and Vichniac, 1988; Pires et al., 1989).

3.2.3. Creutz “Cellular Automaton”ı

1986 yılında Creutz tarafından, Metropolis ve arkadaşlarının algoritması ile Molekül Dinamiği arasında yer alan bir simülasyon geliştirilmiştir. Bu algoritma $2 \leq d \leq 8$ boyutlu uzaydaki Ising modellerin bir çok simülasyon çalışmaları yapılmıştır (Kutlu ve

Aktekin, 1993; 1994; 1995;1996; Kutlu et al., 1993; Aktekin, 1997; 2000; Merdan, Erdem, 2004; Merdan et. al., 2005; Merdan, Kalay 2005; Günen, Mülazımoğlu and Merdan, 2005; Merdan, Günen and Çavdar, 2005; Merdan, Günen and Çavdar, 2006; Merdan, Atille , 2006). Bu tez çalışmasında Creutz “Cellular Automaton” da yedi boyutlu Ising modeli incelenmektedir. Her bir hücreye yedi ikili “bit” karşılık gelmektedir. Bir hücrede bir değişkenin alacağı değer o değişkenin bir önceki zaman adımındaki kendi değeri ile ona en yakın komşularındaki değerlerinden elde edilmektedir. Bu yedi ikili “bit” den ilki, B_i Ising spin içindir; 0 veya 1 değerlerini alabilir. $S_i = 2B_i - 1$ olmak üzere sistemin Ising spin enerjisi H_I (iç enerji, potansiyel enerji);

$$H_I = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad (3.4)$$

şeklinde tanımlanmaktadır.

Burada $\langle ij \rangle$ bütün en yakın komşu hücreler üzerinden toplamdır. Kalan altı bitten beşi “demon” veya spine eşlik eden momentuma karşı gelmektedir. D_1, D_2, D_3, D_4, D_5 ile gösterilen bu bitler "0" veya "1" değerlerini alabilmekte ve $(2^0 \times D_1 + 2^1 \times D_2 + 2^2 \times D_3 + 2^3 \times D_4 + 2^4 \times D_5)$ ifadesine göre (0,31) aralığındaki tamsayılar oluşturmaktadır. Momentum değişkenine karşılık gelen kinetik enerji (E_D), bu tamsayı değerlerinin dört katını almaktadır.

$$E_D = 4(2^0 \times D_1 + 2^1 \times D_2 + 2^2 \times D_3 + 2^3 \times D_4 + 2^4 \times D_5) \quad (3.5)$$

Örgünün toplam enerjisi;

$$H = H_K + H_I \quad (3.6)$$

korunmaktadır. H_K ; örgünün toplam kinetik enerjisidir, yani E_D^i i.inci örgüye ait “demon” un enerjisidir. Kinetik enerji;

$$H_k = \sum_i E_D^i \quad (3.7)$$

şeklinde dir. Toplam enerji için sistemin sıcaklığı (J/k_B biriminde olup k_B Boltzman sabitidir) bir “demon” un kinetik enerjisinin ortalama değerinden elde edilir.

$$\langle E_D \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{31} 4ne^{-4n\beta}}{\sum_{n=0}^{31} e^{-4n\beta}} \quad (3.8)$$

Yedinci bit “Cellular Automaton” ın zamanla dama tahtası düzeninde gelişimini sağlamak ve böylece Ising modelinin “Cellular Automaton” ile simülasyonunu mümkün kılmaktadır. Her bir zaman adımında dama tahtasının siyah hücrelerine kural uygulanıp rengi beyaza çevrilir, beyaz hücrelerin ise sadece rengi siyaha çevrilir. Rengi beyaza çevrilen siyah hücrelerin spini ters çevrilerek Ising enerjisindeki enerji değişimi hesaplanır. Eğer enerji değişimi bu hücrenin momentum değişkenine aktarılabilir veya momentum değişkeninden alınabilecek bir değerde ise, toplam enerji korunmak üzere spin ters çevrilir. Buna uygun olarak momentum değiştirilir, aksi halde spin ve momentum değiştirilmez. Bu işlem örgüdeki bütün siyah hücrelere aynı zaman adımında uygulanmakta ve gelişim süresince periyodik sınır şartı kullanılmaktadır. Başlangıçta sistemin bütün spinleri aşağı veya yukarı yönde alınabilir. İlk kinetik enerji beyaz hücrelerdeki demonun “bit”leri vasıtasıyla örgüye rasgele verilir; bu çalışmada birinci ve dördüncü “bit”ler vasıtasıyla verilmektedir. Toplam enerjide sınırlama devam ettiği müddetçe rast gele 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. İki bitten oluşan demon (0’dan 3’e kadar) dört enerji seviyesine , üç bitten oluşan demon (0’dan 7’ye kadar) sekiz enerji seviyesine, dört bitten oluşan demon (0’dan 15’e kadar) on altı enerji seviyesine, beş bitten oluşan demon (0’dan

31'e kadar) otuz iki enerji seviyesine sahiptir. Bu tez çalışmasında beş bitli demonlar kullanılmıştır(Merdan 2005).

3.2.4. Demon Enerjisinin Hesaplanması

Demonun bit sayısına göre demonun enerjisi hesaplanır. Demonun bit sayısı 2 ise demonun enerjisi aşağıdaki gibidir.

$$E_D = 4 \times (2^0 \times D_1 + 2^1 \times D_2) \quad (3.9)$$

İkili “bit”li demonlar aşağıdaki şekilde tam sayı değerlerini almaktadır.

Çizelge 3.3. İki “bit”li demonların alabileceği tamsayı değerleri

D_2	D_1	E_D
0	0	0
0	1	1
1	0	2
1	1	3

Demonun bit sayısı 5 ise “demon” enerjisi aşağıdaki gibi hesaplanır.

$$E_D = 4 \times (2^0 \times D_1 + 2^1 \times D_2 + 2^2 \times D_3 + 2^3 \times D_4 + 2^4 \times D_5) \quad (3.10)$$

Beş ikili “bit”e sahip demonlar aşağıdaki şekilde tamsayı değerleri almaktadır.

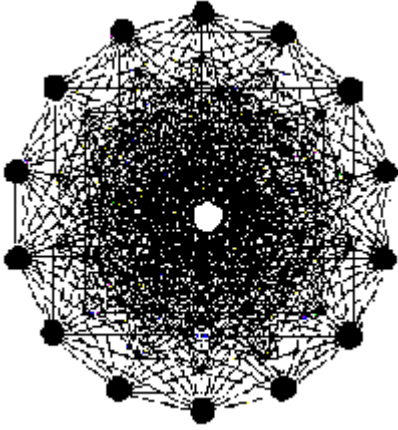
Çizelge 3.4. Beş “bit”li demonların alabileceği tamsayı değeri

D_5	D_4	D_3	D_2	D_1	E_D
0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	1	1
0	0	0	1	0	2
0	0	0	1	1	3
0	0	1	0	0	4
0	0	1	0	1	5
0	0	1	1	0	6
0	0	1	1	1	7
0	1	0	0	1	8
0	1	0	0	0	9
0	1	0	1	0	10
0	1	0	1	1	11
0	1	1	0	0	12
0	1	1	0	1	13
0	1	1	1	0	14
0	1	1	1	1	15
1	0	0	0	0	16
1	0	0	0	1	17
1	0	0	1	0	18
1	0	0	1	1	19
1	0	1	0	0	20
1	0	1	0	1	21
1	0	1	1	0	22
1	0	1	1	1	23
1	1	0	0	0	24
1	1	0	0	1	25
1	1	0	1	0	26
1	1	0	1	1	27
1	1	1	0	0	28
1	1	1	0	1	29
1	1	1	1	0	30
1	1	1	1	1	31

Bilgisayarda ikili sayı sistemi kullanıldığından dolayı demonlar 0 veya 1 değerini alır.

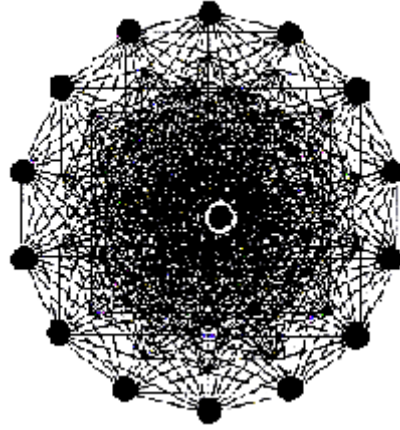
Demonun “bit” sayısı iki olduğunda “demon” enerjisi Çizelge 3.3’de görüldüğü gibi (0,3) arasında tamsayı değeri almaktadır. Demonun bit sayısı beş olduğunda ise demonun enerjisi Çizelge 3.4’de görüldüğü gibi (0,31) arasında tamsayı değeri almaktadır. Demonun enerjisi bu tam sayıların dört katıdır. Bir spinin bir boyutlu uzayda iki, iki boyutlu uzayda dört, üç boyutlu uzayda altı, dört boyutlu uzayda sekiz, beş boyutlu uzayda on, altı boyutlu uzayda on iki, yedi boyutlu uzayda on dört tane en yakın komşu spin vardır. Yedi boyutlu Ising modelde bir spin ters çevrildiğinde Ising enerjisinde meydana gelen değişim Şekil 3.1’de verilmektedir.

