

**FCC BLUME-EMERY-GRIFFITHS MODELİN FAZ UZAYI  
ÜZERİNDE DİPOL-KUADRUPOL ETKİLEŞİMİN ETKİSİ**

**Aycan ÖZKAN**

**DOKTORA TEZİ  
FİZİK**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**TEMMUZ 2007  
ANKARA**

Aycan ÖZKAN tarafından hazırlanan FCC BLUME-EMERY-GRIFFITHS  
MODELİN FAZ UZAYI ÜZERİNDE DİPOL-KUADRUPOL ETKİLEŞİMİN  
ETKİSİ adlı bu tezin Doktora tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.

Prof. Dr. Bülent KUTLU  
Tez Yöneticisi

Bu çalışma, jürimiz tarafından oy birliği ile FİZİK  
Anabilim Dalında Doktora tezi olarak kabul edilmiştir.

Başkan: : Prof. Dr. Mehmet ZENGİN

Üye : Prof. Dr. Bülent KUTLU

Üye : Prof. Dr. Süleyman ÖZÇELİK

Üye : Prof. Dr. Abdullah GÜNEN

Üye : Prof. Dr. Bora ALKAN

Tarih : 19 / 07 / 2007

Bu tez, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tez yazım kurallarına uygundur.

## **TEZ BİLDİRİMİ**

Tez içindeki bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edilerek sunulduğunu, ayrıca tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada orijinal olmayan her türlü kaynağa atıf yapıldığını bildiririm.

Aycan ÖZKAN

**FCC BLUME-EMERY-GRIFFITHS MODELİN FAZ UZAYI  
ÜZERİNDE DİPOL-KUADRUPOL ETKİLEŞİMİN ETKİSİ**

(Doktora Tezi)

Aycan ÖZKAN

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

Temmuz 2007

**ÖZET**

Bu çalışmada, yüz merkezli kübik (Fcc) Blume-Emery-Griffiths modelin faz uzayı üzerinde dipol-kuadrupol etkileşimin etkisi Creutz cellular automaton algoritmasını temel alan ısıtma algoritması ile incelendi. Hesaplamalar kenar uzunluğu  $L=4, 6, 8, 9$  ve  $12$  olan yüz merkezli kübik örgülerde periyodik sınır şartlarında gerçekleştirildi. İncelemeler sonucunda modelin ferromanyetik bölgede; ardışık, tekrarlayan, çift tekrarlayan ve çoklu faz geçişleri sergilediği ve üçlü kritik nokta, ikili kritik nokta ve kritik son nokta gibi çoklu özel noktalara sahip olduğu görüldü. Karışık dört kutuplu bölgede;  $A_3B$ ,  $AB$  ve  $AB_3$  yapısına sahip bölgeler tespit edildi. Yapılan incelemeler dipol-kuadrupol etkileşimin; faz geçişleri, kritik sıcaklıklar ve evrensel davranış üzerinde etkili olduğunu göstermiştir.

**Bilim Kodu** : 202.1.147

**Anahtar Kelimeler:** Blume – Emery - Griffiths (BEG) model, Creutz cellular automaton, Fcc, Dipol - kuadrupol etkileşim, Çoklu faz geçişi, Çoklu kritik nokta,  $A_3B$  düzenlenim,  $AB$  düzenlenim,  $AB_3$  düzenlenim.

**Sayfa Adedi** : 126

**Tez Yöneticisi** : Prof. Dr. Bülent KUTLU

**THE EFFECT OF THE DIPOLAR-QUADRUPOLAR INTERACTION ON  
THE PHASE SPACE OF THE FCC BLUME-EMERY-GRIFFITHS MODEL**

**(Ph.D Thesis)**

**Aycan ÖZKAN**

**GAZI UNIVERSITY  
INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY**

**July 2007**

**ABSTRACT**

**In this study, the effect of the dipolar - quadrupolar interaction on the phase space of the fcc Blume - Emery - Griffiths model is investigated using heating algorithm which is improved from Creutz cellular automaton. The simulations are made on a face – centered cubic lattice with linear dimensions  $L=4, 6, 8, 9$  and  $12$  using periodic boundary conditions. The results of the investigations show that the model exhibits; reentrant, double reentrant and multi phase transitions and multicritical points as tricritical, bicritical and critical end point in the ferromagnetic region.  $A_3B$ ,  $AB$  and  $AB_3$  phases are determined in the staggered quadrupolar region. The investigations show that the dipolar - quadrupolar interaction is effective on the phase transitions, the critical temperatures and the universal behavior.**

**Science Code : 202.1.147**

**Keywords : Blume – Emery - Griffiths (BEG) model, Creutz cellular automaton, Fcc, Dipolar – quadrupolar interaction, Multi phase transition, multicritical point,  $A_3B$  phase,  $AB$  phase,  $AB_3$  phase.**

**Page Number: 126**

**Adviser : Prof. Dr. Bülent KUTLU**

## TEŐEKKÜR

Çalıőmalarım süresince tecrübesiyle beni yönlendiren ve yardımlarını esirgemeyen değerli hocam Sayın Prof. Dr. Bülent KUTLU' ya, değerli arkadaşım Nurgül SEFEROĐLU' na teşekkür ederim.

Öğrenim hayatım boyunca desteklerini esirgemeyen sevgili aileme teşekkür ederim.

Ayrıca Gazi Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Birimine (BAP:05/2003-07) sağladıkları imkandan dolayı teşekkür ederim.

## İÇİNDEKİLER

|   | <b>Sayfa</b> |
|---|--------------|
| ÖZET.....   | iv           |
| ABSTRACT.....   | v            |
| TEŞEKKÜR.....   | vi           |
| İÇİNDEKİLER.....  | vii          |
| ÇİZELGELERİN LİSTESİ.....   | ix           |
| ŞEKİLLERİN LİSTESİ.....   | x            |
| SİMGELER VE KISALTMALAR.....  | xvi          |
| 1.GİRİŞ.....  | 1            |
| 2.FAZ GEÇİŞLERİ VE KRİTİK NOKTALAR .....                                      | 5            |
| 2.1. Termodinamik Nicelikler ve Kritik Üsler .....                            | 7            |
| 2.2. İkinci Derece Faz Geçişi .....   | 12           |
| 2.3. Birinci Derece Faz Geçişi .....  | 14           |
| 2.4. Sonlu Örgü Ölçekleme Teorisi .....                                       | 17           |
| 2.4.1. Termodinamik nicelikler için sonlu örgü ölçekleme<br>bağıntıları ..... | 17           |
| 2.3. Spin Modelleri .....   | 19           |
| 2.3.1. Spin-1/2 Ising modeli .....  | 19           |
| 2.3.2. Spin1/2 Ising modelin diğer modellerdeki karşılığı .....               | 21           |
| 2.3.3. Spin-1 Ising modeli .....  | 28           |
| 3. MODEL .....  | 40           |
| 3.1. Cellular Automaton .....   | 40           |
| 3.2. Cellular Automaton Algoritmaları .....                                   | 42           |

|   |     |
|---|-----|
| 3.2.1. Standart algoritma .....   | 42  |
| 3.2.2. Soğutma algoritması .....  | 46  |
| 3.2.3. Isıtma algoritması .....   | 48  |
| 3.3. fcc Örgüde Örgü Uzunluğu.....  | 51  |
| 4. BULGULAR ve TARTIŞMA .....   | 53  |
| 4.1. Ferromanyetik BEG Modelin Taban Durumu ve Faz Tanımları .....                                  | 56  |
| 4.1.1. Ferromanyetik bölgede faz sınırı civarında sonlu örgü ölçeklemesi.....                       | 69  |
| 4.2. Kademeli Kuadrapolar Bölgede BEG Modelin Taban Durumu ve Faz Tanımları .....                   | 76  |
| 4.2.1. A <sub>3</sub> B düzen bölgesinde faz geçişleri .....  | 77  |
| 4.2.2. AB düzen bölgesinde faz geçişleri .....  | 81  |
| 4.2.3. AB <sub>3</sub> düzen bölgesinde faz geçişleri .....   | 82  |
| 4.2.4. Karışık dört kutuplu bölgede faz diyagramları .....  | 84  |
| 4.3. fcc Blume Emery Griffiths Modelin Faz Uzayı Üzerinde Dipol-Kuadrapol Etkileşiminin Etkisi..... | 86  |
| 4.3.1. Ferromanyetik bölgede dipol-kuadrupol ( $\ell$ ) etkileşimin etkisi .....                    | 87  |
| 4.3.2. Dipol-kuadrupol ( $\ell$ ) etkileşimin özel noktalar üzerindeki etkisi .....                 | 90  |
| 4.3.3. SQ bölgede dipol-kuadrupol ( $\ell$ ) etkileşimin etkisi .....                               | 98  |
| 5. SONUÇLAR .....   | 114 |
| KAYNAKLAR .....   | 116 |
| ÖZGEÇMİŞ .....  | 125 |

## ÇİZELGELERİN LİSTESİ

| <b>Çizelge</b>   | <b>Sayfa</b> |
|--|--------------|
| Çizelge 2.1. Termodinamik nicelikler ile ilgili kritik üsler .....         | 11           |
| Çizelge 2.2. Ising model ve karşılık gelen modeller .....                  | 27           |
| Çizelge 2.3. fcc örgüde Cu-Au tipi ikili alaşımların düzenli fazları ..... | 38           |
| Çizelge 4.1. $(kT/zJ, k)$ faz diyagramında özel noktalar .....             | 62           |
| Çizelge 4.2. $k=0'$ da üçlü kritik nokta değeri .....                      | 62           |
| Çizelge 4.3. $(kT/zJ, d)$ faz diyagramında özel noktalar .....             | 68           |

## ŞEKİLLERİN LİSTESİ

| Şekil   | Sayfa |
|---|-------|
| Şekil 2.1. $M(H)$ grafikleri; (a) $T < T_C$ , (b) $T \approx T_C$ , (c) $T > T_C$ .....   | 6     |
| Şekil 2.2. $(T, H)$ yarı düzlemi. Hat boyunca $M$ süreksiz diğer yerlerde $H$ ve $T'$ nin analitik bir fonksiyonudur .....  | 6     |
| Şekil 2.3. Kendiliğinden manyetizasyonun $( M )$ sıcaklıkla değişimi. $T_C$ kritik sıcaklıktır .....  | 7     |
| Şekil 2.4. İkinci derece faz geçişinde a) düzen parametresi olasılık dağılımı $P(M)$ ve b) serbest enerji $F(M)$ ' nin kritik sıcaklık civarındaki davranışı.....   | 13    |
| Şekil 2.5. İkinci derece faz geçişinde a) düzen parametresi olasılık dağılımı $P(E)$ ve b) serbest enerji $F(E)$ ' nin kritik sıcaklık civarındaki davranışı.....   | 14    |
| Şekil 2.6. Birinci derece faz geçişinde a) düzen parametresi olasılık dağılımı $P(M)$ ve b) serbest enerji $F(M)$ ' nin kritik sıcaklık civarındaki davranışı.....  | 15    |
| Şekil 2.7. Birinci derece faz geçişinde a) düzen parametresi olasılık dağılımı $P(E)$ ve b) serbest enerji $F(E)$ ' nin kritik sıcaklık civarındaki davranışı.....  | 15    |
| Şekil 2.8. Spin-1/2 Ising model için; (a) ferromanyetik taban durum, (b) antiferromanyetik taban durum .....  | 15    |
| Şekil 2.9. Akışkan modeli için etkileşim potansiyeli: a) Lennard-Jones, b) kare kuyu.....   | 22    |
| Şekil 2.10. bcc yapıdaki ikili alaşımda atomların yerleşimi .....   | 25    |
| Şekil 2.11. CuZn ikili alaşımında görülebilen düzenler. (a) Yüksek sıcaklıkta düzensiz yapı, (a) düşük sıcaklıkta düzenli yapı .....  | 27    |
| Şekil 2.12. Spin-1 Ising model için fcc örgüde taban durumları ; (a) ferromanyetik, (b)antiferromanyetik .....  | 29    |
| Şekil 2.13. 3-boyutlu Blume Capel modelin Creutz Cellular Automaton algoritmasından türetilen standart ve soğutma algoritmaları ile elde edilen $(kT_C/J, D/J)$ faz diyagramı. ÜKN: Üçlü kritik nokta ..... | 33    |

| <b>Şekil</b>  | <b>Sayfa</b> |
|---|--------------|
| Şekil 2.14. Kritik son nokta (KSN) ve ikili kritik nokta (İKN) .....  | 35           |
| Şekil 2.15. fcc BEG model için k-d faz diyagramı. F: Ferromanyetik bölge, Q: Sıfır düzenli bölge, SQ: Karışık dört kutuplu bölgedir.....  | 36           |
| Şekil 2.16. Kare örgüde karışık dört kutuplu (SQ) taban durumun genel görünümü.....   | 36           |
| Şekil 2.17. fcc örgüyü oluşturan dört alt örgünün yeri. Daire ma alt örgüsünün, üçgen mb alt örgüsünün, elmas mc alt örgüsünün, kare md alt örgüsünün yerine işaret etmektedir .....                        | 37           |
| Şekil 3.1. $J=-1$ , $K=D=L=0$ parametre seti için taban durum konfigürasyonunun tespiti ve iç enerjideki değişim, $dH_1$ .....  | 43           |
| Şekil 3.2. Standart algoritmanın akış çizelgesi .....   | 45           |
| Şekil 3.3. Değişim algoritmasının akış çizelgesi .....  | 45           |
| Şekil 3.4. Soğutma algoritmasının akış çizelgesi .....  | 47           |
| Şekil 3.5. Taban durum konfigürasyonları ve spin değişimi; (a) $A_3B$ ( $d=-4$ , $k=-3$ ), (b) $AB$ ( $d=-12$ , $k=-3$ ), (c) $AB_3$ ( $d=-20$ , $k=-3$ ) .....   | 49           |
| Şekil 3.6. Isıtma algoritmasının akış çizelgesi .....   | 50           |
| Şekil 3.7. Basit kübik örgü üzerinde fcc örgünün tanımlanması. Dolu daireler fcc örgü yerlerini, boş daireler fcc örgüde kullanılmayan basit kübik örgü yerlerini göstermektedir .....                      | 51           |
| Şekil 3.8. Basit kübik örgü üzerinde fcc örgünün $k+1$ ' inci düzlemin tanımlanması. Dolu daireler fcc örgü yerlerini, boş daireler fcc örgüde kullanılmayan basit kübik örgü yerlerini göstermektedir..... | 52           |
| Şekil 3.9. fcc örgünün genel görünümü.....  | 52           |
| Şekil 4.1. fcc BEG model faz diyagramı .....  | 54           |
| Şekil 4.2. BEG modelin yüz merkezli kübik örgüde sahip olduğu taban durumlar ve faz geçiş türleri .....   | 56           |

| <b>Şekil</b>  | <b>Sayfa</b> |
|---|--------------|
| Şekil 4.3. $d=0$ için; (a) düzen parametreleri, (b) alınganlık ( $\chi$ ), (c) iç enerji ve (d) özısının ( $H_I$ ) sıcaklıkla değişimi .....  | 57           |
| Şekil 4.4. $d=0.5$ için; (a) düzen parametreleri, (b) alınganlık ( $\chi$ ), (c) iç enerji ve (d) özısının ( $H_I$ ) sıcaklıkla değişimi .....  | 59           |
| Şekil 4.5. $d=2$ için; (a) düzen parametreleri, (b) alınganlık ( $\chi$ ), (c) iç enerji ve (d) özısının ( $H_I$ ) sıcaklıkla değişimi .....  | 61           |
| Şekil 4.6. $d=0; 0.5; 1$ ve $2$ değerleri için ( $kT/zJ, k$ ) düzleminde faz diyagramları. Sürekli çizgiler ikinci derece, kesikli çizgiler ise birinci derece faz geçişlerini işaret eder. Özel noktalar; İKN: ikili kritik nokta ve KSN: kritik son noktadır .....  | 62           |
| Şekil 4.7. $k=0$ için; (a) düzen parametreleri, (b) alınganlık ( $\chi$ ), (c) iç enerji ve (d) özısının ( $H_I$ ) sıcaklıkla değişimi .....  | 63           |
| Şekil 4.8. $k=-0.75$ için; (a) düzen parametreleri, (b) alınganlık ( $\chi$ ), (c) iç enerji ve (d) özısının ( $H_I$ ) sıcaklıkla değişimi .....  | 65           |
| Şekil 4.9. $k=-0.9$ için; (a) düzen parametreleri, (b) alınganlık ( $\chi$ ), (c) iç enerji ve (d) özısının ( $H_I$ ) sıcaklıkla değişimi .....   | 66           |
| Şekil 4.10. $k=0; -0.25; -0.5; -0.75$ ve $-0.9$ değerleri için ( $kT/zJ, d$ ) düzleminde faz diyagramları. Sürekli çizgiler ikinci derece kesikli çizgiler ise birinci derece faz geçişlerini işaret eder. Özel noktalar; ÜKN: üçlü kritik nokta, İKN: ikili kritik nokta ve KSN: kritik son noktadır ..... | 68           |
| Şekil 4.11. $d=0.5, k=-0.95$ parametre seti için düzen parametresi. $a-f-a$ ardışık faz geçişi görülmektedir .....  | 69           |
| Şekil 4.12. $d=0.5, k=-0.95$ parametre seti için binder kümülantının ölçeklenmesi .....   | 70           |
| Şekil 4.13. $d=0.5, k=-0.95$ parametre seti için $a-f$ faz geçişinde (a) düzen parametresinin, (b) alınganlığın, (c) $T < T_{C1}'$ de özısının ve (d) $T > T_{C1}'$ de özısının sonlu örgü ölçeklemesi .....  | 71           |
| Şekil 4.14. $d=0.5, k=-0.95$ parametre seti için $f-a$ faz geçişinde (a) düzen parametresinin, (b) alınganlığın, (c) $T < T_{C2}'$ de özısının ve (d) $T > T_{C2}'$ de özısının sonlu örgü ölçeklemesi .....  | 72           |