İlk Durum



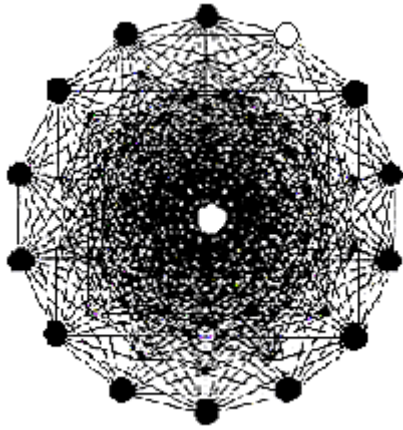
$$H_I^i = 14$$

Son Durum

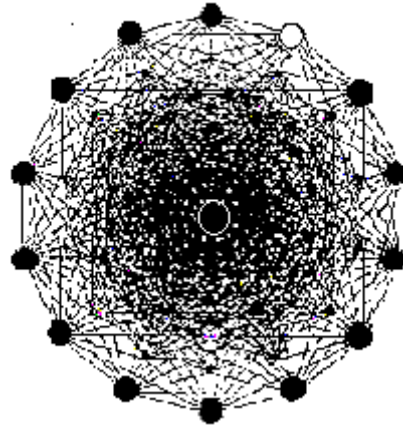


$$H_I^s = -14$$

$$\Delta H_I = -28$$

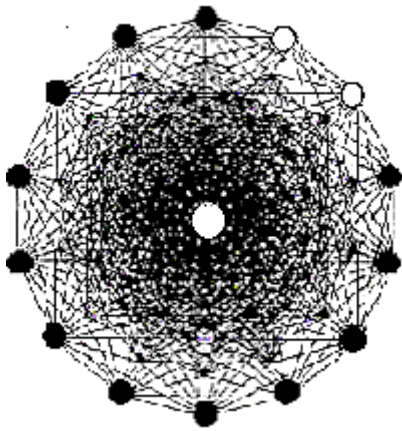


$$H_l^i = 12$$

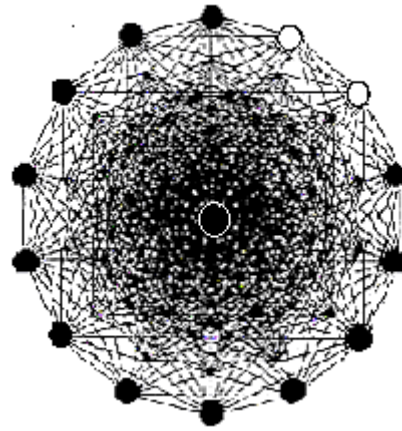


$$H_l^s = -12$$

$$\Delta H_l = -24$$

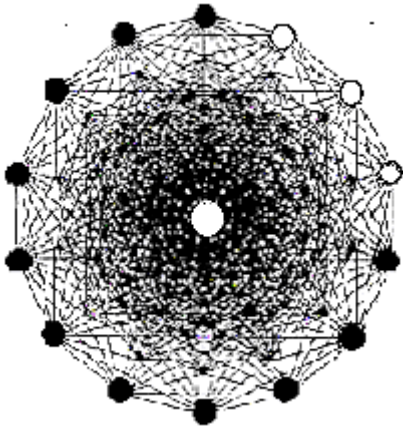


$$H_l^i = 10$$

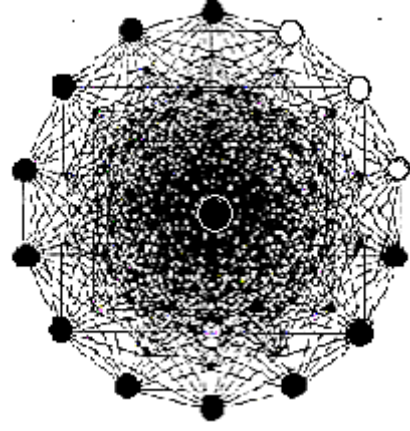


$$H_l^s = -10$$

$$\Delta H_l = -20$$

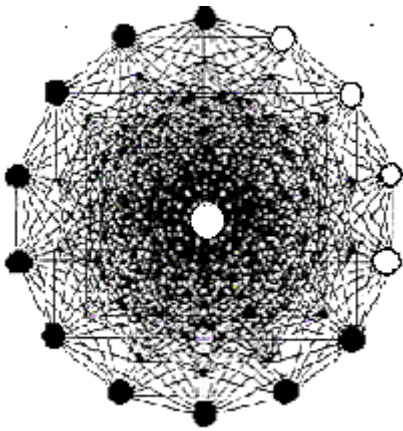


$$H_l^i = 8$$

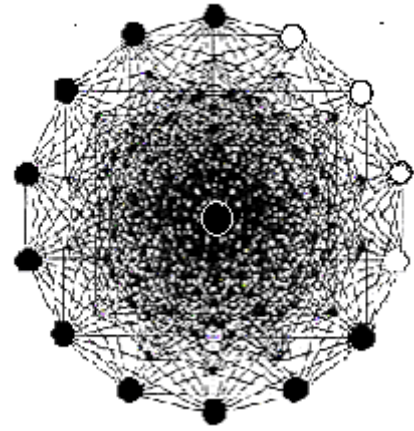


$$H_l^s = -8$$

$$\Delta H_l = -16$$

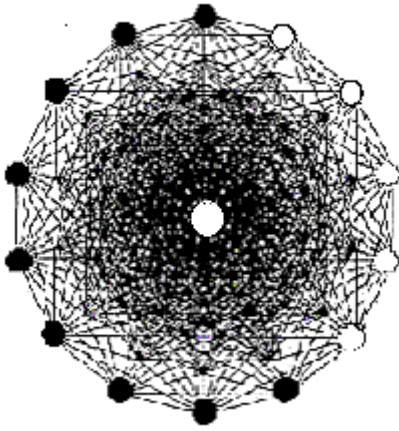


$$H_l^i = 6$$

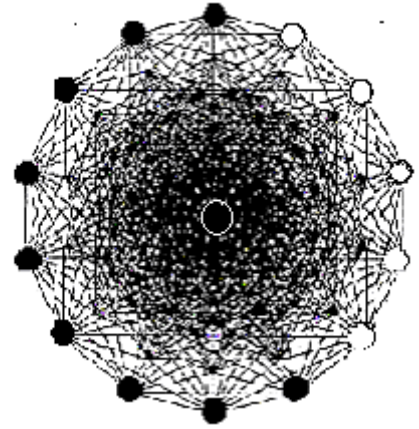


$$H_l^s = -6$$

$$\Delta H_l = -12$$

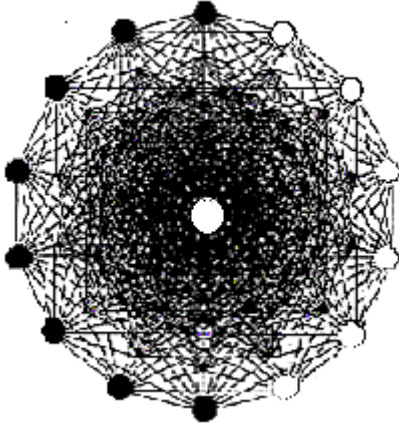


$$H_I^i = 4$$

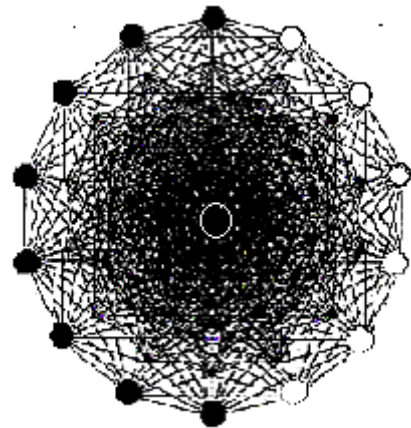


$$H_I^s = -4$$

$$\Delta H_I = -8$$

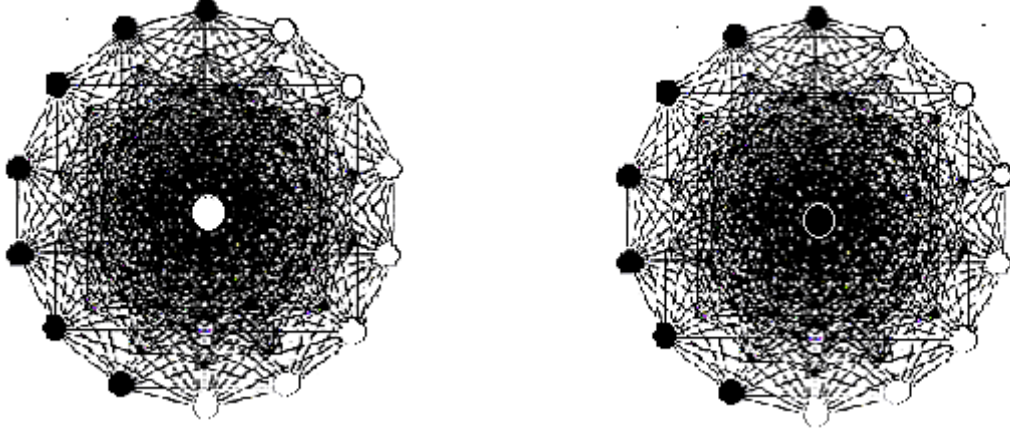


$$H_I^i = 2$$



$$H_I^s = -2$$

$$\Delta H_I = -4$$



$$H_I^i = 0$$

$$H_I^s = 0$$

$$\Delta H_I = 0$$

Şekil 3.1. Yedi boyutlu hiperkübik örgüde spinlerin ters çevrilmesi durumunda ΔH_I , Ising enerjisindeki değişimler

Şekil 3.1’de siyah noktalar spin durumunun aşağı yönlü (-1) olmasını, beyaz noktalar spin durumunun yukarı yönlü (+1) olmasını ifade etmektedir.

3.2.5.Creutz “Cellular Automaton”ında Termodinamik Niceliklerin Hesabı

Cellular Automaton modeli toplam enerji korunumundan dolayı mikrokantoniktir. İç enerji (Ising enerjisi) ve kinetik enerji simülasyon boyunca dalgalanmaktadır ve kanonik bir davranış gösterir. Bu yüzden T sıcaklığında bir sistemde E_i kinetik enerjili bir konfigürasyona rastlama ihtimali Boltzman ağırlıklı üstel bir dağılıma uymaktadır.

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

Bu özelliklerden yararlanarak β 'nın değeri dolayısıyla sistemin sıcaklığı $T = 1/\beta$ demon enerjisinin beklenen değerinden elde edilir. Bir spin ters çevrildiğinde demonun alacağı veya vereceği enerji miktarı kadar Ising enerjisinde değişme olmaktadır.

Burada $H_k = 4E_D$ 'dır. Boltzman ağırlıklı üstel dağılıma uygun olarak kinetik enerjinin beklenen değeri aşağıdaki gibidir (Merdan, 2003).

$$\langle E_D \rangle = \left(\sum_{n=0}^{31} 4ne^{-4n\beta} \right) / \left(\sum_{n=0}^{31} e^{-4n\beta} \right) \quad (3.12)$$

E_D 'nin beklenen değeri sistemin sıcaklığının değerini belirler. E_D 'nin beklenen değeri hücre başına ve zaman adımı başına hesaplanır. Buradan $1/\beta$ değeri bulunur. $T = 1/\beta$ eşitliğinden sıcaklık değeri belirlenir. Bu sıcaklık değerine karşılık gelen kendiliğinden mıknatıslanma M , iç enerji (Ising enerjisi) H_I , manyetik alınganlık χ ve özısı C oluşturulan konfigürasyonlardan aşağıdaki ifadeler yardımıyla hesaplanmaktadır.

$$M = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N S_i \quad (3.13)$$

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

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial h} = L^7 \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{kT^2} \quad (3.15)$$

$$\frac{C}{k} = \frac{\partial H_I}{\partial T} = L^7 \frac{\langle H_I^2 \rangle - \langle H_I \rangle^2}{(kT)^2} \quad (3.16)$$

Burada $N = L^7$ örgüdeki hücre sayısıdır ve $\langle \rangle$ zaman üzerinden ortalamaya karşılık gelmektedir. M, H_I hücre başına ortalama değere ve h düzenli bir dış alana karşılık gelmektedir. Ising hamiltoniyende, düzenli dış alan varlığında alan-spin etkileşmesinin oluşturduğu $h \sum_i S_i$ şeklinde ek bir enerji terimi oluşmaktadır. Bu çalışmada dış manyetik alanın sıfır olduğu durum göz önünde bulundurulur. Bütün büyüklüklerin beklenen değeri basit aritmetik ortalama alınarak hesaplanmaktadır. Yani Q_i herhangi bir ölçülebilir büyüklük olmak üzere Q_N 'nin beklenen değerinin ifadesi aşağıdaki gibidir.

$$\langle Q \rangle_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Q_i \quad (3.17)$$

Burada N zaman adımı, örgü veya her ikisi üzerinden ortalamaya karşılık gelmektedir.

4. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Yedi boyutlu Ising modelinin, periyodik sınır şartına uyan $L = 4, 6, 8$ doğrusal boyutlu örgülerde ve sonsuz örgü kritik sıcaklığı yakınında beş “bit”li demonlarla Creutz Cellular Automaton’ da, daha önce yapılmış olan bir çalışmadakine (Aktekin, 2000) göre enerji değerlerinin sayısı ve her enerjideki simülasyon sayısı artırılarak simülasyon yapılmıştır. $L = 4, 6, 8$ doğrusal boyutlu örgülerde simülasyon $12.451 \leq T \leq 13.149$ sıcaklık aralığında gerçekleşmiştir. Her örgü için 53 enerji değeri alınmıştır. Her bir toplam enerji için 7 bağımsız simülasyon yapılmıştır. Her bir bağımsız simülasyonda $L = 4$ örgüsü için $9,6 \times 10^5$ kere, $L = 6$ örgüsü için 6×10^5 kere ve $L = 8$ örgüsü için 3×10^5 kere örgünün bütün spinlerine ters çevirme kuralı uygulanmıştır. Daha önce yapılmış olan çalışmada (Aktekin, 2000) sonlu örgü ölçekleme fonksiyonlarını elde etmek için $12.4 \leq T \leq 13.3$ sıcaklık aralığında $L = 4$ için 21 enerji değeri, $L = 6$ için 12 enerji değeri ve $L = 8$ için 10 enerji değeri için simülasyon yapılmıştır. Her bir toplam enerji için 3 bağımsız simülasyon yapılmıştır. Her bir bağımsız simülasyonda $L = 4$ için 3×10^4 kere $L = 6$ ve $L = 8$ içinde 1.5×10^4 kere örgünün bütün spinlerine ters çevirme kuralı uygulanmıştır.

Sonlu örgü ölçekleme bağıntıları kullanılarak, sonlu örgü kritik sıcaklık değerinden $T_c^Z(L)$, $T_c^C(L)$ (Çizelge 4.1., Çizelge 4.2.) sonsuz örgü kritik sıcaklık değerleri (Şekil 4.1., Şekil 4.2., Çizelge 4.3.) hesaplanmıştır. Sonsuz örgü kritik sıcaklığında geçerli olan ölçekleme bağıntıları kullanılarak özısı için kritik üsler elde edilmiştir. Daha önceki çalışmada sonlu örgü ölçekleme bağıntıları kullanılarak, düzen parametresi ve manyetik alınganlığa ek olarak özısı ve binder parametresinin sıcaklığa bağlı değişimleri incelenmiş ve bu niceliklerin ölçekleme bağıntılarının doğruluğu denenmiştir. Sonsuz örgü kritik sıcaklık için manyetik alınganlık eğrilerinin kesişme noktasından, özısı eğrilerinin kesişme noktasından, Binder parametresi eğrilerinin kesişme noktasından, manyetik alınganlık ve özısı maksimumlarına karşılık gelen sıcaklık değerlerinden sonsuz örgü kritik sıcaklık için bağımsız değerler elde edilmiştir.

4.1. Sonlu Örgü Sıcaklık Değerinden Sonsuz Örgü Sıcaklık Değerlerinin Elde Edilmesi

Sonlu örgü kritik sıcaklık değerleri ile sonsuz örgü kritik sıcaklık değerleri arasındaki bağıntı “Eşitlik 4.1”deki gibidir. Bu bağıntı Binder tarafından 1985 yılında elde edilmiştir.

$$\frac{[T_c(L)-T_c]}{T_c} = AL^{\frac{-1}{\psi}} \quad (4.1)$$

“Eşitlik 4.1”deki ψ , kayma üssüdür.

$$\psi = \frac{1}{y_T^*} \quad (4.2)$$

$$y_T^* = \frac{d}{2} \quad (4.3)$$

“Eşitlik 4.1” daha açık olarak aşağıdaki şekilde ifade edilebilir.

$$T_c - T_c(L) \propto L^{\frac{-d}{2}} \quad (4.4)$$

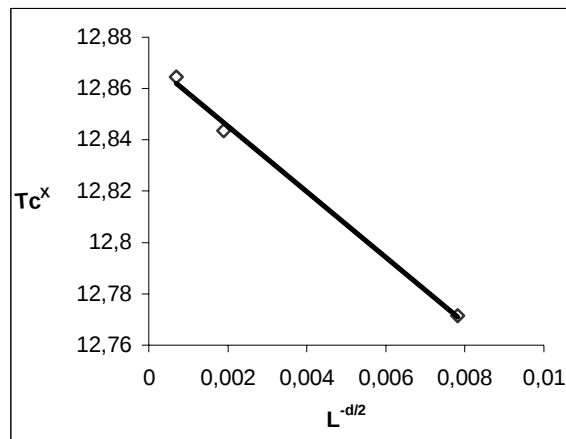
Özısı ve manyetik alınganlığın maksimum olduğu sıcaklık değerleri yardımı ile sonlu örgü sıcaklık değerlerinden sonsuz örgü sıcaklık değerleri elde edilmektedir. Ancak yedi boyutlu Ising modeli için Şekil 4.6 ve Şekil 4.11’den de görüldüğü gibi manyetik alınganlığın maksimumları özısınıninkilere göre daha sivri ve daha yüksek olduğundan $T_c^{\infty}(L)$ değerleri ile elde edilen T_c değerleri daha hassas olacaktır.

Çizelge 4.1. Manyetik alınganlığın maksimum olduğu sonlu örgü kritik sıcaklık değerleri

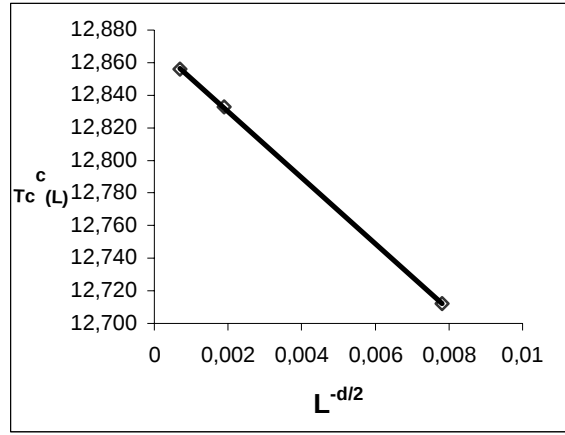
L	$T_c^x(L)$	χ_{maks}
4	12.7714 (5)	3.75 (2)
6	12.8435 (8)	15.58 (3)
8	12.8646 (3)	39.31 (16)

Çizelge 4.2. Özısının maksimum olduğu sonlu örgü kritik sıcaklık değerleri

L	$T_c^c(L)$	C_{maks}
4	12.712(1)	0.684(2)
6	12.833(1)	0.678(13)
8	12.856(14)	0.705(61)

**Şekil 4.1.** Manyetik alınganlık için $T_c^x(L)$ nin $L^{-d/2}$ ye karşı grafiği

Manyetik alınganlık için, $T_c^{\chi}(L)$, “Eşitlik 4.4” formülüne uygun olarak Şekil 4.1 elde edilmiştir. Bu grafiklerden $4 \leq L \leq 8$ aralığındaki verilere uyan doğru $L \rightarrow \infty$ iken T_c sonsuz örgü kritik sıcaklık değeri için $T_c^{\chi}(\infty) = 12.8709(32)$ elde edilmiştir.