| <b>Şekil</b>  | <b>Sayfa</b> |
|---|--------------|
| Şekil 4.15. $d=-1$ , $k=-1.08$ parametre seti için düzen parametresi. İkinci derece $a-F$ faz geçişi görülmektedir .....  | 73           |
| Şekil 4.16. Binder kümülantından (a) sonlu örgü kritik sıcaklığının, (b) v kritik üssünün tespiti .....   | 74           |
| Şekil 4.17. $d=-1$ , $k=-1.08$ parametre seti için f-a faz geçişinde (a) düzen parametresinin, (b) alınganlığın, (c) $T < T_C$ ' de özısının ve (d) $T > T_C$ ' de özısının sonlu örgü ölçeklemesi .....  | 75           |
| Şekil 4.18. fcc BEG modelin SQ bölgedeki faz diyagramı ve sahip olduğu taban durumlar .....   | 76           |
| Şekil 4.19. $A_3B$ taban durumlu bölgede ( $d=-4$ , $k=-3$ ) için ; (a) alt örgü momentleri ve ikinci düzen parametrelerinin, (b) örgü alınganlığının, (c) örgü iç enerjisinin ve (d) örgü özısının sıcaklıkla değişimi .....                               | 78           |
| Şekil 4.20. $A_3B$ taban durumlu bölgede ( $d=-6.8$ , $k=-3$ ) için ; (a) alt örgü momentleri ve ikinci düzen parametrelerinin, (b) örgü alınganlığının, (c) örgü iç enerjisinin ve (d) örgü özısının sıcaklıkla değişimi .....                             | 79           |
| Şekil 4.21. $A_3B$ taban durumlu bölgede ( $d=-7.7$ , $k=-3$ ) için ; (a) alt örgü momentleri ve ikinci düzen parametrelerinin, (b) örgü alınganlığının, (c) örgü iç enerjisinin ve (d) örgü özısının sıcaklıkla değişimi .....                             | 80           |
| Şekil 4.22. $AB$ taban durumlu bölgede ( $d=-12$ , $k=-3$ ) için ; (a) alt örgü momentleri ve ikinci düzen parametrelerinin, (b) örgü alınganlığının, (c) örgü iç enerjisinin ve (d) örgü özısının sıcaklıkla değişimi .....                                | 81           |
| Şekil 4.23. $AB_3$ taban durumlu bölgede ( $d=-20$ , $k=-3$ ) için ; (a) alt örgü momentleri ve ikinci düzen parametrelerinin, (b) örgü alınganlığının (c) örgü iç enerjisinin ve (d) örgü özısının sıcaklıkla değişimi .....                               | 83           |
| Şekil 4.24. $k=-3$ için ( $kT_C/J$ , $d$ ) faz diyagramı. Sürekli çizgiler ve dolu simgeler ikinci derece faz geçişlerini, kesikli çizgiler ve boş simgeler birinci derece faz geçişlerini temsil eder. Kesikli ve sürekli çizgiler CVM tespitleridir ..... | 84           |

| <b>Şekil</b>  | <b>Sayfa</b> |
|---|--------------|
| Şekil 4.25. $d=-4$ için $(kT_C/J, k)$ faz diyagramı. Sürekli çizgiler ikinci derece faz geçişlerini, kesikli çizgiler birinci derece faz geçişlerini temsil eder .....  | 85           |
| Şekil 4.26. Taban durum faz diyagramları; (a) $\ell=0.005$ için $k-d$ faz diyagramı, (b) $d=0$ ve $-5$ için $k-\ell$ faz diyagramı .....  | 87           |
| Şekil 4.27. Dipol-kuadrupol etkileşim parametresi $\ell'$ 'nin $k=-0.9$ için $d=0.9$ ' da görülen faz geçişleri üzerindeki etkisi. (a) düzen parametreleri, (b) alınganlık, (c) iç enerji, (d) özısı .....                                      | 89           |
| Şekil 4.28. $k=-0.9, d=0.9$ parametre setinde $\ell'$ 'nin pozitif ve negatif değerleri için $(kT_C/zJ, \ell)$ faz diyagramı. Sürekli çizgiler ikinci derece faz geçişlerini, kesikli çizgiler birinci derece faz geçişlerini işaret eder ..... | 90           |
| Şekil 4.29. Dipol-kuadrupol etkileşim parametresi $\ell'$ 'nin $k=0$ için $d=5.7'$ de görülen üçlü kritik nokta üzerindeki etkisi. (a) düzen parametreleri, (b) alınganlık, (c) iç enerji, (d) özısı .....                                      | 92           |
| Şekil 4.30. $k=0$ için $d=5.7'$ de görülen üçlü kritik noktada; (a) $\ell=0.000$ için, (b) kritik noktada $\ell=0.000, 0.001$ ve $0.003$ için olasılık dağılımı .....   | 93           |
| Şekil 4.31. $\ell'$ nin $k=-0.75, d=1.5$ parametre setindeki bikritik nokta üzerindeki etkisi. (a) Düzen parametreleri, (b) alınganlık, (c) iç enerji, (d) özısı .....  | 95           |
| Şekil 4.32. $\ell'$ nin $k=-0.9, d=0.7$ parametre setindeki kritik son nokta üzerindeki etkisi. (a) Düzen parametreleri, (b) alınganlık, (c) iç enerji, (d) özısı .....   | 98           |
| Şekil 4.33. $k=-0.9, \ell=0.005$ için $(kT_C/zJ, d)$ faz diyagramı. Sürekli çizgiler ikinci derece faz geçişini, kesikli çizgiler ise birinci derece faz geçişini temsil eder .....   | 98           |
| Şekil 4.34. $\ell'$ nin $d=-4, k=-3$ parametre setinde faz geçişi üzerindeki etkisi. $\ell=0$ için (a) düzen parametreleri ve (b) iç enerji; $\ell=0.2$ için (c) düzen parametreleri ve (d) iç enerji .....                                     | 100          |
| Şekil 4.35. $\ell'$ nin $d=-12, k=-3$ parametre setinde faz geçişi üzerindeki etkisi. $\ell=0$ için (a) Düzen parametreleri ve (b) iç enerji; $\ell=0.2$ için (e) düzen parametreleri ve (f) iç enerji .....                                    | 101          |

| <b>Şekil</b>  | <b>Sayfa</b> |
|---|--------------|
| Şekil 4.36. $\ell$ ' nin $d=-20$ , $k=-3$ parametre setinde faz geçişi üzerindeki etkisi. $\ell =0$ için a) Düzen parametreleri ve (b) iç enerji; $\ell =0.001$ için (c) düzen parametreleri ve (d) iç enerji ..... | 102          |
| Şekil 4.37. $\ell=0.5$ için fcc BEG modelin taban durum (k, d) faz diyagramı.....   | 103          |
| Şekil 4.38. AB bölgedeki $d=-12$ , $k=-3$ parametre seti için binder kümülanından sonsuz örgü kritik sıcaklığının tespiti; (a) $\ell=0$ , (b) $\ell=0.001$ , (c) $\ell=0.005$ .....                                 | 104          |
| Şekil 4.39. AB bölgedeki $d=-12$ , $k=-3$ parametre seti için binder kümülanının ölçeklemesi; (a) $\ell=0$ , (b) $\ell=0.001$ , (c) $\ell=0.005$ .....  | 105          |
| Şekil 4.40. AB bölgedeki $d=-12$ , $k=-3$ parametre seti için düzen Parametresinin ölçeklemesi; (a) $\ell=0$ , (b) $\ell=0.001$ , (c) $\ell=0.005$ .....  | 106          |
| Şekil 4.41. AB bölgedeki $d=-12$ , $k=-3$ parametre seti için alınganlığın ölçeklemesi; (a) $\ell=0$ , (b) $\ell=0.001$ , (c) $\ell=0.005$ .....  | 107          |
| Şekil 4.42. AB bölgedeki $d=-12$ , $k=-3$ parametre seti için özısının $T<T_C$ ' de ölçeklemesi; (a) $\ell=0$ , (b) $\ell=0.001$ , (c) $\ell=0.005$ .....   | 108          |
| Şekil 4.43. AB bölgedeki $d=-12$ , $k=-3$ parametre seti için özısının $T>T_C$ ' de ölçeklemesi; (a) $\ell=0$ , (b) $\ell=0.001$ , (c) $\ell=0.005$ .....   | 108          |
| Şekil 4.44. AB <sub>3</sub> bölgedeki $d=-20$ , $k=-3$ parametre seti için binder kümülanından sonsuz örgü kritik sıcaklığının tespiti; (a) $\ell=0$ , (b) $\ell=0.001$ , (c) $\ell=0.01$ .....                     | 109          |
| Şekil 4.45. AB <sub>3</sub> bölgedeki $d=-20$ , $k=-3$ parametre seti için binder kümülanının ölçeklemesi; (a) $\ell=0$ , (b) $\ell=0.001$ , (c) $\ell=0.01$ .....  | 110          |
| Şekil 4.46. AB <sub>3</sub> bölgedeki $d=-20$ , $k=-3$ parametre seti için düzen parametresinin ölçeklemesi; (a) $\ell=0$ , (b) $\ell=0.001$ , (c) $\ell=0.01$ .....  | 111          |
| Şekil 4.47. AB <sub>3</sub> bölgedeki $d=-20$ , $k=-3$ parametre seti için alınganlığın ölçeklemesi; (a) $\ell=0$ , (b) $\ell=0.001$ , (c) $\ell=0.01$ .....  | 112          |
| Şekil 4.48. AB <sub>3</sub> bölgedeki $d=-20$ , $k=-3$ parametre seti için özısının $T<T_C$ ' de ölçeklemesi; (a) $\ell=0$ , (b) $\ell=0.001$ , (c) $\ell=0.01$ .....   | 112          |
| Şekil 4.49. AB <sub>3</sub> bölgedeki $d=-20$ , $k=-3$ parametre seti için özısının $T>T_C$ ' de ölçeklemesi; (a) $\ell=0$ , (b) $\ell=0.001$ , (c) $\ell=0.01$ .....   | 113          |

## SİMGELER VE KISALTMALAR

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

| <b>Simgeler</b>      | <b>Açıklama</b>                             |
|----------------------|---|
| <b>T</b>             | Sıcaklık                                    |
| <b>T<sub>C</sub></b> | Kritik Sıcaklık                             |
| <b>T<sub>t</sub></b> | Geçiş Sıcaklığı                             |
| <b>d</b>             | Uzay Boyutu                                 |
| <b>M</b>             | Manyetizasyon                               |
| <b>β, β'</b>         | Manyetizasyon Kritik Üssü                   |
| <b>χ</b>             | Manyetik Alınganlık                         |
| <b>γ, γ'</b>         | Manyetik Alınganlık Kritik Üssü             |
| <b>C</b>             | ÖZİSİ                                       |
| <b>α, α'</b>         | ÖZİSİ Kritik Üssü                           |
| <b>v</b>             | Korelasyon Uzunluğu Kritik Üssü             |
| <b>ε</b>             | İndirgenmiş Sıcaklık                        |
| <b>∞</b>             | Sonsuz                                      |
| <b>U<sub>L</sub></b> | Binder Kümülanı                             |
| <b>J</b>             | Bilineer Etkileşme Parametresi              |
| <b>K</b>             | Dört kutuplu Etkileşme Parametresi          |
| <b>D</b>             | Kristal Alan Parametresi                    |
| <b>L</b>             | Çift kutup-Dört kutup Etkileşme Parametresi |
| <b>k<sub>B</sub></b> | Boltzmann Sabiti                            |
| <b>z</b>             | En Yakın Komşu Sayısı                       |
| <b>&lt; &gt;</b>     | Beklenen Değer ve Ortalama                  |

| <b>Kısaltmalar</b> | <b>Açıklama</b>                          |
|--------------------|--|
| <b>BEG</b>         | Blume Emery Griffiths                    |
| <b>BC</b>          | Blume Capel                              |
| <b>CA</b>          | Cellular Automaton                       |
| <b>CCA</b>         | Creutz Cellular Automaton                |
| <b>BA</b>          | Bethe Yaklaşımı                          |
| <b>MFA</b>         | Ortalama Alan Yaklaşımı                  |
| <b>MC</b>          | Monte Carlo                              |
| <b>RG</b>          | Renormalizasyon Grup Teorisi             |
| <b>TPCA</b>        | İki-Parçacık Kümelenme Yaklaşımı         |
| <b>CVM</b>         | Kümesel Değişim Metodu                   |
| <b>MCRG</b>        | Monte Carlo Renormalizasyon Grup Teorisi |
| <b>ÜKN</b>         | Üçlü Kritik Nokta                        |
| <b>İKN</b>         | İkili Kritik Nokta                       |
| <b>KSN</b>         | Kritik Son Nokta                         |

## 1. GİRİŞ

Belirli şartlar altında doğada bazı sistemler faz geçişi yapar. Gazın sıvı ya da katı faza, paramanyetiğin düzenli manyetik faza, normal metalin süperiletken faza, He'nin normal fazdan süper akışkan faza, zinc-blende yapıdaki üçlü alaşımın elmas yapıya, veri depolanan CD'lerin kristal yapıdan amorf yapıya geçmesi gibi örnekler deney ortamlarında gözlenebilmektedir. Faz geçişi olayı parçacıklar arası etkileşim sonucunda meydana gelmektedir ve açıklaması termodinamik ve istatistik fizik yardımıyla yapılır.

Termodinamik, fazın ve faz geçişinin genel ifadesini verir. Bir sistemin fazları kararlı, yarı kararlı veya kararsız termodinamik durumlarıdır. Termodinamik yaklaşımla faz geçişi ise bir fazdan; sıcaklık (T), basınç (P), manyetik alan (H) gibi parametrelerdeki değişimle meydana gelen diğer bir faza geçiş olarak tanımlanabilir.

İstatistik fizik çeşitli modellerle faz geçişlerini inceleme imkanı verir. Faz geçişlerini taklit edebilen istatistiksel modellerden biri de Ising modelidir. Ferromanyetik sistemlerdeki faz geçişlerinin taklit edilebilmesi için önerilen spin-1/2 Ising modelin analitik çözümü 1925 yılında Lenz' in öğrencisi E. Ising tarafından bir boyutlu uzayda (d=1), 1944' de Onsager tarafından dış manyetik alan olmadığı durumda iki boyutlu uzayda (d=2) yapıldı [1]. 1971 yılında Blume, Emery ve Griffiths tarafından ortalama alan yaklaşımı ile tamamlanmamış spin-1 Ising modeli tanımlanarak üç durumlu bir sistem olan He<sup>3</sup>-He<sup>4</sup> karışımına uygulandı [2]. Spin-1/2 Ising modelden daha zengin bir faz diyagramına ve çoklu kritik noktalara sahip olan spin-1 Ising model, gaz-sıvı-katı sistemlere [3]; hamiltonyenine çift kutup-dört kutup etkileşim terimi (L) eklenerek de çok bileşenli akışkanlar ve sıvı kristal karışımlara [3-5], yarıiletken alaşımlara [6], mikroemülsiyonlara [7], absorbate sistemlere [8] ve ferromanyetik ve antiferromanyetik ikili alaşımlara [9] uygulandı.

İki boyutta Bethe örgü ve bal peteği örgüde [10-12] analitik çözümü bulunan spin-1 Ising Blume-Emery-Griffiths (BEG) modelin üç boyutta henüz analitik çözümü yoktur. Bu nedenle model çeşitli yöntemlerle incelendi. Bu yöntemlerle elde edilen

sonuçların birbirinden farklı olması alternatif yeni yöntemlerin araştırılması ihtiyacını doğurmaktadır.

Bu çalışmada fcc Blume-Emery-Griffiths modelin faz diyagramlarını ve faz uzayı üzerinde dipol-kuadrapol etkileşmenin etkisini incelemek amacıyla Cellular Automaton (CA) modeli kullanıldı.