Şekil 4.2. Özısı için $T_c^C(L)$ nin $L^{-d/2}$ ye karşı grafiği

Özısı için $T_c^C(L)$, “Eşitlik 4.4” formülüne uygun olarak Şekil 4.2 elde edilmiştir. Bu grafiklerden $4 \leq L \leq 8$ aralığındaki verilere uyan doğru $L \rightarrow \infty$ iken T_c sonsuz örgü kritik sıcaklık değeri için $T_c^C(\infty) = 12.8744(64)$ elde edilmiştir.

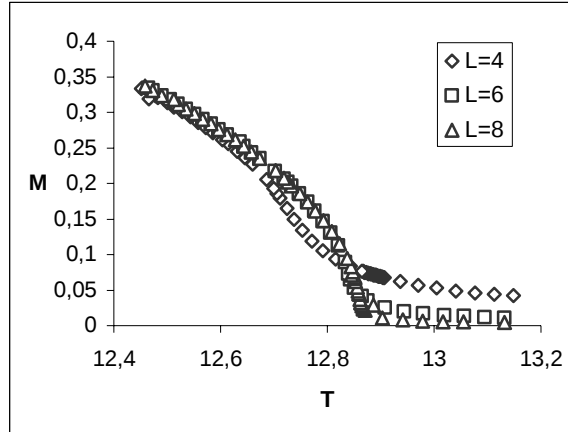
$T_c^{\chi}(\infty) = 12.8709(32)$, $T_c^C(\infty) = 12.8744(64)$ ’nin hesaplanan değerleri Çizelge 4.3’deki diğer çalışma sonuçları ile karşılaştırılmıştır. Elde edilen bu değerlerin diğer çalışmalardan elde edilen değerlerle uyumlu olduğu görülmüştür.

Çizelge 4.3. Yedi boyutlu Ising modelinin farklı çalışmalarda elde edilen kritik sıcaklık değerleri

T_c	Yöntem
12.8712	1/d açılımı(Fisher and Gaunt,1964)
12.86902(33)	Seri açılımı(Gofman et al.,1993)
12.8667(50)	Dinamik Monte Carlo(Gofman et al.,1993)
12.8700(42)	Creutz “Cellular Automaton”ı(Aktekin and Erkoç,2000)
Bu çalışma 12.8709(32) (manyetik alınganlık maksimumlarından)	Creutz “Cellular Automaton”ı
Bu çalışma 12.8744(64) (özümsü maksimumlarından)	Creutz “Cellular Automaton”ı

4.2 Düzen Parametresinin Sıcaklık ile Değişimi ve Sonsuz Örgü Kritik Sıcaklığında Düzen Parametresinin Sonlu Örgü Ölçekleme Bağıntısı

Manyetizasyonun sıcaklık ile değişimi Şekil 4.3 de verilmektedir.



Şekil 4.3. Manyetizasyonun sıcaklık ile değişimi

Manyetizasyonun sıcaklık ile değişimi Şekil 4.3’de görüldüğü gibi doğrusal boyut artırıldığında sonsuz örgü kritik sıcaklığına (T_c) yaklaşmaktadır.

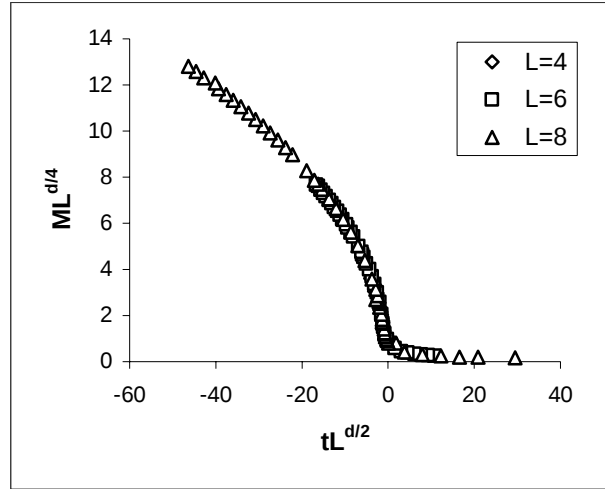
Yedi boyutlu Ising modelinde düzen parametresi (manyetizasyon) için sonlu örgü ölçekleme denklemi $L \rightarrow \infty$, $t \rightarrow 0$ durumunda

$$M = L^{-d/4} X(x) \quad (4.5)$$

şeklindedir. Burada $x = tL^{d/2}$, $t = (T - T_c)/T_c$ ve X ölçekleme fonksiyonudur.

$$M_c(L) \propto L^{-d/4}, t=0 \quad (4.6)$$

“Eşitlik 4.6”de verilen bağıntı, sonsuz örgü kritik sıcaklığında manyetizasyon için sonlu örgü ölçekleme bağıntısıdır. “Eşitlik 4.6”deki bağıntı, simülasyon sonucunda elde edilen verilerin analizini yapmada büyük önem taşımaktadır (Binder, 1985; Aktekin, 2000).

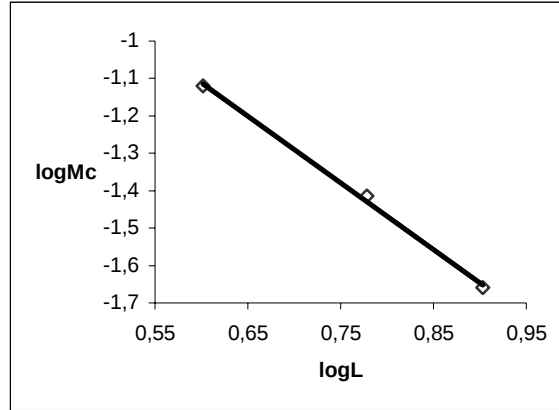


Şekil 4.4. Ölçeklenmiş manyetizasyonun ölçeklenmiş sıcaklık ile değişimi

Şekil 4.4’de farklı L değerleri için ölçeklenmiş manyetizasyonun ölçeklenmiş sıcaklığa göre değişim eğrilerinin üst üste geldiği görülmektedir. Bu durum “Eşitlik 4.6”da verilen ölçekleme bağıntısının doğru olduğunu göstermektedir.

Çizelge 4.4. Sonsuz örgü kritik sıcaklığında, $T_C = 12.8700(42)$ ve $L = 4, 6, 8$ örgülerinde düzen parametresinin değerleri

L	$M_L(T_C)$
4	0.0758 (0)
6	0.0385 (28)
8	0.0219 (63)

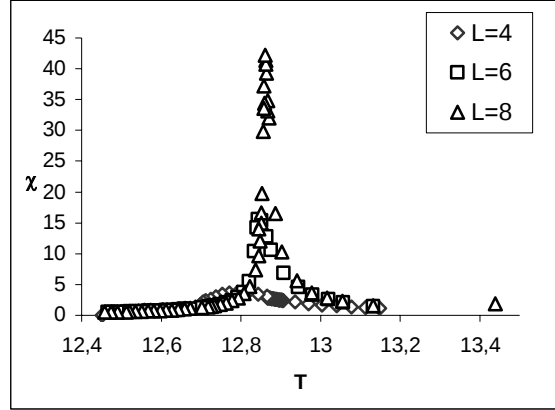


Şekil 4.5. Düzen parametresinin M_c sonsuz örgü kritik sıcaklığındaki değerinin sonlu örgü doğrusal boyutuna karşı log-log grafiği ($4 \leq L \leq 8$)

Düzen parametresi için sonlu örgü ölçekleme bağıntısı “Eşitlik 4.6”daki gibi değişmektedir. Şekil 4.5’deki doğrunun eğimi $\frac{d}{4} = 1.78(64)$ değerini vermektedir. Bu değer $\frac{d}{4} = \frac{7}{4}$ teorik değerle uyum halindedir.

4.3. Manyetik Alınganlığın Sıcaklık ile Değişimi ve Sonsuz Örgü Kritik Sıcaklığında Manyetik Alınganlığın Sonlu Örgü Ölçekleme Bağıntısı

Manyetik alınganlığın sıcaklık ile değişimleri Şekil 4.6 ve Şekil 4.7’de verilmektedir.



Şekil 4.6. Manyetik alınganlığın sıcaklık ile değişimi

Manyetik alınganlığın sıcaklık ile değişim grafiği incelendiğinde (Şekil 4.6.), örgünün doğrusal boyutunun artmasıyla grafikteki eğrilerin kritik sıcaklık civarında sonsuza doğru gittiği, azalmasıyla da yuvarlaklaştığı görülmektedir.

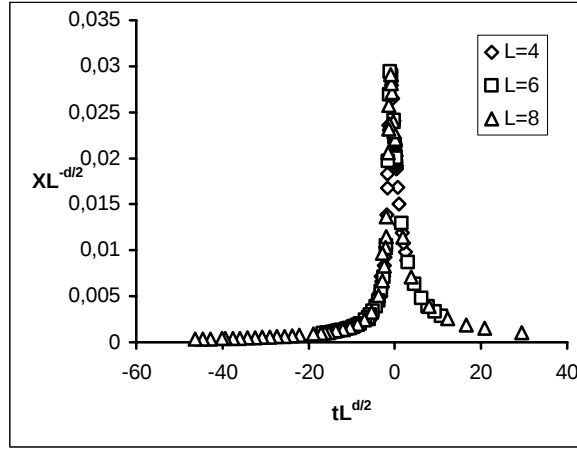
Yedi boyutlu Ising modelinde manyetik alınganlık için $L \rightarrow \infty$, $t \rightarrow 0$ durumunda sonlu örgü ölçekleme denklemi;

$$\chi = L^{d/2} Y(x) \quad (4.7)$$

şeklinde ifade edilmektedir. Burada $t = (T - T_c)/T_c$, $x = tL^{d/2}$ ve Y 'de ölçekleme fonksiyonudur.

$$\chi_c(L) \propto L^{d/2}, \quad t \rightarrow 0 \quad (4.8)$$

“Eşitlik 4.8”de verilen bağıntı, sonsuz örgü kritik sıcaklığında manyetik alınganlığın sonlu örgü ölçekleme bağıntısıdır. “Eşitlik 4.8”deki bağıntı yardımı ile yapılan simülasyon sonucunda elde edilen verilerin analizini yapmada büyük önem taşımaktadır.