Cellular automaton uzaysal düzenlenme yöntemlerinin en basitidir. İlk olarak John von Neumann tarafından 1952’ de keşfedildi. Neumann dört komşulu ve 29 olası durumlu hücrelerden oluşan bir automaton geliştirdi. Bu 200.000 hücreli bazı konfigürasyonları taklit edebilen “Turing makinesi” idi. Diğer cellular automaton örnekleri Conway’ ın “hayat oyunu” ve Langton’ ın “karınca”sıdır. Cellular automaton ve örnekleri biyolojik ve kompleks sistemleri kurmakta oldukça başarılıdır. Cellular automaton’ da uzay ve zaman kesikli değerlere sahiptir. Uzay, sonsuza kadar genişletilebilen düzenli bir hücre örgüsünden meydana gelir. Model için ilk teoriler Wolfram tarafından sunulmuştur [13-14]. Bazı fiziksel problemlerin yanı sıra Ising modelin cellular automaton olarak simülasyonu Vichniac tarafından önerilmiştir [15]. Pomeau ve Herrmann, Vichniac’ ın Ising model için önerdiği kuralı Q2R Ising model olarak geliştirdi [16-18]. Q2R’ de toplam enerji spin-spin etkileşim enerjisine karşılık gelir. Q2R algoritması toplam enerjinin korunduğu mikrokanaonik bir küme oluşturmakta, simülasyon boyunca herhangi bir spin değişimi sonucunda iç enerjinin korunduğu konfigürasyonlar üretilmektedir. İç enerji simülasyon boyunca değişmediğinden, iç enerjideki dalgalanmalardan özısı hesap edilememektedir. Creutz’un 1986 yılında sunduğu mikrokanaonik cellular automaton algoritması bu kısıtlamayı ortadan kaldırmıştır [19]. Creutz algoritmasında iç enerji ve kinetik enerji, toplam enerji korunacak şekilde değişmektedir. Rastgele bir sayı üreticisine ihtiyaç duymayan ve tam sayılar ile işlem yapan bu algoritma Monte Carlo gibi yöntemlerden on kat hızlı çalışmaktadır [19].

Ising model için Creutz cellular automaton algoritması ile iki ya da daha büyük boyutta, dış alan yokluğunda, en-yakın komşu etkileşmeleri göz önüne alınarak yapılan hesaplamalar Creutz cellular automaton (CCA)’ nın Ising modeli taklit

etmekte başarılı olduğunu göstermektedir [20]. Creutz cellular automaton (CCA) algoritmasından üretilen çeşitli algoritmalar; dört-spin etkileşimi [21], dış alan [22], ikinci derece en-yakın komşu etkileşimi içeren Ising model [23], iki-boyutlu Blume-Capel (BC) model [24] ve iki-boyutlu spin-1 Ising model [25,26] hesaplamalarında kullanılmış ve diğer yöntemler ile uyumlu sonuçlar elde edilmiştir. Üç boyutlu BC model için yapılan çalışmada, standart algoritmanın modelin sergilediği birinci derece faz geçişlerini taklit etme yeteneği test edilmiş, birinci derece faz geçişlerinin özelliği olan yarı kararlı durumları üretemediği görülmüştür. Bu nedenle Creutz algoritmasını temel alan soğutma algoritması üretilmiş ve BC modelin; faz diyagramı elde edilerek [27], kritik davranışı [28] ve birinci derece faz geçişlerinin ölçeklemesi [29] incelenmiştir.

BEG model sahip olduğu; fazlar, çoklu kritik noktalar, faz diyagramları ve sergilediği faz geçiş türleri ile oldukça zengin bir faz uzayına sahiptir [9, 31]. Modelin sahip olduğu çoklu kritik noktalar pek çok çalışmaya konu olmuştur [9, 30-33]. Ortalama alan yaklaşımı (MFA) [31] ve normalize edilmiş grup (RG) teori [34] yöntemleri, kritik sıcaklık çizgisinin birinci derece faz geçiş çizgisi üzerinde sonlandığı, kritik son noktanın varlığını belirtmiştir. Bununla beraber, kümesel değişim metodu (CVM) [9], monte carlo normalize edilmiş grup teori [32], iki-parçacık kümesel yaklaşım sonucu (TPCA) [33] ve CA [30] kritik son nokta yerine üçlü son nokta tespit etmiştir. Sonuçlar arasındaki farklılık konunun bir başka yöntemle daha incelenmesi ihtiyacını doğurmuştur. fcc örgü üzerinde, karışık dört kutuplu bölgede, Cu-Au tipi ikili alaşımlarda görülen;  $A_3B$ , AB ve  $AB_3$  düzenlenimler, düzensizlik-düzen faz geçişleri spin-1/2 Ising model [35-43] ve BEG [8,9] model ile taklit edilmiş ve faz diyagramları elde edilmiştir. L, çift kutup-dört kutup etkileşimi ilk olarak ikili ve üçlü akışkanların termodinamik özelliklerini, üçlü kritik noktalarını, yoğunlaşma ve faz ayrımını tarif etmek için Spin-1 Ising Blume Emery Griffiths (BEG) modele eklenerek kullanılmıştır [4]. Örgü gazı hamiltonyeninin taban durumlarının incelendiği çalışmalarda L etkileşiminin “pozitif değerlerinin” tüm spinlerin “-1” olduğu ferromagnetik düzenlenimin tercih edilmesine neden olduğu görülmüştür [44, 45]. Üçlü yarı kararlı alaşımların

incelendiđi bir alıřmada ise L etkileřiminin dıř alan gibi bir etkiye sahip olduđu iddia edilmiřtir [6].

Bu tez alıřmasında ift kutup-dört kutup (L) etkileřimin fcc Blume-Emery-Griffiths (BEG) modelin faz uzayı üzerindeki etkisini ortaya koymak amalanmıř, bu ama kapsamında modelin ferromanyetik ve karıřık dört kutuplu blgede sahip olduđu; fazlar, faz diyagramları, oklu kritik (zel) noktalar ve faz geiř trleri incelenmiřtir. Modelin ikinci derece faz geiři sergileyen eřitli (J, K, D, L) parametre setlerinde evrensellik sınıfını belirlemek amacıyla sonlu rg leklemesi yapılmıřtır. alıřmanın son kısmında ift kutup-dört kutup etkileřiminin fcc BEG modelin sahip olduđu, zel noktalar, faz geiř trleri, faz diyagramları ve sonlu rg leklemesi üzerindeki etkisi ilk kez arařtırılmıřtır. Hesaplamalar  $L=4, 6, 8, 9, 12$  kenar uzunluklu fcc rgler üzerinde periyodik sınır řartlarında, spin bařına ve 1 000 000 CA zaman adımı üzerinden ortalama alınarak, gerekleřtirilmiřtir. Algoritma olarak, (J, K, D, L) uzayında ortaya ıkan ift tekrarlayan ve oklu faz geiřlerini daha kolay taklit eden ısıtma algoritması kullanılmıřtır [30].

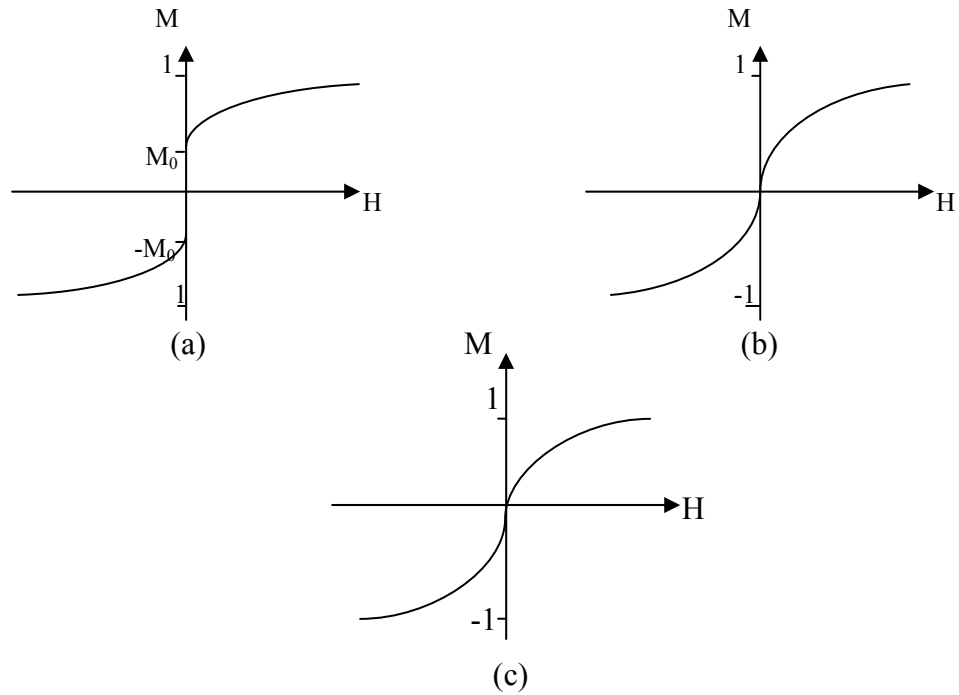
## 2. FAZ GEÇİŞLERİ VE KRİTİK NOKTALAR

Doğadaki birçok sistemin fiziksel özelliklerini istatistik mekaniksel olarak incelemek ve açıklamak mümkündür. Odadaki atmosfer, çaydanlıktaki su ya da çubuk mıknatıs gözlenebilir mekanik sistemlere örnektir. Bu tür sistemler; atom, molekül gibi bileşenlerden oluşur. Gözlemci, bileşenler üzerinde kontrole sahipse sistemin; sıcaklık, yoğunluk ya da manyetizasyon gibi ortalama özelliklerini ölçmek mümkündür. İstatistik mekaniğin amacı bileşenleri arasındaki mikroskobik kuvvetleri hakkında bilgi vererek sistemin gözlenebilir makroskobik özelliklerini tahmin etmektir.

Örnek olarak, su molekülleri arasındaki kuvvetler bilindiğinde oda sıcaklığında ve atmosfer basıncında çaydanlıktaki suyun yoğunluğu tahmin edilebilir. Sıcaklık  $99^{\circ}\text{C}$ ' den  $101^{\circ}\text{C}$ ' ye arttığında yoğunluk aniden değişirken suyun bulunduğu hal sıvıdan buhara değişir. Sistemin sahip olduğu fazın bu örnekteki gibi bir başka faza değişmesi olayına "faz geçişi" denilir. Faz geçişlerine bir başka örnek ise eşit sayıda iki tür parçacık (A ve B) içeren ikili sistemlerdir. İkili metal alaşımlarda, atomlar kristal örgünün örgü noktalarında bulunur. Yüksek sıcaklıkta A ve B atomları bu noktalara rastgele dağılır. Sıcaklık düşüken ise atomların pozisyonları, bir A atomunun en yakın komşuları B atomları olacak şekilde konumlanır. Böyle bir durumda ikili alaşım sistemi düzensizlikten düzene faz geçişi yapar.

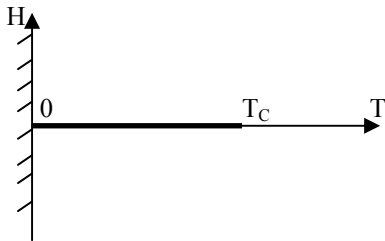
Eksenine paralel dış manyetik alan (H) içerisinde bulunan demir çubuk istatistik mekanik tarafından ortalama özellikleri tahmin edilebilen sistemlere iyi bir örnek teşkil eder. Dış manyetik alan sıfıra giderken demir çubuğun manyetizasyonu (M) azalacak, fakat sıfır olmayacaktır. Sıfır alanda demir çubuk "kendiliğinden manyetizasyon" a ( $M_0$ ) sahiptir. İstatistiksel sistemlerde moleküller arası kuvvetler zaman dönüşümü altında değişmezdir. Bu, manyetik alanı ters çevirmenin manyetizasyon' u da ters çevireceğini ifade eder. Bu yüzden M dış alan H' nin tek fonksiyonu olmalıdır.  $H=0$ 'da  $M(H)$ ' in sahip olduğu süreksizlik Şekil 2.1.a' da görülmektedir. Manyetizasyondaki bu süreksizlik sıvı-gaz faz geçişine benzer.

Demir çubuk  $H=0'$  da, manyetizasyondaki eksiden artıya değişim nedeniyle, faz geçişi yapmaktadır. Manyetizasyondaki süreksizlik deneysel olarak ta gözlenmiştir, sistem gerçek termodinamik dengede olmadığından, histerisiz meydana gelir. Bu bilgiler ışığında oda sıcaklığındaki demir çubuk incelendiğinde sıcaklık artarken sıfır manyetik alandaki kendiliğinden manyetizasyonun ( $M_0$ ) azaldığı görülür. Eğer sıcaklık kritik sıcaklığa ( $T_C$ ) yükselirse  $M_0$  sıfıra gider ve  $M(H)$ ,  $H=0'$  da sonsuz eğimli sürekli bir fonksiyon haline gelir (Şekil 2.1.b).



Şekil 2.1.  $M(H)$  grafikleri; a)  $T < T_C$ , b)  $T \approx T_C$ , c)  $T > T_C$

Eğer sıcaklık daha da artarsa  $M(H)$  sürekli bir fonksiyon olarak kalır ve  $H=0'$  da analitiktir (Şekil 2.1.c). Bu tespitler Şekil 2.2' deki  $(T, H)$  düzleminde kolayca

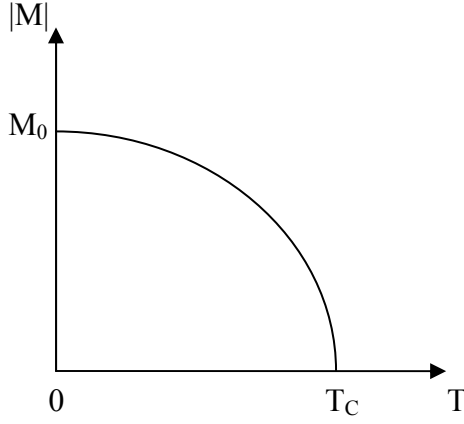


Şekil 2.2.  $(T, H)$  yarı düzlemi. Hat boyunca  $M$  süreksiz diğer yerlerde  $H$  ve  $T$ ' nin analitik bir fonksiyonudur

özetlenebilir. Sıcaklık eksenini boyunca 0' dan  $T_C$ ' ye bir hat vardır. Manyetizasyon  $M$  hattın sağındaki tüm noktalarda,  $H$ ' nin ve  $T$ ' nin analitik bir fonksiyonudur. Hat üzerinde ise süreksizdir. Bu hatta “faz geçiş çizgisi” denir.  $(T_C, 0)$  son noktası “kritik nokta” olarak bilinir.  $M(H, T)$  fonksiyonu bu noktada ıraksak olmalıdır. Kendiliğinden manyetizasyon  $T$ ' nin fonksiyonudur ve  $H$ ' nin pozitif değerleri için

$$M_0(T) = \lim_{H \rightarrow 0^+} M(H, T) \quad (2.1)$$

limiti ile tanımlanır. Kritik sıcaklığın altında ( $T < T_C$ ) pozitif, kritik sıcaklığın üstünde ( $T > T_C$ ) ise sıfırdır (Şekil 2.3).



Şekil 2.3. Kendiliğinden manyetizasyonun ( $|M|$ ) sıcaklıkla değişimi.  $T_C$  kritik sıcaklıktır

## 2.1. Termodinamik Nicelikler ve Kritik Üsler

Termodinamikte bir sistemin her durumunu tanımlayan karakteristik bir enerji vardır. Eğer sistemin durumu sıcaklık ( $T$ ), basınç ( $P$ ) veya hacim ( $V$ ) ile tanımlanıyorsa bu enerjiye “serbest enerji” denilir. Bu enerjinin bir kısmı sistemin sıfır sıcaklıktaki enerjisi ( $E$ ) iken bir kısmı sistemin sıcaklığına ve entropisine ( $S$ ) bağlıdır. Sistemdeki bağımsız değişkenler; sıcaklık ve basınç ise sistemin termodinamik potansiyeli Gibbs serbest enerjisidir ( $G$ ). Bağımsız değişkenler sıcaklık ve hacim ise termodinamik potansiyel Helmholtz serbest enerjisidir ( $F$ ).

$$dG = -SdT + VdP \quad (2.2)$$

$$dF = -SdT - PdV \quad (2.3)$$

Eğer sistem manyetik momente sahipse üstteki ifadeler  $-MdH$  terimi, parçacık sayısı (N) değişken ise,  $\mu$  kimyasal potansiyel olmak üzere,  $\mu dN$  terimi eklenmelidir.

Termodinamik nicelikler parçacık başına serbest enerjiden elde edilmektedir. Termodinamik niceliklerin istatistik mekaniksel tanımını yapabilmek için serbest enerji sistemin bölüşüm fonksiyonu ( $Z(H, T)$ ) cinsinden serbest enerji

$$f(H, T) = -kT \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \ln Z(H, T) \quad (2.4)$$

şeklinde ifade edilir. Burada  $N \rightarrow \infty$  termodinamik limitte işlem yapıldığını göstermektedir. Klasik bir sistem büyük hacim (V) içerisinde çok sayıda (N) molekülün kompozisyonu olarak düşünülebilir. N ve V' nin büyüklüğünün genel olarak

$$\begin{aligned} N &\approx 10^{23} \\ V &\approx 10^{23} \end{aligned} \quad (2.5)$$

olduğu düşünülür. N ve V çok büyük sayılar olduğundan bir limit durumunu göz önüne almak uygundur. Bu limit "termodinamik limit" olarak bilinmektedir.  $v = V/N$  özgül hacmi sonlu bir sayı olacak şekilde termodinamik limitte parçacık sayısı ve hacim sonsuza gider.

$$\begin{aligned} N &\rightarrow \infty \\ V &\rightarrow \infty \end{aligned} \quad (2.6)$$

Termodinamik limitte ( $N \rightarrow \infty$ ) manyetizasyon ve iç enerji serbest enerjinin dış alan ve sıcaklığa göre birinci türevinden

$$M(H, T) = -\partial(f(H, T)/kT)/\partial H \quad (2.7)$$

$$H_1(H, T) = -kT^2 \frac{\partial}{\partial T} [f(H, T)/kT] \quad (2.8)$$

şeklinde tanımlanır. Manyetik alınganlık  $\chi$  ve özısı da manyetizasyonun ve iç enerjinin türevinden, diğer bir ifadeyle serbest enerjinin dış alan ve sıcaklığa göre ikinci türevinden

$$\chi(H, T) = \partial M(H, T)/\partial H \quad (2.9)$$

$$C(H, T) = \frac{\partial}{\partial T} H_1(H, T) \quad (2.10)$$

ifadesi ile elde edilebilir.

Manyetizasyon cinsinden ifade edilebilen bir nicelik olan Binder kümülanı aşağıdaki ifade ile tanımlanır [115].

$$U_L = 1 - \langle M^4 \rangle / (3 \langle M^2 \rangle^2) \quad (2.11)$$

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

Kritik sıcaklık civarında termodinamik niceliklerin kritik davranışını ifade edebilmek için sıcaklık (T),

$$\varepsilon = (T - T_C)/T_C \quad (2.12)$$

indirgenmiş sıcaklık ile yer değiştirir.  $H = \varepsilon = 0$  ' da ıraksamaya sahip olan termodinamik fonksiyonlar kuvvet kanunu çerçevesinde indirgenmiş sıcaklığın tamsayı olmayan kuvvetleri ile ifade edilir. Bu kuvvetlere “kritik üs” denilir.

Manyetizasyon ve manyetik alınganlığın  $T_C$  civarındaki kritik davranışı indirgenmiş sıcaklığa bağlı olarak aşağıdaki kuvvet kanunları ile ifade edilmektedir.

$$M \sim (-\varepsilon)^\beta \quad \varepsilon \rightarrow 0^- \quad (2.13)$$

$$\sim (\varepsilon)^{\beta'} \quad \varepsilon \rightarrow 0^+$$

$$kT\chi \sim (-\varepsilon)^{-\gamma'} \quad \varepsilon \rightarrow 0^- \quad (2.14)$$

$$\sim (\varepsilon)^{-\gamma} \quad \varepsilon \rightarrow 0^+$$

Bu ifadelerdeki üslerden  $\beta$  manyetizasyon ve  $\gamma$  ise manyetik alınganlık kritik üsleri olarak adlandırılmaktadır.

Özısının kritik sıcaklık civarındaki davranışı  $\alpha$  kritik üssü cinsinden,

$$C \sim (-\varepsilon)^{-\alpha'} + b^- \quad \varepsilon \rightarrow 0^- \quad (2.15)$$

$$\sim \varepsilon^{-\alpha} + b^+ \quad \varepsilon \rightarrow 0^+$$

ifadesindeki gibidir.

$T_C$  civarında serbest enerjinin ıraksak kısmı kuvvet kanunu ile değişir ve özısı kritik üssü  $\alpha$ ,

$$f(0,T) \sim \varepsilon^{2-\alpha} \quad (2.16)$$

şeklinde de tanımlanabilir. Bu tanım;  $H_1(0, T)$ ' nin sürekli,  $C(0, T)$ ' nin  $T_C$ ' nin iki tarafında da ıraksadığı durumda,  $(\alpha=\alpha')$  için Eş. 2.15' e eşittir. Bu  $f(0, T)$ ' de tek olası ıraksamanın  $f'$ ' nin herhangi bir türevindeki süreksizlik olduğunu düşündürür. Eğer ilk  $r-1$  türev sürekli fakat  $r$  inci türev süreksiz ise sistem "r inci dereceden faz geçişi" yapıyor denir. Mesela  $H_1$ ' daki süreksizlik (gizli ısı) "birinci derece faz geçişi" nin varlığını işaret eder. Eş. 2.16' den  $2 - \alpha = r$  ' dir. Bu durumda birinci derece faz geçişi için  $\alpha=1$ ' dir. Eş. 2. 15 ve Eş. 2. 16' dan  $H_1(0, T)$ ,  $\varepsilon^{1-\alpha}$  ile orantılı bir terim içerir. Bu nedenle  $\alpha$  kritik üssü negatif değer alabilir ( $\alpha \leq 1$ ).

Çizelge 2.1. Termodinamik nicelikler ile ilgili kritik üsler [46, 47]

| Fiziksel Nicelik           | C (Özısı)               |                        | M (Düzen Parametresi)    | $\chi$ (Alınganlık) | $\xi$ (Korelasyon Uzunluğu) |
|----------------------------|-------------------------|------------------------|--------------------------|---------------------|-----------------------------|
|                            | $\alpha'$ ( $T < T_C$ ) | $\alpha$ ( $T > T_C$ ) | $\beta$ ( $T \leq T_C$ ) | $\gamma, \gamma'$   | $\nu$                       |
| d=2 Ising Model            | 0                       | 0                      | 0.125                    | 1.75                | 1                           |
| d=3 Ising Model            | 0.12                    | 0.12                   | 0.31                     | 1.25                | 0.63                        |
| Manyetik Sistem (Deneysel) | 0                       | 0                      | 0.33                     | 1.30~1.37           | 0.63~0.65                   |

Çizelge 2.1' de özısı (C), düzen parametresi (M), alınganlık ( $\chi$ ) ve korelasyon uzunluğu ( $\xi$ ) termodinamik nicelikleri için; iki, üç boyutta ve deneysel olarak elde edilen kritik üs değerleri ( $\alpha, \beta, \gamma, \nu$ ) görülmektedir.

Buraya kadar anlatılan kritik davranışlar ikinci derece faz geçişlerinde gözlenmektedir. Birinci derece faz geçişlerinde ise korelasyon uzunluğu kritik nokta civarında sonlu bir değer aldığı, ıraksamadığı, için termodinamik niceliklerin kritik davranışlarını kritik üsler ile tarif etmek mümkün değildir. Bununla beraber Monte Carlo [48-51], transfer-matris metodu [52] ve renormalizasyon grup teorisi [53] gibi

yöntemlerle elde edilen sonuçlar birinci derece faz geçişlerinde sonlu örgü etkisinin sistem hacmine bağlı olduğunu göstermiştir. Bu nedenle manyetik alınganlık ve özısı termodinamik niceliklerinin faz geçiş noktasındaki pik yükseklikleri sistem hacmi ile,  $L^d$ , artmaktadır.

$$\chi_{\max} \sim L^d \quad (2.17)$$

$$C_{\max} \sim L^d$$

Eş. 2.17' de geçen  $d$  örgü boyutu olup, kare örgü için 2, kübik örgü için 3 değeri alır.

## 2.2. İkinci Derece Faz Geçişi

İkinci derece faz geçişleri, serbest enerjinin birinci türevinin sürekliliği, ikinci türevinin süreksizliği ile tanımlanır. Bu durumu Fe, Co ve Ni gibi manyetik malzemelerde görülen ferromanyetizmadan paramanyetizmaya, ikili alaşımlarda görülen düzenden düzensizliğe ve süper akışkanlarda görülen süper akışkandan akışkana faz geçişlerinde görmek mümkündür. Manyetik malzemelerde düzen parametresi manyetizasyondur. Herhangi bir manyetik sistem için faz geçiş sıcaklığı civarında manyetizasyon ve iç enerjide görülen sürekliliğin yanı sıra alınganlık ve özısıda görülen ıraksama ikinci derece faz geçişinin karakteristik özelliğidir.

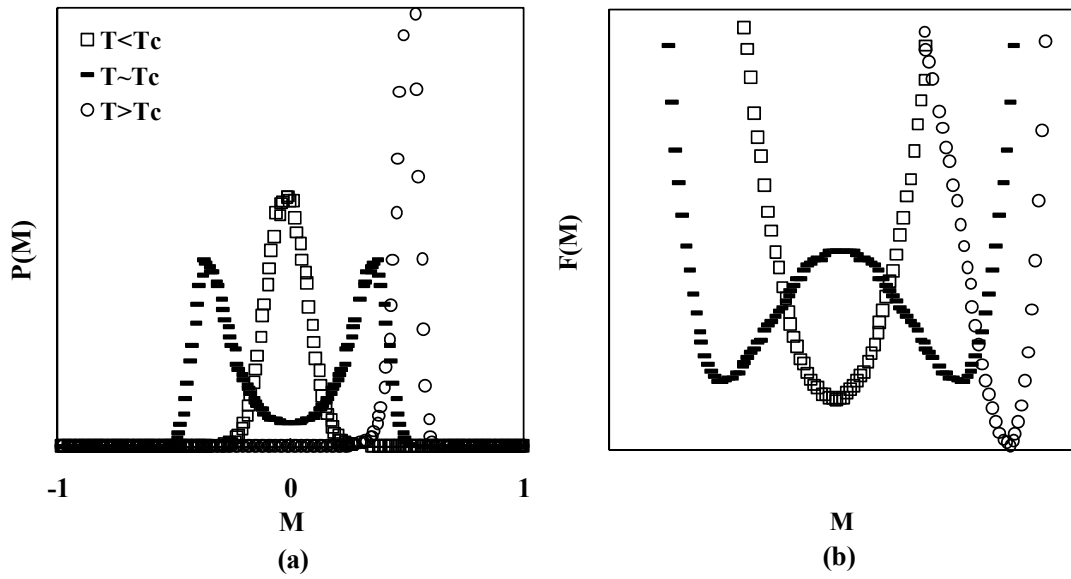
İkinci derece faz geçişini tanımlamanın bir başka yolu ise düzen parametresi olasılık dağılımı  $P(M)$  ve iç enerji olasılık dağılımı  $P(E)$  'yi incelemektir [48, 49, 114].  $P(M)$ , faz geçişi kritik sıcaklığının altında düzeni ifade eden bir pike sahiptir. Kritik sıcaklıkta ise iki eşit yükseklikte pik göze çarpar. Sıcaklık arttıkça yaklaşan pikler kritik sıcaklığın üstünde düzensizliği işaret eden tek pike dönüşür. Olasılık dağılımından yola çıkılarak sistemin entropisi ve serbest enerjisini tanımlamak mümkündür. Bir sistemin entropisi olası hallerinin ortalama sayısının logaritmasıdır [54].

$$S = \sum_i P_i \log_2 P_i \quad (2.18)$$

Burada  $P_i$ ,  $i$ . hal için ihtimaliyettir. Sistemin serbest enerjisi,  $\Phi$  olasılık dağılımı elde edilen nicelik olmak üzere, olasılık dağılımı cinsinden

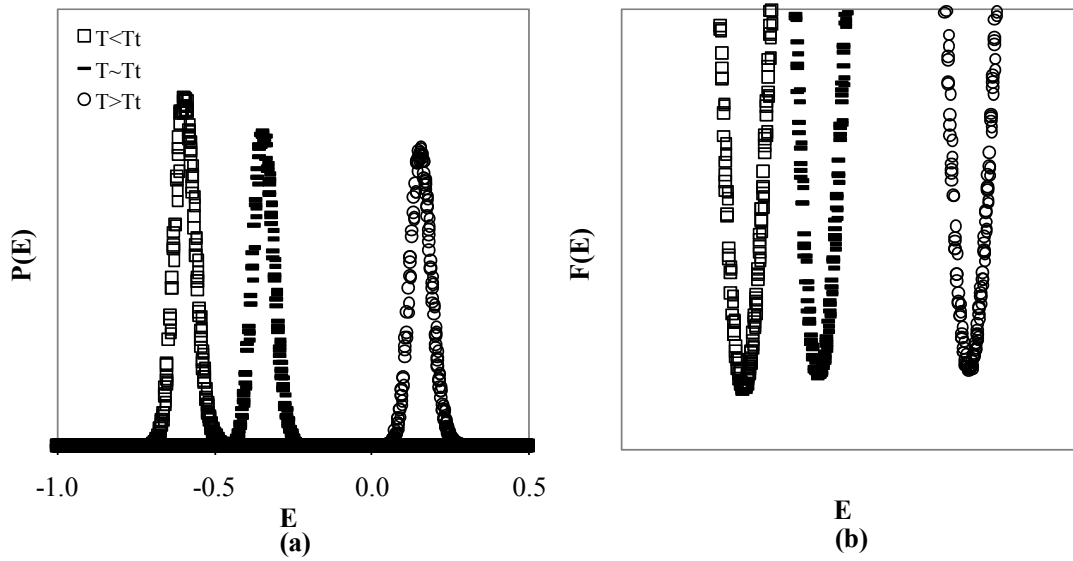
$$F(\Phi) = -kT \ln P(\Phi) \quad (2.19)$$

ile hesaplanabilir [114]. Serbest enerji ikinci derece faz geçişinde iki minimuma sahiptir. Şekil 2.4' de düzen parametresi olasılık dağılımı  $P(M)$  ve serbest enerji  $F(M)$ ' nin durumları görülmektedir.



Şekil 2.4. İkinci derece faz geçişinde a)düzen parametresi olasılık dağılımı  $P(M)$  ve b) serbest enerji  $F(M)$ ' nin kritik sıcaklık civarındaki davranışı

Şekil 2.5' te iç enerji dağılımı  $P(E)$  ve serbest enerji  $F(E)$ ' nin durumları görülmektedir. Yarı kararlı durumların olmadığı ikinci derece faz geçişlerinde tek minimum ortaya çıkar [114].

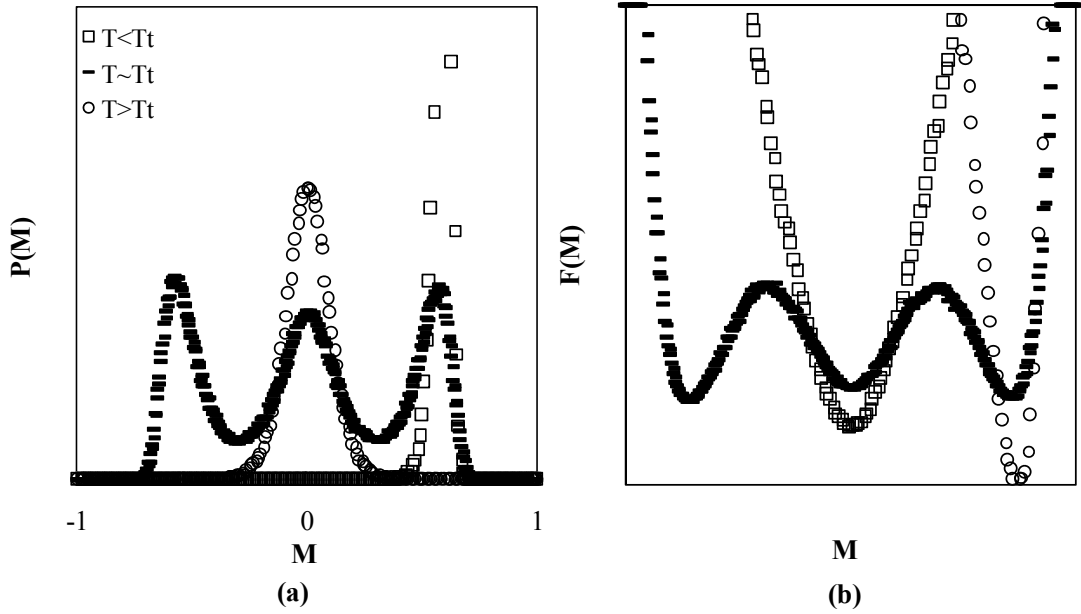


Şekil 2.5. İkinci derece faz geçişinde a)düzen parametresi olasılık dağılımı  $P(E)$  ve b) serbest enerji  $F(E)$ ' nin kritik sıcaklık civarındaki davranışı

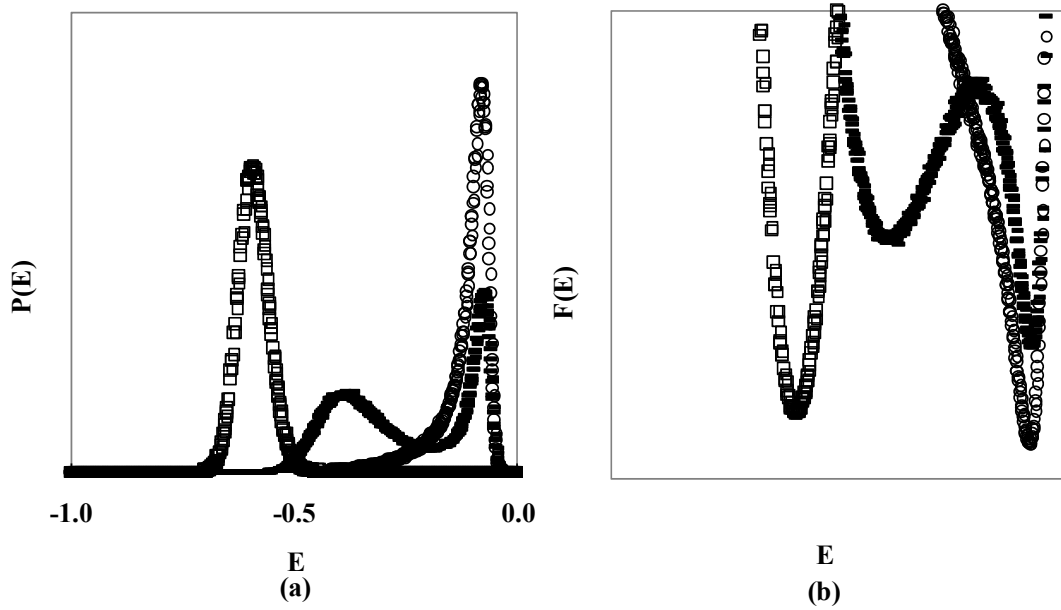
### 2.3. Birinci Derece Faz Geçışı

Birinci derece faz geçişi serbest enerjinin birinci türevindeki, dolayısıyla düzen parametresi ve iç enerjideki süreksizlik ile tanımlanır. Alınganlık ve özısı ise faz geçiş sıcaklığında  $\delta$ -tekilliğine sahiptir. Katı-sıvı-gaz geçişleri ve Bose-Einstein yoğunlaşması birinci derece faz geçişlerine örnektir.