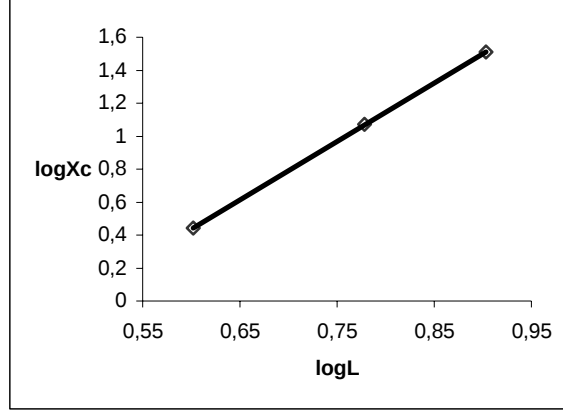


Şekil 4.7. Ölçeklenmiş manyetik alınganlığın ölçeklenmiş sıcaklık ile değişimi

Şekil 4.7’de görüldüğü gibi farklı L değerleri için ölçeklenmiş manyetizasyonun ölçeklenmiş sıcaklığa göre değişim eğrilerinin üst üste geldiği görülmektedir. Eğrilerin üst üste gelmesi “Eşitlik 4.8”deki denklemin geçerli olduğunu göstermektedir. Bu durum $d = 7$ için sonlu örgü ölçekleme bağıntısını doğrulamaktadır.

Çizelge 4.5. Sonsuz örgü kritik sıcaklığında, $T_C = 12.8700(42)$ ve $L = 4, 6, 8$ örgülerinde manyetik alınganlık değerleri

L	$\chi_L(T_C)$
4	2.77 (1)
6	11.75 (9)
8	32.38 (39)



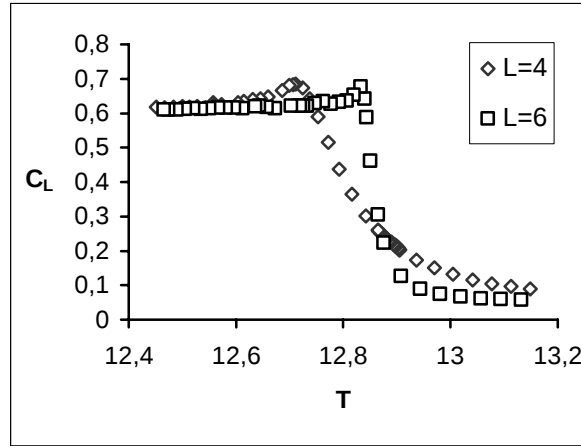
Şekil 4.8. Manyetik alınganlığın χ_c sonsuz örgü kritik sıcaklığındaki değerinin sonlu örgü doğrusal boyutuna karşı log-log grafiği ($4 \leq L \leq 8$)

Manyetik alınganlık için sonlu örgü ölçekleme bağıntısı “Eşitlik 4.8”de verilmiştir.

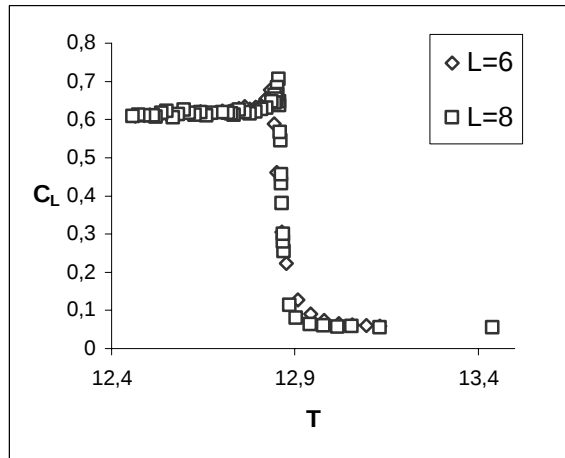
Şekil 4.8’deki doğrunun eğimi $\frac{d}{2} = 3.544(24)$ değerini vermektedir. Bu değer $\frac{d}{2} = \frac{7}{2}$ teorik değerle uyum halindedir.

4.4. Özısının Sıcaklık ile Değişimi ve Sonsuz Örgü Kritik Sıcaklığında Özısının Sonlu Örgü Ölçekleme Bağıntısı

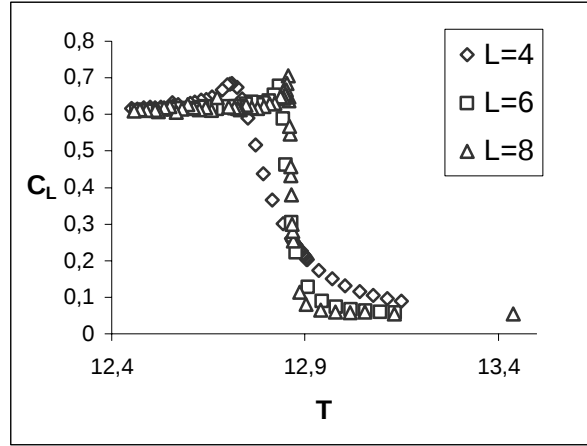
Özısının sıcaklık bağımlılığı doğrusal boyutu $L = 4, 6, 8$ olan periyodik sınır şartlı sonlu örgüler için hesaplanmıştır. Sonuçlar Şekil 4.9, Şekil 4.10 ve Şekil 4.11’de gösterilmiştir. Bu grafiklerden, hata sınırları içerisinde doğrusal boyutun artması ile özısının maksimumların sivriliğinin arttığı görülmektedir. Bu Ortalama Alan Teorisine göre özısının beklenen davranışdır (Rudnick et al., 1985). Özısı maksimumların sıcaklık değerleri sonsuz örgüye göre doğrusal boyuta bağlı olarak kaymakta ve yuvarlaklaşma göstermektedir.



Şekil 4.9. Özısının sıcaklık ile değişimi (L=4,6)



Şekil 4.10. Özısının sıcaklık ile değişimi (L=6,8)



Şekil 4.11. Özısının sıcaklık ile değişimi ($L=4,6,8$)

Çizelge 4.6. Özısının maksimum olduğu sonlu örgü kritik sıcaklık değerleri ile $T_c = 12.8700(42)$ sıcaklık değerine karşılık gelen özısı değerleri

L	$T_c^C(L)$	$C_L^{\max}$	$C_L(T_c)$
4	12.712(1)	0.684(2)	0.251(1)
6	12.833(1)	0.678(13)	0.266(33)
8	12.856(14)	0.705(61)	0.259(42)

Örgünün doğrusal boyutu L arttıkça, sonsuz örgünün kritik sıcaklığı T_c ile sonlu örgünün kritik sıcaklığı $T_c^C(L)$ arasındaki fark azalır. Çizelge 4.6 incelendiğinde doğrusal boyut (L) arttıkça sonsuz örgü kritik sıcaklığının (T_c)'ye yaklaştığı görülmektedir. Sonsuz örgü kritik sıcaklığında ($T_c = 12.8700(42)$) bulunan özısı $C_L(T_c)$ değerlerinin ve farklı doğrusal boyutlar (L) için özısı maksimumlarının birbirine yaklaşık olarak eşit olduğu görülmektedir.

Serbest enerji yoğunluğu f_L aşağıdaki gibi ifade edilmektedir (Merdan and Atille,2006).

$$f_L = L^{-d} F(tL^{\frac{1}{(2-\alpha)/d}}, hL^{\frac{(\gamma+\beta)}{(2-\alpha)/d}}) \quad (4.9)$$

$$f_L = L^{-d} F(tL^{y_t^*}, hL^{y_h^*}) \quad h \rightarrow 0, \quad L \rightarrow \infty \quad (4.10)$$

$$y_t^* = \frac{1}{v^*} \quad (4.11)$$

$$y_h^* = \frac{\Delta}{v^*} \quad (4.12)$$

$$dv^* = 2 - \alpha \quad (4.13)$$

$$\Delta = \gamma + \beta \quad (4.14)$$

$$t = \frac{T - T_C}{T_C} \quad (4.15)$$

Burada t indirgenmiş sıcaklık olup $T > T_C$ durumunda $t > 0$, $T < T_C$ durumunda $t < 0$ şeklindedir. h indirgenmiş dış manyetik alan, α özısının, β düzen parametresinin ve γ ise manyetik alınganlığın sonsuz örgüdeki kritik üsleridir.