Birinci derece faz geçişi yapan sistemde olasılık dağılımı geçiş sıcaklığının altında iki pike sahiptir. Geçiş sıcaklığına yaklaşırken  $P(M)$  düzenli ve düzensiz iki fazın “bir arada” bulunduğunu işaret edecek şekilde eşit yükseklikte üç pik sergiler. Geçiş sıcaklığının üzerinde ise  $P(M)$  tek piklidir (Şekil2.6). Benzer olarak ikinci derece faz geçişi yapan sistemin serbest enerjisi  $F(M)$ ; geçiş sıcaklığının altında ve üstünde tek pike, geçiş sıcaklığında eşit derinlikte üç minimuma sahiptir. Birinci derece faz geçişlerinde iç enerji olasılık dağılımından elde edilen serbest enerji geçiş sıcaklığının altında tek minimuma sahiptir. Geçiş sıcaklığı civarında ortaya çıkan iki minimum arasında gidip gelen sistemin hangi minimumdaki durumda olduğunun ayırt edilebilmesi yarı kararlı durumları meydana getirir. Geçiş sıcaklığının üstünde



Şekil 2.6. Birinci derece faz geçişinde a) düzen parametresi olasılık dağılımı  $P(M)$  ve b) serbest enerji  $F(M)$ ' nin kritik sıcaklık civarındaki davranışı



Şekil 2.7. Birinci derece faz geçişinde a) düzen parametresi olasılık dağılımı  $P(E)$  ve b) serbest enerji  $F(E)$ ' nin kritik sıcaklık civarındaki davranışı

ise serbest enerjide tek minimum görülür (Şekil 2.7). Yarı kararlı durumlar düzen parametresi ve iç enerjinin faz geçiş bölgesinde S-şekli sergilemesine neden olur [85-89, 104]. Yarı kararlı durumların meydana gelmesi birinci derece faz geçişinin ayırt

edici özelliğidir. Birinci ve ikinci derece faz geçişlerini birbirinden ayıran bir başka nicelik ise korelasyon uzunluğudur. İkinci derece faz geçişinde kritik noktada sonsuza giden korelasyon uzunluğu birinci derece faz geçişlerinde sonludur. Bu nedenle küçük örgülerde yapılan hesaplamalarda birinci derece faz geçişi korelasyon uzunluğunun örgü boyu nedeniyle sonsuz algılanmasından dolayı ikinci derece gibi görünebilir.

Simülasyon çalışmalarında sonlu örgülerin çalışılması birinci derece faz geçişindeki süreksizliğin azalmasına ve  $\delta$ -tekilliğinin genişlemesine neden olur [48, 49, 85-89, 104, 114, 115]. Aralarındaki bariyer yeterince yüksek olmadığında sistem iki minimumu ayırt edemez. Bu nedenle faz geçişi ikinci derece gibi görülebilir. Artan örgü uzunluğu ile beraber aradaki bariyerde yükselir ve serbest enerji yüzeyi simülasyon tarafından doğru algılanabilir. Bu sadece denge durumlarını algılayabilen teorik hesaplamalara kıyasla simülasyonun avantajıdır. Birinci derece faz geçişlerinde alınganlık ve özısı, yüksekliği hacimle değişen, hacim büyüdükçe  $\delta$ -tekilliğine sahip olan bir fonksiyon gibi davranır. Bu nedenle faz geçişi sırasında ortaya çıkan tekil davranış ikinci derece faz geçişinde olduğu gibi kritik üslerle karakterize edilemez. Bunun yerine tekil davranışlar örgü hacmi ile ilişkilendirilir.

İstatistiksel mekanik açısından sistemin mikroskobik özellikleri (atomlar arası kuvvetler) ile makroskobik fazları arasında bir bağ kurulabilir. Şayet etkin atomik etkileşimler biliniyorsa hangi şartlar altında sistemin bir fazdan diğer bir faza geçtiğini tahmin etmek mümkündür. Ising model ferromanyetik sistemlerin faz yapılarının belirlenmesi için geliştirilen en basit modeldir. Bu çalışmada zengin bir faz diyagramının yanı sıra geniş uygulama alanına sahip olan spin-1 Ising model incelenmiştir.

## 2.4. Sonlu Örgü Ölçekleme Teorisi

Fiziksel sistemlerin kritik davranışlarını taklit etmek amacıyla yapılan hesaplamalar sonlu örgüler üzerinde gerçekleştirilebilmektedir. Bu nedenle sonlu örgülerdeki hesaplamalardan sonsuz örgü davranışını tahmin edebilmek için sonlu örgü ölçekleme teorisi geliştirilmiştir. Sonlu örgü ölçekleme bağıntıları; sistemin kritik nokta yakınlarında olması ve tüm uzunlukların, sisteme ait karakteristik uzunluk olan,  $\xi$  korelasyon uzunluğu cinsinden ifade edilmesi gibi kabullerden elde edilmektedir. Bu yüzden ölçekleme teorisi uzunluk ölçeğinin değişimine bağlı olarak termodinamik niceliklerde görülen değişimlerle ilgilidir. Boyutlu bir niceliğin değeri standart bir birim uzunluğa bağlı olarak değişir [55].

### 2.4.1. Termodinamik nicelikler için sonlu örgü ölçekleme bağıntıları

Ölçekleme teorisinin  $\varepsilon = 0$  komşuluğundaki bir sistem için tek karakteristik uzunluk olarak kabul ettiği korelasyon uzunluğu deneysel olarak kritik noktada ( $\varepsilon = 0$ ) ıraksar. Yani sistem kritik sıcaklıkta karakteristik bir uzunluğa sahip değildir ve korelasyon uzunluğu ölçekleme dönüşümü altında değişmezdir. Sistemin bir kısmı sistem kadar büyütüldüğünde bir fark görülüyorsa, bu durumda sistem ölçek dönüşümü altında değişmezdir. Kritik noktada korelasyon fonksiyonu aşağıdaki ifadedeki gibi davranır.

$$g(x) \approx x^{-p} \quad (2.20)$$

Birim uzunluk  $b$  çarpanı kadar arttığında  $x \rightarrow x' = x/b$  şeklinde koordinat dönüşümü gerçekleşir. Bu durumda korelasyon fonksiyonu homojenlik kuralına göre

$$g(x/b) = b^p g(x) \quad (2.21)$$

şeklinde yazılabilir. Kritik noktada termodinamik fonksiyonlar korelasyon fonksiyonu gibi homojen fonksiyonlarla ifade edilebilir. Hacim başına serbest enerji ( $f = F/kTV$ )

$$f(h', \varepsilon') = b^d f(h, \varepsilon) \quad (2.22)$$

$$f(h, \varepsilon) = b^{-d} f(b^{Dh} h, b^{D\varepsilon} \varepsilon)$$

homojen fonksiyonu ile ifade edilir. Korelasyon uzunluğunun sonlu örgülerde örgünün boyu ile sınırlı kaldığı ( $\xi \rightarrow L$ ) ve kritik sıcaklık civarında  $\xi \approx \varepsilon^{-\nu}$  şeklinde davrandığı dikkate alınarak

$$\varepsilon' = b^{1/\nu} \varepsilon \quad (2.23)$$

ifadesi elde edilir. Manyetizasyon kritik civarındaki davranışı için verilen  $m \approx h^{1/\delta}$  ve  $m \approx \varepsilon^\beta$  ifadeleri kullanılarak,

$$h' = b^{\delta\beta/\nu} h \quad (2.24)$$

elde edilir [47]. Bu durumda  $b \rightarrow L$  için serbest enerji ifadesi aşağıdaki gibidir.

$$f(h, \varepsilon) = L^{-d} f(L^{\delta\beta/\nu} h, L^{1/\nu} \varepsilon) \quad (2.25)$$

$\varepsilon$ , indirgenmiş sıcaklık olmak üzere sonsuz ve sonlu örgü kritik sıcaklıkları arasındaki fark,

$$\Delta\varepsilon = \frac{T_C(\infty) - T_C(L)}{T_C(\infty)} \propto aL^{-1/\nu} \quad L \rightarrow \infty \quad (2.26)$$

şeklinde tanımlanır [115]. Ölçekleme bağıntısındaki  $L$  örgünün kenar uzunluğu, kritik üsler ise “ sonsuz örgü kritik üsleri ” dir. Tüm termodinamik nicelikler için sonlu örgü ölçekleme bağıntıları, serbest enerji için verilen sonlu örgü ölçekleme bağıntısından elde edilir. Kendiliğinden manyetizasyon için sonlu örgü ölçekleme bağıntısı

$$\begin{aligned}
M(h, \varepsilon) &= \partial f / \partial h \\
&= L^{-\beta/\nu} X^o(L^{\delta\beta/\nu} h, L^{1/\nu} \varepsilon)
\end{aligned} \tag{2.27}$$

halini alır. Manyetik alınganlık ve ÖZİSİ için sonlu örgü ölçekleme bağıntıları, benzer biçimde,

$$kT\chi = L^{\gamma/\nu} Y^o(L^{\delta\beta/\nu} h, L^{1/\nu} \varepsilon) \tag{2.28}$$

$$C = L^{\alpha/\nu} Z^o(L^{\delta\beta/\nu} h, L^{1/\nu} \varepsilon) \tag{2.29}$$

bağıntıları ile verilir [115].

$U_L$  oranlarının sonlu örgü ölçekleme teorisine göre ölçeklenmiş formu aşağıdaki şekildedir [115].

$$U_L = \mathcal{G}(\varepsilon L^{1/\nu}) \tag{2.30}$$

$U_L$ ' nin bu şekilde ölçeklenmesi sonucunda  $\nu$  kritik üssünün değeri elde edilebilir [115].

## 2.5. Spin Modelleri

### 2.5.1. Spin-1/2 Ising modeli

1920' lerin başında Lenz tarafından ferromanyetizma için önerildi [56]. 1925 yılında Ising modelin bir boyutta analitik çözümünü yaptı ve faz geçişi olmadığını öne sürdü. Ising çeşitli yaklaşımlarla yüksek boyutlarda da faz geçişi olmadığını iddia etti [57]. Daha sonra Heisenberg Ising modeli ele alarak faz geçişlerini gözledi [58]. 1936 ' da Peierls düşük sıcaklıklarda Ising model için kendiliğinden manyetizasyonu tanımladı ve yüksek boyutlarda faz geçişi olduğunu kanıtladı [59]. Modelin iki

boyutta analitik çözümü 1944 yılında Onsager tarafından dikdörtgen örgüde sıfır alan için yapıldı [1]. Diğer boyutlarda modelin analitik çözümü henüz yapılmamıştır.

Ising model, ferromanyetik malzemelerin termodinamik özelliklerini incelemek amacıyla kurulmuş bir modeldir. Ising modelde sistem olarak örgü konumu adı verilen N tane sabit noktadan oluşan n- boyutlu periodik bir örgü incelenir.

Ising model, N tane sabit noktadan oluşan n-boyutlu periyodik sistemleri inceler. İncelenen sistem, örgünün noktalarında bulunmaya zorlanmış spinlerden oluşur. Her bir spin, belli bir eksen boyunca veya bu eksene zıt yönde yönelmiş mikroskobik manyetizasyon olarak ele alınarak, iki olası biçim kazanır. Noktalar +1 ( eksene paralel, spin yukarı ) veya -1 ( eksene zıt, spin aşağı ) değerlerine sahip  $S_i$  değişkeni ile işaretlenir. Verilen bir  $S=\{S_i\}$  kümesi tüm sistemin konfigürasyonunu belirtmek üzere, sistemin Hamiltonien' i  $S$ ' nin bir fonksiyonudur.

$$H = -\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j + h \sum_i S_i \quad (2.31)$$

$\langle ij \rangle$  en-yakın komşu çiftleri üzerinden toplamı,  $J_{ij}$  etkileşim enerjisini, h ise dış alan parametresini temsil eder. Etkileşimler izotropik ise  $J_{ij}=J$  alınır. Şekil 2.8.'te spin-1/2 Ising modelin sahip olduğu taban durumları görülmektedir.



Şekil 2.8. Spin-1/2 Ising model için; a) ferromanyetik taban durum, b) antiferromanyetik taban durum.

### 2.5.2. Spin1/2 Ising modelin diğer modellerdeki karşılığı

Ferromanyetik malzemelerin kritik davranışını incelemek için kurulan Ising model, akışkanları modellemek için kullanılan örgü gazı modeli ve ikili alaşım modeli ile

benzerlik gösterir. Bu benzerliği ortaya koymak amacıyla örgü gazı ve ikili alaşım modellerinden bahsedilecektir.

### Örgü gazı modeli

Manyetik sistemler için tanımlanmış bir model olan Ising model akışkanları modellemek içinde kullanılır. 1952 yılında Lee ve Yang bir akışkan modeli olan örgü gazı modelinin Ising modele denk olduğunu öne sürmüştür [60]. Bu tespit doğrultusunda bir akışkan  $\Phi(r)$  parçacık potansiyeli ile etkileşen moleküller topluluğu olarak ele alınabilir. Bu potansiyel güçlü kısa-erim itme, çekici kuyu ve hızla kaybolan bir kuyruğa sahip olacaktır. Bu tür potansiyelle en bilinen örnek aşağıdaki eşitlikle tanımlanan Lennard-Jones potansiyelidir.

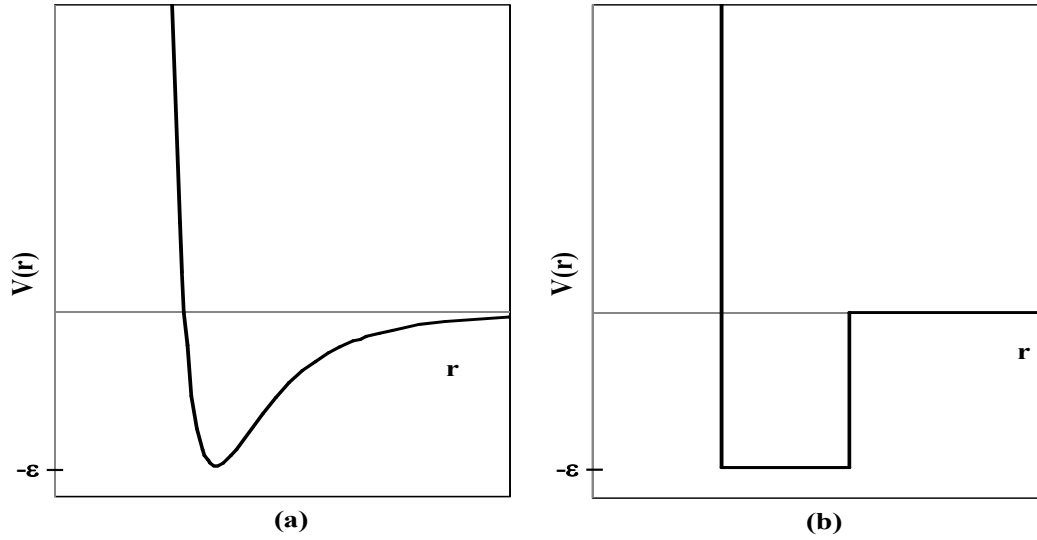
$$\Phi(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{r_0}{r} \right)^{12} - \left( \frac{r_0}{r} \right)^6 \right] \quad (2.32)$$

Şekil 2.9(a)' da Lennard-Jones potansiyeli görülmektedir.  $\Phi(r)$  ile etkileşen moleküllerin uzayda herhangi bir yeri işgal etmesine izin vermek yerine bir örgünün noktalarında bulunmaya zorlamak nümerik hesaplamalar için gerekli bir adımdır.  $\Phi(r)$  potansiyeli  $r=0$ ' da sonsuz itici olduğundan iki molekül aynı noktayı işgal edemez. Her  $i$  noktası, nokta işgal edilmemişse sıfır, işgal edilmişse 1 değerini alan,  $S_i$  değişkeni ile ilişkilendirilir. Eğer  $N$  tane nokta varsa moleküllerin uzaysal düzenlenimi  $S = \{S_1, S_2, \dots, S_N\}$  ile tanımlanabilir. Herhangi bir düzenlenimde moleküllerin sayısı aşağıdaki eşitliğe uyar.

$$n = S_1 + S_2 + \dots + S_N \quad (2.33)$$

Sistemin potansiyel enerjisi ise

$$E = - \sum_{\langle ij \rangle} \Phi_{ij} S_i S_j \quad (2.34)$$



Şekil 2.9. Akışkan modeli için etkileşim potansiyeli: a) Lennard-Jones, b) kare kuyu

şeklini alır. Burada toplam tüm parçacık çiftleri üzerindedir.  $\Phi_{ij} = \Phi(r_{ij})$  ise  $i$  ve  $j$  yerlerindeki moleküller arası etkileşim enerjisidir.

Moleküllerden oluşan akışkan sistem büyük kanonik küme gibi davranır. Büyük kanonik küme bölüşüm fonksiyonu

$$Z = \sum_s \exp[(n\mu - E_s) / kT] \quad (2.35)$$

şeklinde tanımlanır. Burada  $\mu$  etkin kimyasal potansiyeldir. Sistemdeki basıncı ( $P$ ), yoğunluğu ( $\rho$ ) ve sıkıştırılabilirliği ( $k_\tau$ ) bölüşüm fonksiyonu yardımıyla tanımlamak mümkündür. Aşağıdaki eşitliklerdeki diferansiyel işlemleri sabit sıcaklıkta gerçekleştirilir.

$$P = N^{-1} kT \ln Z \quad (2.36)$$

$$\rho = \langle n \rangle / N \quad (2.37)$$

$$= \frac{\partial P}{\partial \mu}$$

$$k_{\tau} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial P} \quad (2.38)$$

$$= \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial \mu}$$

Lennard-Jones potansiyeli gerçekçi bir potansiyel olmasına rağmen sıvı-gaz geçişlerinin nitel özelliklerinin potansiyelin detaylarına bağlı olması beklenmez. Kısa-erimli itici etkileşim ve çekici kuyu olması yeterlidir.  $V(r)$ , parçacıklar arası uzaklık azaldığında negatif değer, parçacıklar arası uzaklık ortadan kalktığında büyük pozitif bir değer, diğer durumlarda ise sıfır değeri alır.

$$\Phi_{ij} = \begin{cases} \infty & (i=j) \\ -\varepsilon & (r : \text{en-yakın komşu}) \\ 0 & (\text{diğer durumlar}) \end{cases} \quad (2.39)$$

Bu tanım, sık sık model hesaplamalarında kullanılan kare kuyu potansiyeli tanımına uygundur (Şekil 2.9.b). İki molekülün aynı noktayı işgal etmesi durumunda  $\Phi_{ij}=\infty$  olsun. Bu iki molekülün aynı yeri işgal etmesi yasaklanmış demektir.  $\Phi_{ij}$  Eşitlik 2.37 ile verilmişse ve Eşitlik 2.32 dikkate alınırsa enerji aşağıdaki gibi verilir.

$$E = -\varepsilon \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad (2.40)$$

Toplam en-yakın komşu çiftleri üzerinden alınmaktadır. Tüm  $S_i$ ' ler eşitlik 2.41' de verilen  $\sigma_i$  spini ile yer değiştirir.

$$\sigma_i = 2S_i - 1 \quad (2.41)$$

Bu eşitliğe göre nokta boşsa  $\sigma_i=-1$ , doluyrsa  $+1$  değerini almaktadır. Eğer her nokta  $q$  adet komşuya sahipse en-yakın komşu çiftlerinin sayısı  $\frac{1}{2} Nq$  ' dur. Bu durumda bölüşüm fonksiyonu

$$Z = \sum_{\sigma} \exp \left\{ \left[ \varepsilon \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + (2\mu + \varepsilon q) \sum_i \sigma_i + N \left( \frac{1}{2} \varepsilon q + 2\mu \right) \right] / 4kT \right\} \quad (2.42)$$

şeklını alır. Burada

$$J = \varepsilon / 4, \quad H = (2\mu + \varepsilon q) / 4 \quad (2.43)$$

alınarak  $Z$  Ising model bölüşüm fonksiyonuna dönüşmektedir. Örgü gazı deęişkenleri Ising model deęişkenleri cinsinden

$$\varepsilon = 4J \quad (2.42)$$

$$\mu = 2H - 2qJ \quad (2.43)$$

$$P = -\frac{1}{2}qj + H - f \quad (2.44)$$

$$\rho = \frac{1}{2}(1 + M) \quad (2.45)$$

$$\rho^2 k_\tau = \frac{1}{4} \chi \quad (2.46)$$

şeklinde tarif edilebilmektedir. Örgü gazı modeli, örgü sabiti sonlu alınarak, kristallerdeki erime olayını incelemek için kullanılmaktadır [47].

### İkili Alaşım

Spin-1/2 Ising modelin karşılığı olan bir başka model de ikili alaşımlardır. İkili alaşımlar iki çeşit atomdan oluşan iki durumlu bir sistem olarak ele alınabilir. İkili

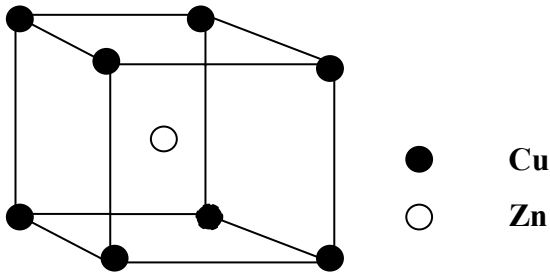
alaşımlardaki iç enerjiyi hesaplamak için sistemin yapısı ve atomların yeri göz önüne alınır.

Su filtrelerinden sağlık sektörüne kadar uzanan geniş bir kullanım alanı olan CuZn ikili alaşımlara iyi bir örnek teşkil eder (Şekil 2.10). bcc yapıya sahip CuZn alaşımlarda Cu küp köşelerinde Zn ise cisim merkezinde bulunur. Her bir örgü noktası sadece bir atom tarafından işgal edilebilir. Atomlar;

$$\begin{aligned} \text{Cu} &\rightarrow 1 \\ \text{Zn} &\rightarrow 2 \end{aligned} \quad (2.47)$$

şeklinde etiketlenerek toplam örgü noktası sayısı  $N = N_1 + N_2$  olarak hesaplanır. Cu-Cu ( $N_{11}$ ), Zn-Zn ( $N_{22}$ ) ve Cu-Zn ( $N_{12}$ ) olmak üzere üç çeşit en-yakın komşu çifti vardır. En-yakın komşu etkileşimleri göz önüne alınarak sistemin enerjisi,

$$E_{Cu}(N_{11}, N_{22}, N_{12}) = \varepsilon_1 N_{11} + \varepsilon_2 N_{22} + \varepsilon_{12} N_{12} \quad (2.48)$$



Şekil 2.10. bcc yapıdaki ikili alaşımda atomların yerleşimi.

şeklindedir.  $N_{11}$ ,  $N_{22}$  ve  $N_{12}$ , en-yakın komşu çiftleri sayıları, birbirinden bağımsız değildir.

$$\begin{aligned}
 zN_1 &= 2N_{11} + N_{12} \\
 zN_2 &= 2N_{22} + N_{12}
 \end{aligned} \tag{2.49}$$

$$N_1 + N_2 = N$$

Bu yüzden,

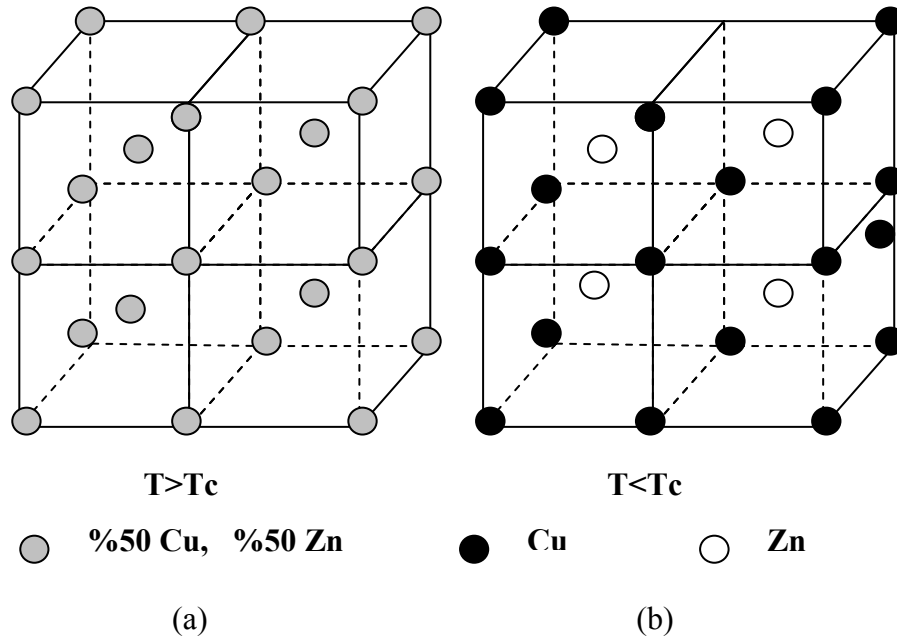
$$N_{12} = zN_1 - 2N_{11} \tag{2.50}$$

$$N_{22} = \frac{1}{2}zN + N_{11} - zN_1$$

şeklinde ifade edilebilir. Böylece enerji sadece  $N_{11}$ ' e bağlıdır. Parantez içindeki terim ise bir sabittir [47].

$$E_{Cu}(N_{11}) = (\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - 2\varepsilon_{12})N_{11} + \left[ z(\varepsilon_{12} - \varepsilon_2)N_1 + \frac{1}{2}z\varepsilon_2N \right] \tag{2.51}$$

Şekil 2.11' de spin-1/2 Ising modelle incelenebilen bir ikili alaşım olan CuZn görülmektedir. Spin-1/2 Ising model hamiltonyeninde  $S_i$  spin değişkeni;  $i$  noktası Cu tarafından işgal edilmişse +1, Zn atomu tarafından işgal edilmişse -1 değeri alır. İkili alaşım için uygun düzen parametresi, seçilen bir alt örgü üzerinde Cu ve Zn atomlarının sayıları arasındaki farkla ifade edilir. Yüksek sıcaklıkta Cu ve Zn atomları örgü noktalarını eşit olasılıkla işgal eder. Düşük sıcaklıklarda ise alaşım  $T_C=733K$ 'den itibaren düzenli yapıya ikinci derece faz geçiş yapar. Kriğin altında CuZn ikili alaşımı, Cu atomlarının örgü köşelerinde Zn atomlarının ise hacim merkezlerinde bulunduğu düzenli yapıdadır. Çizelge 2.2' de Ising model için tanımlanan; spin değişkeni, düzen parametresi, ait olduğu küme, serbest enerji, alınganlık, çiftlenim sabiti, dış alan, düzenli faz ve kritik nokta niceliklerinin örgü gazı ve ikili alaşımlardaki karşılıkları görülmektedir.



Şekil 2.11. CuZn ikili alaşımında görülebilen düzenler. a) Yüksek sıcaklıkta düzensiz yapı, b) düşük sıcaklıkta düzenli yapı [46]

Çizelge 2.2. Ising model ve karşılık gelen modeller

| Ising Model                              | Örgü Gazı  | İkili Alaşım  |
|--|--|---|
| $S_i = \pm 1/2$                          | 1(dolu), 0(boş)  | (+1)Cu, (-1)Zn  |
| Manyetizasyon                            | $\rho = \langle n \rangle / N = \frac{\partial P}{\partial \mu}$ | Kompozisyon   |
| Kanonik                                  | Z (Büyük kanonik)  | Yarı Büyük kanonik  |
| $f = N^{-1}kT \ln z$<br>(Serbest enerji) | $P = N^{-1}kT \ln Z$ (Basınç)                                    | $f = N^{-1}kT \ln Z$<br>(Serbest enerji)                                      |
| $\chi$ (Alinganlık)                      | $\alpha$ (sıkıştırılabilirlik)                                   | $\alpha$ (sıkıştırılabilirlik)  |
| J<br>(Çiftlenim sabiti)                  | $\varepsilon$ (Etkileşim enerjisi)                               | $(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - 2\varepsilon_{12})$<br>(Etkileşim enerjisi) |
| H (Dış alan)                             | $\mu$ (Kimyasal potansiyel)                                      | $\Delta\mu$ (Kimyasal potansiyel farkı)                                       |
| Düzenli faz                              | Sıvı yada gaz  | Ayrılmış faz  |
| Cruie noktası                            | Kritik nokta   | Kritik karışım noktası  |

### 2.5.3. Spin-1 Ising modeli

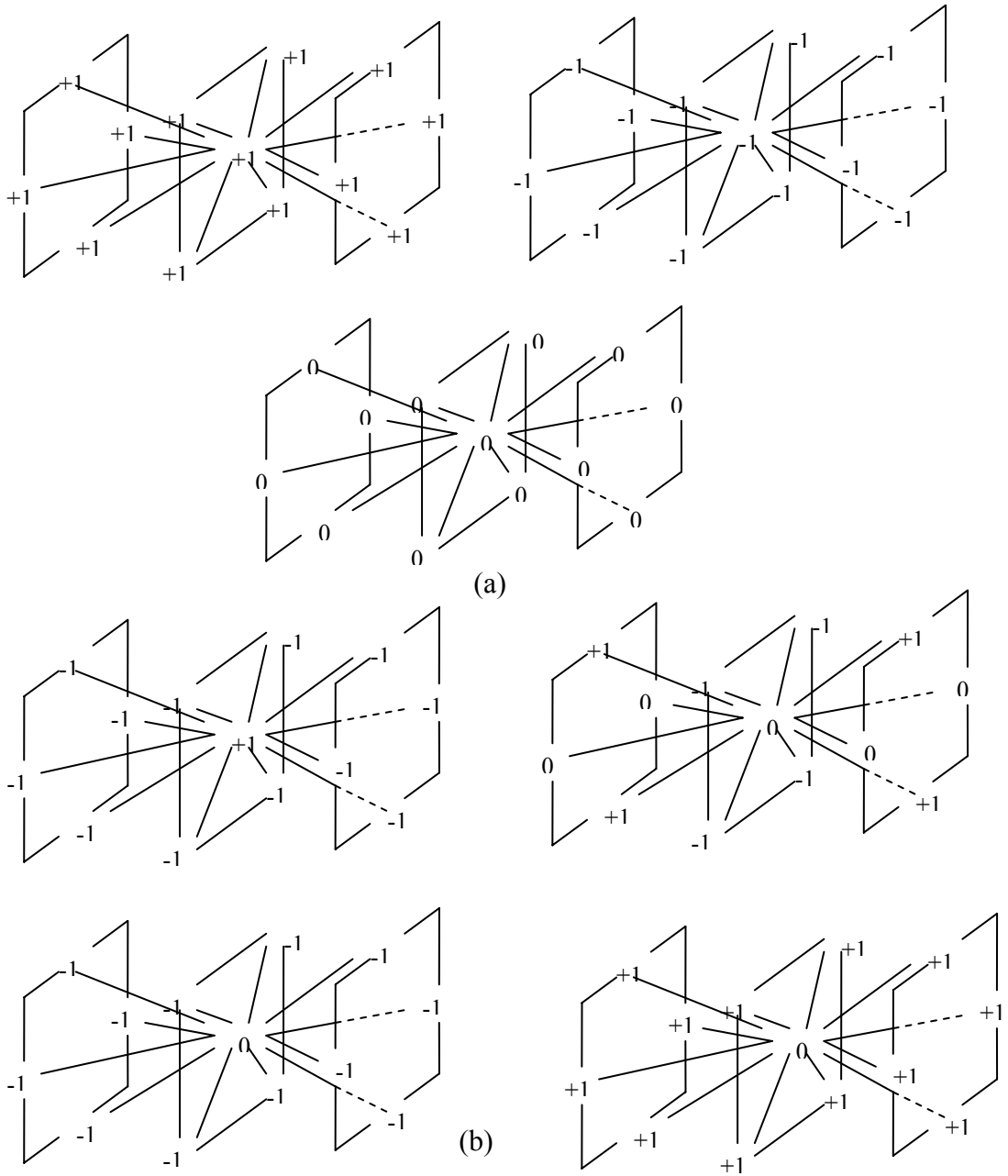
1971 yılında Blume, Emery ve Griffiths ortalama alan yaklaşımı ile tamamlanmamış spin-1 Ising modeli ortaya koyarak He<sup>3</sup>-He<sup>4</sup> karışımına uyguladı [2]. Gaz-sıvı-katı sistemlere [3] ve hamiltonyene çift kutup-dört kutup etkileşim terimi eklenerek çok bileşenli akışkanlar ve sıvı kristal karışımlara [3-5] uygulanan model yarıiletken alaşımlar [6], mikroemülsiyonlar [7], absorbate sistemler [8] ve ferromanyetik ikili alaşımlar [9] gibi sistemlere de uygulanmıştır.