Özısı için elde edilen veriler aşağıdaki sonlu örgü ölçekleme bağıntılarına göre analiz edilmektedir (Kalay, 2001).

$$C_L = -\frac{\partial^2 f_L}{\partial t^2} = L^{\frac{\alpha}{(2-\alpha)/d}} F(tL^{\frac{1}{(2-\alpha)/d}}, hL^{\frac{(\gamma+\beta)}{(2-\alpha)/d}}) \quad (4.16)$$

veya

$$v^* = \frac{(2-\alpha)}{d}, \quad y_t^* = \frac{1}{(2-\alpha)/d} \quad \text{ve} \quad y_h^* = \frac{(\gamma+\beta)}{(2-\alpha)/d} \quad \text{tanımları kullanılarak;}$$

$$C_L = L^{\alpha/v^*} F(tL^{y_t^*}, hL^{y_h^*}) \quad (4.17)$$

elde edilir. “Eşitlik 4.17”de $h = 0, \alpha = 0$ alındığında

$$C_L = F(tL^{y_t^*}) \quad (4.18)$$

veya

$$C_L = F(tL^{7/2}) \quad (4.19)$$

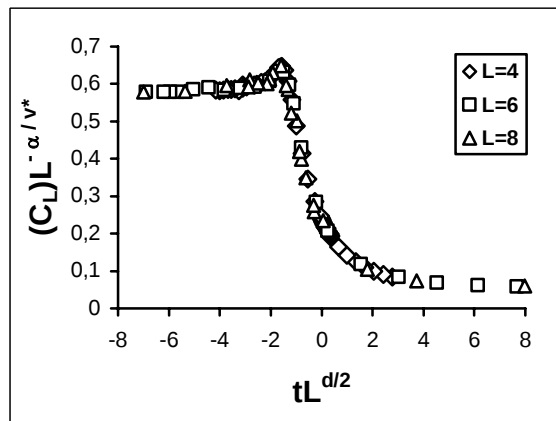
haline gelirler. $t = 0$ ve $h = 0$ alındığında

$$C_L \propto L^{\alpha/\nu^*} \quad (4.20)$$

veya

$$C_L \propto L^{\frac{\alpha}{(2-\alpha)/d}} \quad (4.21)$$

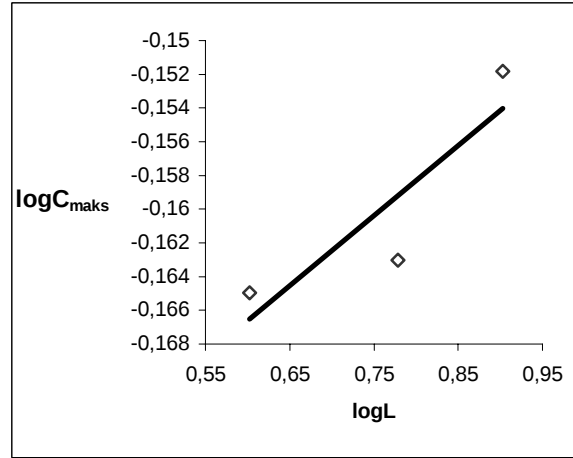
şeklini alırlar.



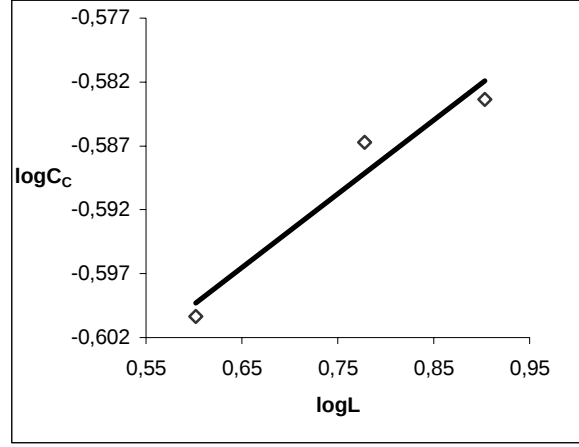
Şekil 4.12. Özısıının singüler kısmının ölçeklenmiş sıcaklık ile değişimi

Özısının düzenli kısmından gelen sabit katkı ihmal edildiğinde $b=0$, ölçeklenmiş sıcaklığa bağlı eğrilerin (Şekil 4.12.) üst üste geldiği, ancak sıcaklık sonsuz örgü sıcaklığı T_c 'ye göre azaldıkça farklı L değerlerine ait eğrilerin birbirinden ayrılmaya başladığı görülmektedir. İndirgenmiş sıcaklık ifadesinde sonsuz örgü sıcaklığı için $T_c = 12.8700(42)$ (Aktekin and Erkoç, 2000) kullanılmıştır.

“Eşitlik 4.20” ve “Eşitlik 4.21” denklemlerinden $\frac{\alpha}{v^*} = \frac{\alpha}{(2-\alpha)/d}$ elde edilerek özısının kritik üssü olan α 'nın değeri bulunabilir.



Şekil 4.13. Özısının maksimum değerlerinin $C_{\max}$ sonlu örgünün doğrusal boyutuna karşı log-log grafiği ($4 \leq L \leq 8$)



Şekil 4.14. Özısının sonsuz örgü kritik sıcaklığındaki değeri C_c nin sonlu örgü doğrusal boyutuna karşı log-log grafiği ($4 \leq L \leq 8$)

Doğrusal boyut $4 \leq L \leq 8$ aralığı için C_{maks} 'ın L 'ye karşı (Şekil 4.13.) ve C_c 'ın L 'ye karşı (Şekil 4.14.) $\log - \log$ grafiklerinin eğimlerinden sırasıyla $\frac{\alpha}{\nu^*} = 0.05(40)$ ve $\frac{\alpha}{\nu^*} = 0.04(13)$ özısı kritik üsleri elde edilmiştir.

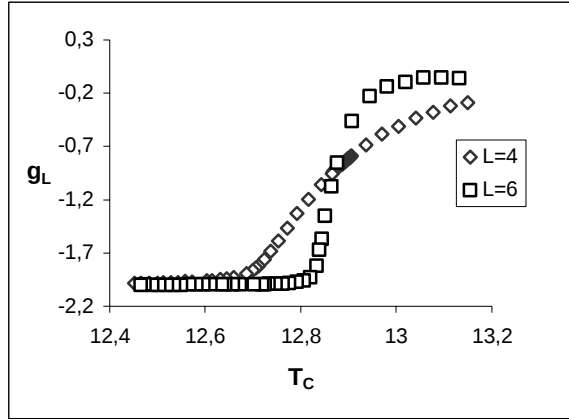
Çizelge 4.7. Doğrusal boyut (L) aralığı için $C_L(T_c)$ nin L 'ye karşı ve C_{maks} 'ın L 'ye karşı log-log grafiklerinin eğimi

L için aralık	$\frac{\alpha}{\nu^*}$
$4 \leq L \leq 8$	0.05(40)
$4 \leq L \leq 8$	0.04(13)

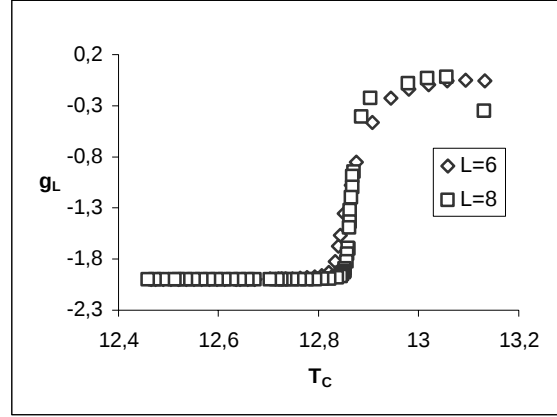
Çizelge 4.7'deki verilerden yararlanarak $\alpha = 0.011(76)$, $\alpha_{\max} = 0.011(4)$ değerleri elde edilir. Bu iki bağımsız değer in ortalaması olan $\alpha = 0.011(76)$ değeri $\alpha = 0$ teorik değeri ile uyum halindedir.

4.5. Binder Parametresinin Sıcaklık ile Değişimi ve Sonsuz Örgü Kritik Sıcaklığında Binder Parametresinin Sonlu Örgü Ölçekleme Bağintısı

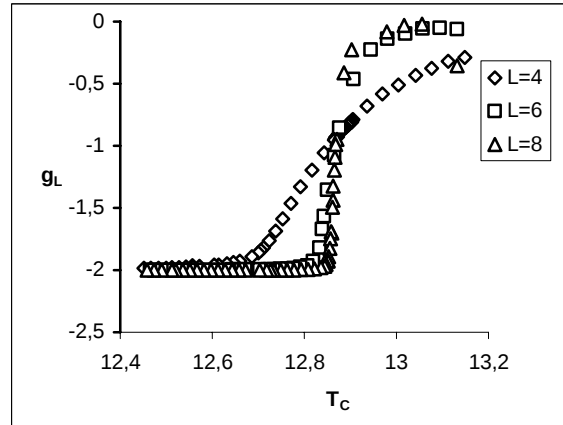
Binder parametresinin sıcaklık ile değişim grafikleri Şekil 4.15, Şekil 4.16 ve Şekil 4.17'de verilmektedir.



Şekil 4.15. Binder parametresinin sıcaklık ile değişimi (L=4,6)



Şekil 4.16. Binder parametresinin sıcaklık ile değişimi ($L=6,8$)



Şekil 4.17. Binder parametresinin sıcaklık ile değişimi ($L=4,6,8$)

Binder parametresi g_L ;

$$g_L = \frac{\langle S^4 \rangle_L}{\langle S^2 \rangle_L^2} - 3 = \left[\frac{\chi_L^{(4)}}{L^4 \chi_L^4} \right]_{h=0} \quad (4.22)$$

şeklinde ifade edilmektedir (Binder et. al., 1985). Binder parametresinin sıcaklık ile değişim grafiğinde, eğrilerin kesiştiği nokta $L \rightarrow \infty$ iken T_c kritik sıcaklığına karşılık gelmektedir. Binder parametresinin sıcaklık ile değişim eğrilerinin kesiştiği sıcaklık değerinin Şekil 4.15'deki grafikten $T_c = 12.909(3)$ ve Şekil 4.16'deki grafikten $T_c = 12.87(2)$ olduğu görülmektedir.