Spin-1 Ising model için sistemin iç enerjisi aşağıdaki hamiltonyen ile tanımlanır.

$$H = J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + K \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 S_j^2 + L \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^2 S_j + S_i S_j^2) + D \sum_i S_i^2 + h \sum_i S_i \quad (2.52)$$

İfadedeki S<sub>i</sub> spin değişkeni ±1 ve 0 değerlerinden birini alabilmektedir. J bilineer etkileşim parametresi, K bikuadratik etkileşim parametresi, L çift kutup-dört kutup etkileşim parametresi, D kristal alan parametresi ve h dış alan parametresidir. <ij> toplamın en-yakın komşu çiftleri üzerinden alındığını ifade etmektedir. Modelin ferromanyetik ve antiferromanyetik durumlar için sahip olduğu taban durum görünümleri Şekil 2.12' de verilmektedir.

Spin-1 Ising model üç spin durumlu fiziksel sistemlerin termodinamik özelliklerinin incelenmesinde kullanılabilir. He<sup>3</sup>'ün S<sub>i</sub>=0, He<sup>4</sup>'ün S<sub>i</sub>=±1 ile temsil edildiği He<sup>3</sup>-He<sup>4</sup> karışımları ya da IIIA grubu elementin S<sub>i</sub> =+1, VA grubu elementin S<sub>i</sub> =-1 ve IVA grubu elementin S<sub>i</sub>=0' la temsil edildiği (III V)<sub>1-x</sub>IV<sub>2x</sub> grubu üçlü alaşımlar gibi üç durumlu sistemler spin-1 Ising modelle incelenen sistemlere birer örnektir [6, 61, 62-65].



Şekil 2.12. Spin-1 Ising model için fcc örgüde taban durumlar; a) ferromanyetik, b) antiferromanyetik

(III-V)<sub>1-x</sub>IV<sub>2x</sub> grubu alaşımlar için hamiltonyen, elementlerin alt örgü noktalarını işgal etme durumlarına göre değer alan izdüşüm operatörleri ile elde edilir.  $P_{III}(S_i)$  operatörünün değeri,  $i$  noktası bir III grubu atom tarafından; işgal edilmişse “bir(1)”, IV veya V tarafından işgal edilmişse “sıfır(0)”dır. Bu operatörler,

$$P_{III}(S_i) = S_i(S_i+1)/2 = (Q_i + S_i)/2$$

$$P_{IV}(S_i) = 1 - S_i^2 = 1 - Q_i \quad (2.53)$$

$$P_V(S_i) = S_i(S_i-1)/2 = (Q_i - S_i)/2$$

şeklinde tanımlanır.

Eş. 2.53 ifadeleri örgü gazı hamiltonyeninde kullanılıp (III→1, V→2 ve IV→3 ile indisenerek) tüm olası etkileşimler göz önüne alındığında,

$$\begin{aligned} H = & J_{11} \sum_{i,j} P_1(S_i)P_1(S_j) + J_{22} \sum_{i,j} P_2(S_i)P_2(S_j) - J_{12} \sum_{i,j} [P_1(S_i)P_2(S_j) + P_2(S_i)P_1(S_j)] \\ & - J_{13} \sum_{i,j} [P_1(S_i)P_3(S_j) + P_3(S_i)P_1(S_j)] - J_{23} \sum_{i,j} [P_2(S_i)P_3(S_j) + P_3(S_i)P_2(S_j)] \\ & - J_{33} \sum_{i,j} P_3(S_i)P_3(S_j) - \mu_1 \sum_i P_1(S_i) - \mu_2 \sum_i P_2(S_i) - \mu_3 \sum_i P_3(S_i) \end{aligned} \quad (2.54)$$

hamiltonyeni elde edilir. Hamiltonyende yer alan benzer terimler bir araya getirildiği takdirde aşağıdaki hamiltonyen ve J, K, L, h ve  $\Delta$  parametreleri elde edilir [6].

$$H = J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + K \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 S_j^2 + L \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^2 S_j + S_i S_j^2) + h \sum_i S_i + \Delta \sum_i S_i^2 \quad (2.55)$$

$$J = (J_{11} + J_{22})/4 + J_{12}/2 \quad (2.56.a)$$

$$K = -(J_{11} + J_{22})/4 + J_{12}/2 - J_{13} - J_{23} + J_{33} \quad (2.56.b)$$

$$L = (J_{11} - J_{22})/4 + (J_{13} - J_{23})/2 \quad (2.56.c)$$

$$h = z(J_{23} - J_{13}) + \mu_2 - \mu_1 \quad (2.56.d)$$

$$\Delta = z(2J_{33} - J_{23} - J_{13}) - \mu_2 - \mu_1 + 2\mu_3 \quad (2.56.e)$$

z, bir atomun en-yakın komşu sayısıdır. Burada J: bilineer ; K: çift kutupar; L: tek kutup-çift kutup etkileşim parametresi, h: dış magnetik alan ve  $\Delta$  ise tek iyon anizotropi parametresidir. N ve  $\langle ij \rangle$  ise örgü nokta sayısı ve en yakın komşu çiftlerini ifade etmektedir.

L, tek kutup-çift kutup etkileşimi; üçüncü derece magnetik pertürbasyon [66], tek etkileşim [67] ya da karışık etkileşim [45] olarak da adlandırılır. L parametresi ilk olarak ikili ve üçlü akışkanların termodinamik özelliklerini, üçlü kritik noktalarını, yoğunlaşma ve faz ayrımını tarif etmek için Spin-1 Ising Blume Emery Griffiths (BEG) modele eklenerek kullanıldı [4]. Spin-1 Ising hamiltonyeninin çift kutup-dört kutup etkileşmesi içeren haliyle (III-V)<sub>1-x</sub>IV<sub>2x</sub> grubu üçlü alaşımların, üçlü kritik noktalarının ve kritik konsantrasyon değerinin(x) tespit edilmesinde yaygın olarak kullanılır. Grup IV atomunun zinc blende örgünün iki alt örgüsünü işgal etme ihtimaliyetinin aynı olduğu varsayıldığında L=0 alınır. Kritik konsantrasyon değeri ve (J, K, L) parametre değerleri; ortalama-alan teorisi ve deneysel sıkı bağlılık teorisi [6], Kikuchi yaklaşımı ve gerçek-kristal yaklaşımı [61], moleküler-alan teorisi [62], Kikuchi yaklaşımı [63], ikincil iyon kütlesi (SIMS) ve yüksek çözünürlüklü x-ray saçılması (HRXRD) [64], Monte Carlo [65] metodları ile teorik ve deneysel olarak hesaplanmıştır. (III-V)<sub>1-x</sub>IV<sub>2x</sub> grubu üçlü alaşımların kritik konsantrasyon değerinin hesap edilmesinde çeşitli yaklaşım modelleri de geliştirilmiştir. Bu modellerden bazıları tek kutup-çift kutup etkileşim parametresini 0 almıştır. Bu modellerden persolasyon teorisi [63] kritik konsantrasyonu  $x_c=0.572$ , Holloway-Davis modeli [65] ise  $x_c=0.65$  olarak hesap etmiştir. Tek kutup-çift kutup etkileşim parametresini sıfırdan farklı alan Davis-Holloway modeli ise  $x_c \sim 0.3$  olarak hesap etmiştir [65].

Örgü gazı hamiltonyeninin taban durumlarının incelendiği çalışmalarda L etkileşiminin “pozitif değerlerinin” tüm spinlerin “-1” olduğu ferromagnetik düzenlenimin tercih edilmesine neden olduğu görülmüştür [44, 45]. Üçlü yarı kararlı alaşımların incelendiği bir çalışmada ise L etkileşiminin dış alan gibi bir etki yaptığı iddia edilmiştir [6].

### Blume-Capel (BC) model

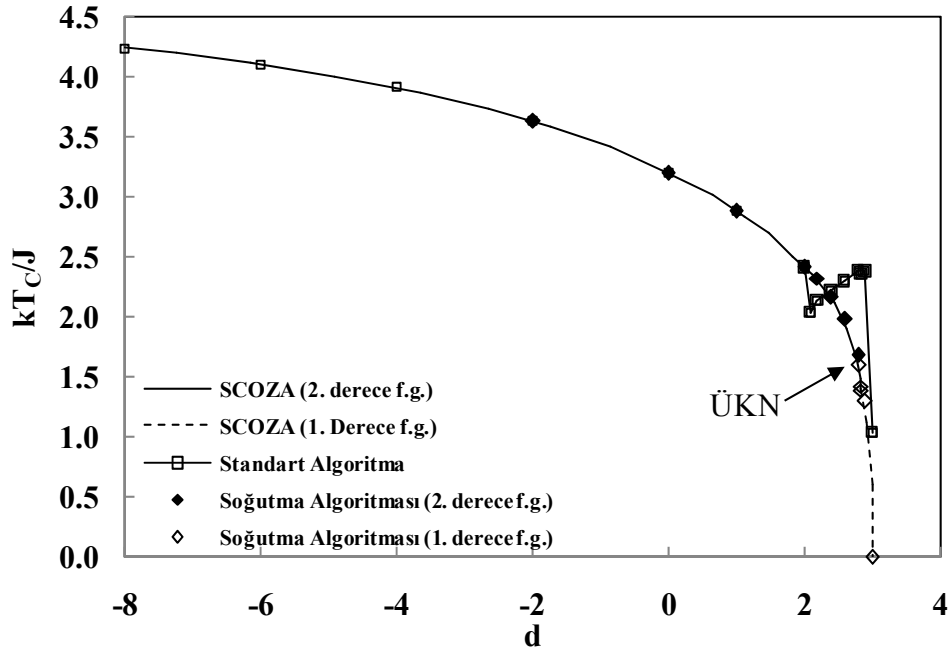
Spin-1 Ising model hamiltonyeni;  $K=L=0$  deęerleri için Blume Capel (BC) model hamiltonyenine indirgenmektedir.

$$H = J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + D \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 + h \sum_i S_i \quad (2.57)$$

Üç durumlu ve iki düzen parametrelili(M,Q) bir spin-1 Ising model olan BC model, magnetik faz geçiřleri [68, 69], yapısal geçiřler [70], seyreltilmiř Ising ferromagnetikleri [71] ve intercalated bileřikler [72] gibi çeřitli fiziksel durumlara uygulanmaktadır. İki ve üç boyutta tam çözümi bulunmayan BC model bugüne kadar sıkça farklı simülasyon ve yaklaşım metodları ile çalışılmıřtır. Modelin ayrıntılı analizleri; ortalama-alan yaklaşımı (MFA) [68, 69], etkin alan teorisi (EFT) [73, 74], Bethe-Peierls yaklaşımı [75,76], seri açılımı metodu [77, 78], kendinden oluřumlu Ornstein-Zernike yaklaşımı (SCOZA) [79,80], normalize edilmiř grup teorisi (RG) [81, 82], kümesel deęiřim metodu (CVM) [83, 84] gibi yaklaşım metodlarının yanı sıra, monte carlo metodu (MC) [85-87] ve cellular automaton (CA) [88, 89] gibi simülasyon teknikleri ile de yapılmıřtır.

BC model ( $kT_C/J$ ,  $d=D/J$ ) faz diyagramı üzerinde, ikinci derece faz geçiřinin birinci derece faz geçiřine dönuřtüęü, üçlü kritik noktaya sahiptir. Modelin iki boyutta sahip olduęu üçlü kritik nokta deęeri monte carlo yöntemi ile  $d=1,98$  [90], cellular automaton ile  $1.5 \leq d \leq 2$  aralıęında tahmin edilmiřtir [24]. İki boyutlu spin-1 Ising model için yapılan hesaplamalar algoritmanın ikinci derece faz geçiřlerini taklit etmekteki başarısını bir kez daha ortaya koymuřtur [25, 26]. BC modelin üç boyutta sahip olduęu üçlü kritik nokta seri açılım metodu ile  $d=2,82$  [77, 78], CVM ile  $d=2,817$  [83, 84], EFT ile  $d=2,82$ [73, 74], Bethe-Peierls yaklaşımı ile  $d=2,818$  [75, 76] ve Creutz algoritmasından türetilen soęutma algoritması kullanılarak Cellular Automaton hesaplaması ile  $d=2,82$  [88] olarak tahmin edilmiřtir.

Üç boyutlu BC model için Cellular Automaton ile hesaplamalar Creutz algoritmasını temel alan standart ve soğutma algoritmaları ile yapılmıştır. Standart algoritma ile yapılan hesaplamalarda BC modelin  $D/J=d=3$  parametresine kadar ikinci derece faz görülmüş, dolayısıyla üçlü kritik nokta  $d=3$  olarak tespit edilmiştir. Yarı kararlı durumları üretemeyen standart algoritma ile birinci derece ve ikinci derece faz geçişlerini ayırt edilememektedir [27-29]. Bu nedenle standart algoritmayı temel alan soğutma algoritması üretilmiştir. Soğutma algoritması ile yapılan hesaplamalarda üç boyutlu BC modelin, literatürle uyumlu olarak [73-78, 83, 84],  $d=2.82$ ' de üçlü kritik noktaya sahip olduğu ve  $2.82 \leq d \leq 3$  aralığında birinci derece faz geçişi sergilediği



Şekil 2.13. 3 - boyutlu Blume Capel modelin Creutz Cellular Automaton algoritmasından türetilen standart ve soğutma algoritmaları ile elde edilen  $(kT_C/J, d)$  faz diyagramı. Boş simgeler ve kesikli çizgiler birinci derece faz geçişini, dolu simgeler ve sürekli çizgiler ikinci derece faz geçişlerini işaret etmektedir. ÜKN: Üçlü kritik nokta

görülmüştür. Bu sonuç soğutma algoritmasının birinci derece faz geçişlerini taklit etmekte başarılı olduğunu göstermiştir. Şekil 2.13' te üç-boyutlu Blume Capel modelin standart ve soğutma algoritmaları ile elde edilen sıcaklık değerleri ile elde edilen  $(kT_C/J, D/J=d)$  faz diyagramı [28], kendinden oluşumlu Ornstein-Zernike yaklaşımı (SCOZA) [79,80] sonuçları ile karşılaştırılarak verilmiştir. Soğutma

algoritması ile tespit edilen ikinci derece faz geçişinin birinci derece faz geçişine değiştiği üçlü kritik nokta (ÜKN) Şekil 2.13' ün üzerinde ok ile gösterilmiştir.