Çizelge 4.8. Sonlu örgü değerleri için Binder parametresi (g_L) ve özısının (C_L) sıcaklık ile değişim grafiklerinin kesim noktasından elde edilen sonsuz örgü kritik sıcaklık (T_c) değerleri

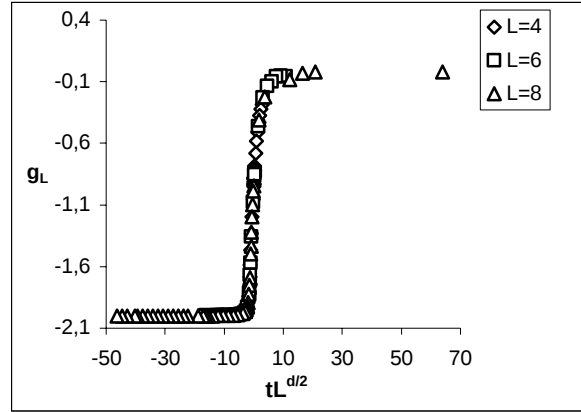
L	$g_L - T$ grafiğindeki eğrilerin kesim noktasından elde edilen T_c değerleri	$C_L - T$ grafiğindeki eğrilerin kesim noktasından elde edilen T_c değerleri
4,6	12.909(3)	12.959(18)
6,8	12.870(2)	12.870(5)

Çizelge 4.8'de doğrusal boyut (L) arttıkça sonsuz örgü kritik sıcaklığına (T_c) yaklaşıldığı görülmektedir. Şekil 4.16'da eğrilerin kesişme değerlerinden elde edilen kritik sıcaklık değeri ($T_c = 12.870(2)$) sonsuz örgü kritik sıcaklık değeri ($T_c = 12.8700(42)$) ile uyum halindedir.

Binder parametresi için sonlu örgü ölçekleme ifadesi ,

$$g_L \alpha G(tL^{y_T}^*), \quad L \rightarrow \infty \quad (4.23)$$

şeklindedir.



Şekil 4.18. Binder parametresinin ölçeklenmiş sıcaklık ile değişimi

Farklı L değerleri için Binder parametresinin ölçeklenmiş sıcaklığa göre grafiği Şekil 4.18'deki gibidir. Grafikteki eğrilerin üst üste gelmesi “Eşitlik 4.23” deki ölçekleme ifadesinin doğru olduğunu göstermektedir.

KAYNAKLAR

- AKTEKİN, N., 1994**, Simulation of the three-dimensional Ising model by Creutz algoritm, 1.İst. Fiz. Gün., İstanbul.
- AKTEKİN, N., 1995**, Simulation of the Four-dimensional Ising model on the Creutz Cellular Automaton, 2. İst. Fiz. Gün., İstanbul.
- AKTEKİN, N., 1995**, Üç boyutlu Ising Modelinin Kritik Üslerinin Creutz “Cellular Automaton” ında Hesaplanması 2. Din. Sist. Semp., Bursa.
- AKTEKİN, N., 1995**, Simulation of the three-dimensional Ising model on the Creutz Cellular Automaton, Physica A, 219, 436.
- AKTEKİN, N., 1996**, Beş Boyutlu Ising modelinin Simulasyonu, Türk Fiz. Der., 16.Fiz. Kong., Balıkesir.
- AKTEKİN, N., 1996**, Simulation of the four-dimensional Ising model on the Creutz Cellular Automaton, Physica A, 232, 397.
- AKTEKİN, N., 1996**, Simulation of the seven-dimensional Ising model on the Creutz Cellular Automaton, 1.Müh. ve Fen Bil. Mat. ve Bilgi. Uygulamaları Semp., Manisa.
- AKTEKİN, N., 1996**, Yedi boyutlu Ising modelinin Creutz “Cellular Automaton”ında simulasyonuna kinetik enerji seviye sayısının etkisi, 3. Din. Sist. Semp.u, Bolu.
- AKTEKİN, N., 1997**, 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).

- AKTEKİN, N., 1997**, Increasing the Precision in the Simulation of the Four-dimensional Ising model on the Creutz Cellular Automaton, 1.Kız. Fen Bil. Kong., Kırıkkale.
- AKTEKİN, N., 1997**, Nonlinear dynamical critical exponents of the Ising model in five to seven dimensions, 4. İst. Fiz. Gün., İstanbul.
- AKTEKİN, N., 1997**, Simulation of the eight-dimensional Ising model on the Creutz Cellular Automaton, Int.J.Mod.Phys. C., 8, 287.
- AKTEKİN, N., GÜNEN, A., SAĞLAM, Z., 1999**, A finite-size scaling study of the four-dimensional Ising model on the Creutz Cellular Automaton, Int.J.Mod.Phys.C., 10, 875.
- AKTEKİN, N., 1999**, Effect of the number of energy levels of a demon on the simulation of the Ising model in five to seven dimensions on the Creutz Cellular Automaton, Int.J.Mod.Phys. C., 10, 621.
- AKTEKİN, N., ERKOÇ, Ş., 2000**, The test of the finite-size scaling relations for the six-dimensional Ising model on the Creutz Cellular Automaton, Physica A., 284, 206.
- AKTEKİN, N., KALAY, M., 2000**, Finite-size scaling functions of the five-dimensional Ising model, 4th Gen. Conf. of the Balk. Phys. Un., Bulgaria, Veliko Turnovo.
- AKTEKİN, N., 2000**, The Simulation of the Ising Model on the Creutz Cellular Automaton, Annual Reviews of Computational Physic VII, edited by D.Stauffer, World Scientific, Singapore.
- AKTEKİN, N., ERKOÇ, Ş., 2001**, The test of the finite-size scaling relations for the seven-dimensional Ising model on the Creutz Cellular Automaton, Physica A., 290, 123.

- AKTEKİN, N., 2001**, The finite-size scaling functions of the four-dimensional Ising model, *J.Stat.Phys.*,104, 1397.
- AKTEKİN, N., ERKOÇ, Ş., KALAY, M., 1999**, The test of the finite-size scaling relations for the five-dimensional Ising model on the Creutz Cellular Automaton, *Int.J.Mod.Phys. C.*, 10, 1237.
- AKTEKİN, N., SAĞLAM, M., BOYACIOĞLU, B., 2001**, Effect of the number of energy levels of a demon for the simulation the Four-dimensional Ising model on the Creutz “cellular automaton”, *İst. Tek. Ün.*, 8.İst. Fiz. Gün.
- BAXTER, R.B., 1989**, Exactly Solved Models in Statistical Mechanics, Academic Press, London.
- BHATTACHARJEE, S.M., KHARE, A., 1999**, Fifty years of the exact solution of the two-dimensional Ising model by Onsager, *Cond.Mat.*9511003, 2, 1.
- BINNEY, J.J., DOWRICK, N.J., FISHER, A.J., AND NEWMAN, M.E.J., 1992**, The Theory of Critical Phenomena, Oxford Universty Press.
- BINDER, K., NAUENBERG, M., PRIVMAN, V., YOUNG, A.P., 1985**, Finite-size test of hyperscaling, *Phys.Rev.* , 31, 1498.
- BLUME, M., EMERY, V.Y., 1971**, Ising Model for the λ Transition and Phase Separation in mixtures. *Phys.Rev.A.*, 4, 1071.
- BREZIN, E., ZINN-JUSTIN, J., 1985**, Finite size effect in phase transitions, *Nucl.Phys. B.*, 257, 867.

- CHEN, X.S., DOHM, V., 1998**, Failure of universal finite size scaling above the upper critical dimension, *Physica A.*, 251, 439.
- CREUTZ, M., 1986**, Deterministic Ising Dynamics, *Ann.Phys.*, 167, 62.
- ÇİVİ, M., 1990**, Klasik yolak yöntemi ile bir molekül bozunmalarının incelenmesi, G.Ü. Fen Bil. Ens.Doktora Tezi.
- DRESS, C., 1995**, Microcanonical simulations with a large number of demons, *J.Phys. A.*, 28, 7051.
- DURAN, A., 2005**, Sekiz Boyutlu Ising Modelin $(4)_4^8$ Örgüsünde Creutz Cellular Automaton ile İncelenmesi, G.Ü. Fen Bil. Ens.Yüksek Lisans Tezi
- EKEN, M., TURHAN, Ş., AKTEKİN, N., 1995**, Simulation of Diffusion on a Cellular Automaton in Two-Dimensional Space, 2. İst. Fiz. Gün., İstanbul.
- FISHER, M.E., GAUNT, D.S., 1964**, Ising model and Self-Avoiding walks on hypercubical lattices and “High-Dindity” expansions, *Phys.Rev.A.*, 1, 224.
- FISHER, M.E., BURFORT, R.J., 1967**, Theory of critical point and correlations I.The Ising model, *Phys.Rev.*, 156, 583.
- FISHER, M.E., 1974**, The renormalization group in the theory of critical behavior, *Rev.Mod.Phys.*, 46, 597.
- GUTTMANN, A.J., 1981**, Correction to scaling exponents and critical properties of the n-vector model with dimensionality ≥ 4 , *J.Phys.A.*, 14, 233.
- GOFMAN, M., ADLER, J., AHARONY, A., HARRIS, A.B., STAUFFER, D., 1993**, Series and Monte Carlo study of high-dimensional Ising models, *J.Stat.Phys.*, 71, 1221.

- HAHNE, F.J.W., 1983**, Lecture Notes in Physics, Critical Phenomena, Springer-Verlag.
- HERMANN, D.W., 1989**, Computer Simulation Methods in Theoretical Physics, 2nd ed., Springer-Verlag.
- HERMANN, H.J., CARMESİN, H.O., STAUFFER, D., 1987**, Periods and Clusters in Ising Cellular Automata, J.Phys.A., 20,4939.
- HERMANN, H.J., 1986**, Fast algorithm for the simulation of Ising models, J.Stat.Phys.,45,145.
- HONDA, Y., 1993**, Monte Carlo renormalization-group study on the two-dimensional spin-1 Ising model.Phys.Lett.A., 184,74.
- HUANG, K., 1987**, Statistical Mechanics, 2nd ed., John Wiley and Sons, Newyork.
- JAIN, A.K. and LANDAU, D.P., 1980**, Monte Carlo study of the fcc Blume-Capel model. Phys.Rev.B., 445.,
- KALAY, M., 2001**, Beş Boyutlu Ising Modelinin “Creutz Cellular Automaton”ında İncelenmesi, G.Ü. Fen Bil. Ens.Doktora Tezi.
- KALAY, M., AKTEKİN, N., 2001**,Finite-size scaling study of The Binder parameter for the Five-Dimensional Ising model, İst. Tek. Ün., 8.İst. Fiz. Gün.
- KALAY, M., AKTEKİN, N., 2001**, The Finite-size scaling study of the Specific Heat for the Five-Dimensional Ising model, First Hell. Turk. Int.Phys. Conf.(Kos Greece-Bodrum Turkey).

- KARABACAK, M., 2001**, Pd_n Atom Topaklarının Geometrik Yapılarının ve Erime Dinamiğinin İncelenmesi, G.Ü. Fen Bil. Ens.Doktora Tezi.
- KENNA, R., LANG, C.B., 1991**, Finite size scaling and the zeroes of the partition function in the ϕ_4^4 model, Phys.Lett.B., 264, 396.
- KENNA, R., LANG, C.B., 1993**, Renormalization group analysis of finite size scaling in the ϕ_4^4 model, Nucl.Phys. B., 393, 461.
- KUTLU, B., 1995**, İki Boyutta Ising Modelinin “Creutz Cellular Automaton”ı ile İncelenmesi, G.Ü. Fen Bil. Ens.Doktora Tezi.
- KUTLU, B., 1997**, Critical behavior of the two-dimensional Ising model with next-nearest-neighbor antiferromagnetic interaction, Physica A, 234, 807.
- KUTLU, B., 1997**, Critical exponents of the two-dimensional Ising model with next-nearest-neighbor and four-spin interaction on the Creutz Cellular Automaton, Physica A, 243, 199.
- KUTLU, B., KASAP, M., TURHAN, Ş., 2000**, The simulation of two-dimensional Ising model in the presence of an external magnetic field on the Creutz Cellular Automaton, Int.J.Mod.Phys.C,11,561.
- KUTLU, B., 2001**, The Simulation of the 2D Ferromagnetic Blume-Capel model on a Cellular Automaton, Int.J.Mod.Phys.C, 12, 1401.
- LAI, P.Y., MON, K.K., 1990**, Finite-size scaling of the Ising model in four dimensions, Phys.Rev.B., 41, 9257.
- LANG, W.M., STAUFFER, D., 1987**, Test of three-dimensional Q2R Ising algorithm, J.Phys.A, 20,5413.

- MERDAN, Z., AKTEKİN, N., 2002,** Altı Boyutlu Ising Modelinin Creutz Cellular Automaton'ında Simülasyonu.,Türk. Phys.Soc.21th. Pyhs.Con.Turkey.,(Balkan Phys.Lett.10., 95,
- MERDAN, Z., AKTEKİN, N., 2002,** Altı Boyutlu Ising Modelinin Creutz Cellular Automaton'ında Simülasyonu, Türk Fizik Derneği 21. Fizik Kongresi,
- MERDAN, Z., 2003,** Altı Boyutlu Ising Modelinin Creutz Cellular Automaton'ında İncelenmesi, G.Ü. Fen Bil. Ens.Doktora Tezi.
- MERDAN, Z., BAYIRLI, M., GÜNEN, A., 2004,** Dört Boyutlu Ising Model İçin Bilinen Sonlu Örgü Ölçekleme ve Logaritmik Düzeltmeli Sonlu Örgü Ölçekleme Fonksiyonlarının İncelenmesi, S.Ü. Fen Edebiyat Fak. Fen Dergisi, 23, 33-43.
- MERDAN, Z., ERDEM, R., 2004,** The Finite-Size Scaling Study of The Specific Heat and The Binder Parameter For The Six-Dimensional Ising Model, Physics Letters A, 330 403-407
- MERDAN, Z., ATİLLE, D., 2005** The finite-size scaling study of the specific heat and the Binder parameter for the seven-dimensional Ising model Türk Fizik Derneği 23. Fizik Kongresi, 13-16 Eylül
- MERDAN, Z., BAYIRLI, M., 2005,** 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, Applied Mathematics and Computation, 167 212.
- MERDAN, Z., DURAN, A., ATİLLE, D., MÜLAZIMOĞLU, G., GÜNEN, A., 2005,** The Test of the Finite-Size Scaling Relation of the Ising Models in Seven and Eight Dimensions on the Creutz Cellular Automaton, Physica A, 366, 265.

- MERDAN, Z., GÜNEN A., and MÜLAZIMOĞLU, G., 2005**, Effect of the Number of Energy Levels of a Demons for the Simulation of the Four-Dimensional Ising Model on the Creutz Cellular Automaton”, International Journal of Modern Physics C, 16 1269 .
- MERDAN, Z., GÜNEN, A., and ÇAVDAR, Ş., 2005**, Dynamical finite-size scaling function of the four dimensional Ising model for Creutz algorithm. 12. Uluslar Arası İstatistik Fizik Günleri,
- MERDAN, Z., KALAY, M., 2005**, The finite-size scaling study of the specific heat and the Binder parameter for the five-dimensional Ising model, Türk Fizik Derneği 23. Fizik Kongresi.
- MERDAN, Z. and ATİLE, D., 2006**, The Finite-Size Scaling Study of the Specific Heat and Binder Parameter for the Seven- Dimensional Ising Model, Modern Physics Letters B (In Press).
- MERDAN Z., GÜNEN A., and ÇAVDAR, Ş., 2006**, Dynamical Finite-Size Scaling Function of the Four-Dimensional Ising Model for Creutz Algorithm, Physica A,359 415.
- METROPOLIS, N., ROSENBLUTH, A.W., ROSENBLUTH, M.N., TELLER, A.H., TELLER, E., 1953**, Equation of State Calculations by Fast Computing Machines, J.Chem.Phys.,21,1087.
- MON, K.K., 1996**, Finite-size scaling of the 5D Ising model, Europhys.Lett., 34, 399.
- MOURITSEN, O.G., KNAK JENSEN, J.J., 1979**, Experimental investigation of the logarithmic correction to the mean-field order parameter of the four- dimensional Ising ferromagnet, Phys.Rev. B., 19, 3663.

- MÜLAZIMOĞLU, G., 2003**, Dört Boyutlu Ising Modelin $(6)_4^4$ Örgüsünde Creutz Cellular Automaton ile İncelenmesi, G.Ü. Fen Bil. Ens.Yüksek Lisans Tezi.
- MÜNKEL, C., HEERMANN, D.W., ADLER, J., GOFMAN, M., STAUFFER, D., 1993**, The dynamical critical exponent of the two-three and five dimensional kinetic Ising model, Physica A., 193, 540.
- ONSAGER, L., 1944**, Crystal Statistics I.A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition, Phys.Rev., 65,117.
- PACKARD, H.N.,WOLFRAM, S.,1985**, Two-Dimensional Cellular Automata, J.Stat.Phys. 38,901.
- PARISI, G., RUIZ-LORENZO, J.J., 1996**, Scaling above the upper critical dimension in Ising model, Physics. Rev. B., 54, R3698.
- PIRES, A., LANDAU, D.P., HERMANN, H., 1989**, Computational Physics And Cellular Automata, World Scientific.
- PRIVMAN, V., 1990**, Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems, World Scientific, Singapore.
- POMEAU, Y., 1984**, Invariant in Cellular Automata, J.Phys.A.,17,L415.
- POMEAU Y., AND VICHNIAC G.Y., 1988**, Extensions of Q2R: Potts Model and other lattices, J.Phys.A,Math.Gen.21, 3297.
- RICKWARDT, C., NIELABA, P., BINDER, K., 1994**, A finite size scaling study of the 5-dimensional Ising model, Ann.Phys.(Leipzig), 3, 483.
- RUDNICK, J., GUO, H., JASNOW, D., 1985**, Finite-size scaling and the renormalization group, J.Stat.Phys., 41, 353.

- SCHULTE, M., STIEFELHAGEN W.,DEMME, E.S., 1987**, Period in the Chaotic Phase of Q2R Automata, J.Phys.A.Math.Gen.20, L1023.
- SERWAY, A., R., 1992**, Physics for Scientistc Engineers with Modern Physics, Sanders College Publishing.
- STANLEY, H.E., 1971**, Introduction to Phase Transitions and Critical Pheonema, Oxford Universty Press.
- SWENDSEN, R.H., WANG, J-S., 1987**, Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simülations, Phys.Rev.Lett. 58, 86.
- TURHAN, Ş, EKEN, M, AKTEKİN, N., 1995**, Difüzyonun iki boyutlu “Cellular Automaton”da sistematik incelenmesi, Türk Fiz. Der., 15. Fiz. Kon., Antalya.
- TURHAN, Ş., 1997**, Difüzyonun İki Boyutlu Uzayda “Cellular Automaton” ile incelenmesi, G.Ü. Fen Bil. Ens.Doktora Tezi.
- VICHNIAC, G.Y., 1984**, Simulating physics with Cellular Automata, Physica D, 10,96.
- WOLFRAM, S., 1983**, Statistical mechanics of cellular automata, Rev.Mod.Phys.,55,527.
- WOLFRAM, S., 1984**, Universality and Complexity in cellular Automata, Physica D,10,1.
- WOLFRAM, S., 1986**, Theory and Applications of Cellular Automata, World Scientific.
- YEOMANS, J.M., 1992**, Statistical Mechanics of Phase Transitions, Clarendon Press, Oxford.

ÖZGEÇMİŞ

1982 yılında Lübnan’da doğdu. İlk, orta ve lise öğrenimini Mersin’de tamamladı. 1999 yılında Gaziosmanpaşa Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümüne kayıt yaptırdı. 2003 yılında Gaziosmanpaşa Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü’nden mezun oldu. 2004 yılında bahar yarıyılında Gaziosmanpaşa Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü’nde yüksek lisans programına başladı. 2005 yılında Gaziosmanpaşa Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Atom ve Moleküler Fiziği Anabilim dalında Araştırma Görevlisi olarak göreve başladı. Halen Gaziosmanpaşa Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü’nde Fizik Anabilim dalında Araştırma Görevlisi olarak göreve devam etmektedir.