### Blume-Emery-Griffiths (BEG) model

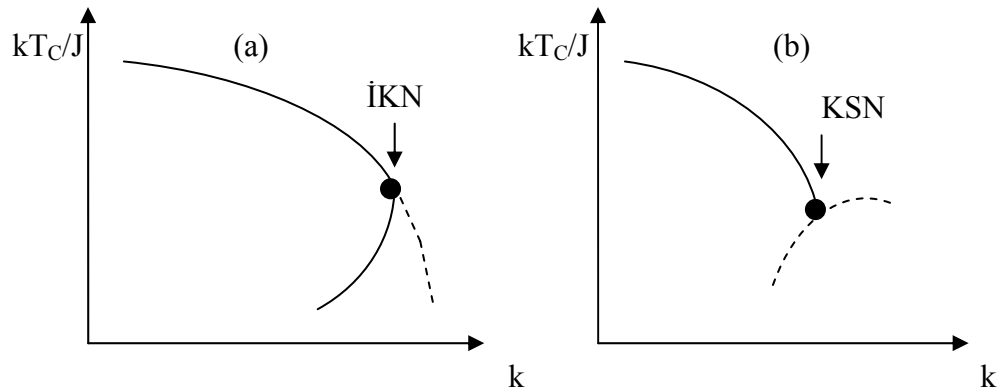
Blume-Emery-Griffiths (BEG) model hamiltonyeni, spin-1 Ising model hamiltonyeninde  $L=h=0$  olduğu duruma karşılık gelir.

$$H = J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + K \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 S_j^2 + D \sum_i S_i^2 \quad (2.58)$$

Model  $k \geq 0$  için, ortalama alan yaklaşımı [2-5], transfer matrix metodu [91], pozisyon-uzay normalize edilmiş grup teorisi [92], sabit çiftlenim yaklaşımı [93], lineer-zincir yaklaşımı [94], kümelenme değişim metodu (CVM) [95] gibi yaklaşım yöntemleri ve seri açılım metodunun [77] yanı sıra, Monte Carlo metodu [96] ve cellular automaton (CA) [30] gibi simülasyon teknikleri ile de incelenmiştir.  $k < 0$  için ise BEG model, yaklaşım yöntemleri olarak ortalama alan yaklaşımı (MFA) [31], normalize edilmiş grup teorisi [34, 97], kümelenme değişim metodu (CVM) [9-98-100], Monte Carlo normalize edilmiş grup teorisi (MCRG) [32], iki-parçacık kümelenme yaklaşımı (TPCA) [33], Bethe yaklaşımı [101] ile ve simülasyon tekniği olarak Monte Carlo metodu (MC) [97, 101-103], ve Cellular Automaton (CA) [105] ile incelendi. Yapılan çalışmalar BEG modelin sahip olduğu; taban durumları, farklı faz geçiş türleri ve çoklu kritik noktalar içeren, zengin faz diyagramını gözler önüne sermiştir. Ortalama alan yaklaşımı (MFA) [2, 68, 69], EFT [B6,B7], Bethe-Peierls yaklaşımı [75, 76], seri açılımı metodu [77, 78], SCOZA yaklaşımı [B12,B13], RG teorisi [32, 34, 81, 82], CVM [9, 83, 84], MC [19, 85-87] ve CA [69, 88, 89, 104] gibi metodlarla elde edilen faz diyagramlarında BEG modelin sahip olduğu çoklu kritik noktalar görülmüştür. Bununla beraber elde edilen sonuçlar arasında farklılıklar göze çarpmaktadır. RG teorisi [34] ve MFA sonuçları [31] BEG modelin  $(kT_C/zJ, D/J=d)$  faz diyagramı üzerinde  $K/J=k=-0.5$  parametresinde kritik son noktaya sahip olduğunu tahmin etmiştir. Fakat CVM [9], MCRG teorisi [32], TPCA [33] ve CA [30, 105] aynı faz diyagramı üzerinde  $k=-0.5$  parametresinde kritik son

nokta yerine üçlü kritik nokta elde tespit etmiştir. Diğer taraftan Cellular Automaton [105] fcc BEG model için  $(kT_C/zJ, d)$  faz diyagramı üzerinde  $k=0.9$  parametresi için yapılan hesaplamalarda kritik son nokta tespit etmiştir. Bu sonuç BEG modelin faz uzayında kritik son noktanın var olduğunu, fakat bu noktanın RG [34] teorisi ve MFA [31] sonuçlarının belirttiği gibi  $k=-0.5$ ' te değil  $k=-0.9$ ' da olduğunu göstermiştir. Bu farklılığın nedeni RG teorisi ve MFA sonuçlarının yaklaşım içermesi, CA' nın ise olası konfigürasyonları üretmesidir. CA ile yapılan çalışmada üçlü kritik nokta ve kritik son noktanın yanı sıra ikili kritik noktalar da elde edilmiştir [105]. Böylece farklı faz geçiş türleri ve çoklu kritik noktalara sahip BEG modelin faz uzayının zenginliği bir kez daha ortaya konulmuştur.

Çoklu kritik noktalardan biri olan üçlü kritik nokta BC modelde de bahsedildiği gibi ikinci derece faz geçişinin birinci derece faz geçişine dönüştüğü noktadır. İkili kritik nokta, iki tane birinci derece faz geçişi çizgisinin ikinci derece faz geçişi çizgisi ile

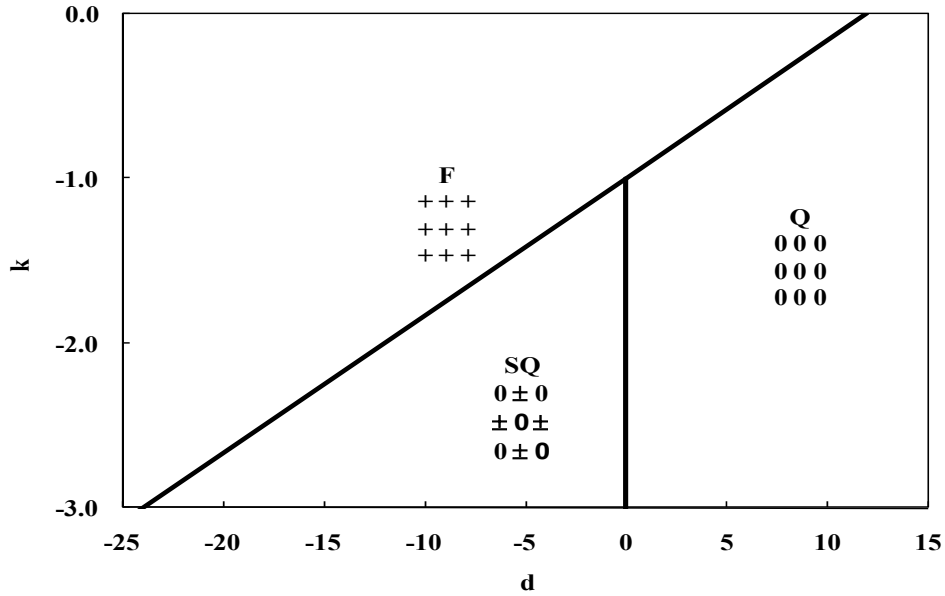


Şekil 2.14. a) Kritik son nokta (KSN) ve b) ikili kritik noktanın (İKN) görünümü. Sürekli çizgiler ikinci derece faz geçiş çizgisi, kesikli çizgiler birinci derece faz geçiş çizgisidir

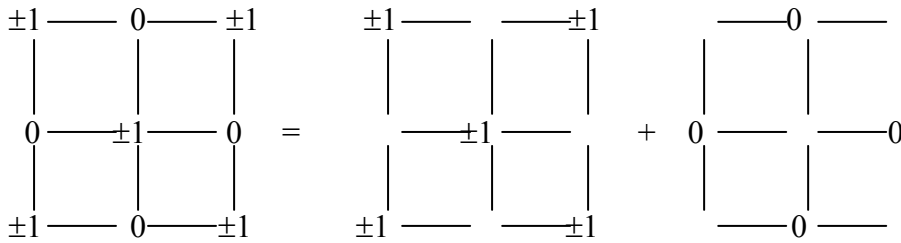
birleşmesiyle meydana gelir. İkinci derece faz geçiş çizgisinin birinci derece faz geçiş çizgisi üzerinde sonlandığı nokta ise kritik son noktadır (Şekil 2.14).

Şekil 2.15' de BEG model için taban durum faz diyagramı görülmektedir. BEG model; ferromanyetik (FM), karışık dört kutuplu (SQ) ve sıfır düzen (Q) olmak üzere üç taban duruma sahiptir. Ferromanyetik düzende (F) tüm spinler +1 ya da -1 yönelimde iken sıfır düzende (Q) tüm spinler 0' dır. Karışık dört kutuplu düzeni; biri

tamamen  $\pm 1$  spinlerle diğeri tamamen 0 spinlerle dolu iki örgünün iç içe geçmiş hali şeklinde düşünmek mümkündür (Şekil 2.16).



Şekil 2.15. fcc BEG model için k-d faz diyagramı. F: Ferromanyetik bölge, Q: Sıfır düzenli bölge, SQ: Karışık dört kutuplu bölgedir



Şekil 2.16. Kare örgüde karışık dört kutuplu (SQ) taban durumun genel görünümü

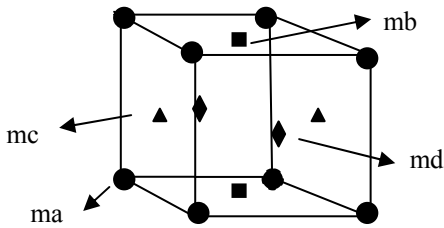
Yüz merkezli kübik (fcc) örgü üzerinde kümesel değişim metodu (CVM) ile incelenen BEG modelde karışık dört kutuplu faz (SQ) bölgesinin, Cu-Au tipi ikili alaşımlarda da görülen;  $A_3B$ ,  $AB$  ve  $AB_3$  düzenlenimlere sahip üç alt bölgeye ayrıldığı görülmüştür [9]. Bir sonraki bölümde bu düzenlenimler hakkında bilgi verilmektedir.

### Cu-Au Tipi İkili Alaşımlarda Ortaya Çıkan Düzenli Fazlar

Cu-Au tipi ikili alaşımlar sahip oldukları düzenli fazlar ( $A_3B$ , AB ve  $AB_3$ ), malzeme bilimi için teknolojik uygunlukları nedeniyle uzun yıllardan beri ilgi odağı olmaktadır. Fcc yapıdaki Cu-Au tipi ikili alaşımlar için fazlar ve faz diyagramları antiferromanyetik etkileşim için ; Monte Carlo [8, 35, 36, 38, 40-42], kümesel değişim [37, 39, 8, 9], ortalama alan yaklaşımı [43] ile ve ferromanyetik etkileşim için CVM [9] ile elde edilmiştir. Bu tip ikili alaşımlar spin-1/2 Ising model [35-43] ve BEG model [8,9] ile modellenenbilmektedir.

$Cu \rightarrow A$  ve  $Au \rightarrow B$  olmak üzere; spin-1/2 Ising modelde  $S_i = +1$  A atomunu,  $S_i = -1$  ise B atomunu temsil etmektedir. BEG modelde ise  $S_i = 0$  A atomunu,  $S_i = \pm 1$  ise B atomunu temsil etmektedir.

En-yakın komşu sayısının büyük olduğu ( $z=12$ ) fcc örgü iç içe geçmiş dört basit küp alt örgüye bölünmektedir. Böylece fcc örgüde spin-1/2 ve spin-1 Ising modelleri kurmak mümkün olmaktadır (Şekil 2.17).



Şekil 2.17. fcc örgüyü oluşturan dört alt örgünün yeri. Daire ma alt örgüsünün, üçgen mb alt örgüsünün, elmas mc alt örgüsünün, kare md alt örgüsünün yerine işaret etmektedir

BEG model ile incelenen Cu-Au tipi ikili alaşımlarda görülen;  $A_3B$ , AB ve  $AB_3$  yapıları Çizelge 2.3' te görülmektedir. Cu-Au tipi ikili alaşımlarda görülen düzenlerden  $A_3B$ ' de, " $\pm 1$ " ile etiketlenen atomlar kübün köşelerinde, "0" ile etiketlenen atomlar yüz merkezlerinde bulunmaktadır.  $A_3B$  tipi ikili alaşımlarda iki tip faz ortaya çıkmaktadır. Bu fazlar alt örgü momentlerinin;  $ma=mb=mc=md=0$ ,

$q_b=q_c=q_d<q_a$  olduğu paramanyetik faz ve  $=m_b=m_c=m_d<m_a$ ,  $q_b=q_c=q_d<q_a$  olduğu ferrimanyetik fazdır. AB yapıları ikili alaşımlarda ferrimanyetik ( $m_a=m_d>m_b=m_c$ ,  $q_a=q_d>q_b=q_c$ ) faz ortaya çıkmaktadır.  $AB_3$  yapı ise alt örgü momentlerinin  $m_b=m_c=m_d>m_a$ ,  $q_b=q_c=q_d>q_a$  şeklinde düzenlendiği ferrimanyetik fazı sergilemektedir.

Çizelge 2.3. fcc örgüde Cu-Au tipi ikili alaşımların karışık dört kutuplu bölgede taban durumları [9, 39]

|  |   |   |  |
|--|---|---|--|
| <p>○ A → 0<br/>● B → ±1</p>                          |   |   |  |
| <b>Bravais Örgü</b>                                  | Kübik   | Tetragonal  | Kübik  |
| <b>Yapı</b>  | $L1_2$  | $L1_0$  | $L1_2$   |
| <b>Atomik pozisyon</b>                               | A at $(0 \frac{1}{2} \frac{1}{2})$<br>B at $(0 0 0)$  | 3A at $\begin{cases} (\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}) \\ (0 \frac{1}{2} 0) \\ (\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0) \end{cases}$<br>B at $(0 0 0)$ | A at $(1 1 1)$<br>B at $(0 0 0)$   |
| <b>Cu-Au tipi ikili alaşımlarda görülen düzenler</b> | $(A_3B)$<br><i>Paramanyetik</i><br>$m_a=m_b=m_c=m_d=0$<br>$q_b=q_c=q_d<q_a$<br><i>Ferrimanyetik</i><br>$0=m_b=m_c=m_d<m_a$<br>$q_b=q_c=q_d<q_a$ | $(AB)$<br><i>Ferrimanyetik</i><br>$m_a=m_d>m_b=m_c$<br>$q_a=q_d>q_b=q_c$  | $(AB_3)$<br><i>Ferrimanyetik</i><br>$m_b=m_c=m_d>m_a$<br>$q_b=q_c=q_d>q_a$ |

Cu-Au tipi ikili alaşımlar için yapılan çalışmaların odaklandığı noktalardan birisi de düzensizlik-düzen faz geçişlerinin derecesidir. Hamiltonyeninde sadece en yakın komşu etkileşme terimi olan çalışmalarda elde edilen düzensizlik-düzen faz geçişleri birinci derecedir [9, 36, 40, 43]. En yakın komşu etkileşmeli BEG modelin CVM ve MC metodlarıyla incelendiği bir çalışmada ise P-AB faz geçişlerinin ikinci derece diğer düzensizlik-düzen faz geçişlerinin birinci derece olduğu rapor edilmiştir [8]. En yakın ve ikinci derece en yakın komşu etkileşmelerinin dikkate alındığı çalışmalarda ikinci derece en yakın komşu etkileşme teriminin; küçük değerlerinde (P-AB) faz

geçişinin birinci derece, büyük değerlerinde ikinci derece olduğu görülmüştür [35, 42]. Çoklu atom etkileşimi içeren çalışmalar ise faz geçişlerini birinci derece olarak elde etmiştir [39, 40]. Yapılan deneysel çalışmalarda; x-ışını fotoemisyonu ile band spektrumu [106], x-ışının saçılmasıyla yüzey düzensizlikleri [107], nükleer manyetik rezonans ile mikroyapısal gelişimi [108] incelenmiştir.

### 3 . MODEL

#### 3.1. Cellular Automaton

Cellular Automaton başlangıçta kendiliğinden çoğalabilen biyolojik sistemleri modellemek amacıyla Neumann ve Ulam tarafından “cellular spaces” adı altında ortaya atıldı [109, 110]. 1970 yılından itibaren John Conway’ in hayat oyunu [111] ile hızlanan cellular automaton çalışmaları 1980’ li yıllardan itibaren fiziksel sistemlere uygulanmaya başlamıştır.

Cellular Automaton (CA)’ da uzay ve zaman kesikli değerlere sahiptir ve sonsuza kadar genişletilebilen düzenli bir hücre örgüsünden meydana gelir. Bölgesel iç etkileşmeye sahip çok sayıda farklı eleman içeren fiziksel sistemler “ CA “ olarak modellenmiştir. Diferansiyel bir denklemleri sağlayan herhangi bir fiziksel sisteme, kesikli değişkenler ve sonlu farklar kullanılarak “ CA “ gibi yaklaşılabılır. Genellikle CA örgüsü konum uzayındadır. Mikroskobik düzeyde her bir konum kristal örgüdeki kuantize ölçülebilirler ( spin bileşeni gibi ) ya da atom tiplerine karşılık gelen noktalardır. Makroskobik düzeyde bir “ CA “ da her hücre birçok molekül ihtiva eden bir bölgeyi temsil edebilir ve hücrenin değeri birkaç mümkün farklı faza karşılık gelebilir. Ising model ve diğer fiziksel modellerin CA olarak simülasyonu Vichniac tarafından önerilmiş, iki-boyutlu kare örgüler için birçok CA kuralı komşuluktaki hücre sayısına ve konuma bağlı olarak isimlendirilmiştir [15].

Fiziksel bir sistem için “ CA ” ile bir model oluşturulurken aşağıdaki şartlar yerine getirilmelidir.

- i ) Sistemin yapısına uygun düzenli bir örgü (iki boyutta; kare, üçgen, bal peteği vb..., üç boyutta; kübik, vb...) seçilir.
- ii ) Örgüyü oluştururken hücrelerin sahip olabileceği hallere karşılık gelen değişken ya da değişkenler belirlenir.
- iii ) Hücrelerin birbirleriyle etkileşme şeklini ve gelişimini sağlayan bölgesel bir kural tanımlanır.

Bir “ CA ” hali hücre değişkenlerinin değerleri ile belirlenmektedir. “ CA ” kesikli zaman adımlarında gelişir ve gelişim esnasında bir hücre değişkeninin değeri bölgesel bir kural yardımıyla bir önceki zaman adımında ona komşu hücrelerdeki değişkenlerin değerlerine bağlı olarak oluşmaktadır. Bu bölgesel kural tüm hücrelere eş zamanlı olarak uygulanmaktadır.

Vichniac’ ın Ising model için önerdiği kural Pomeau ve Hermann tarafından Q2R Cellular automaton olarak geliştirilmiştir [17, 112]. Q2R algoritmasında hamiltonyen sadece spin-spin etkileşim enerjisinden oluşmaktadır. İç enerji simülasyon boyunca korunduğu için iç enerji dalgalanmalarından elde edilen özısıyı hesap etmek mümkün olmamaktaydı. Bu kısıtlama Creutz Cellular automaton (CCA) ile ortadan kaldırılabildi [19]. Creutz Ising modelde iç enerji ile spine eşlik eden momentuma karşılık gelen kinetik enerjinin toplamı korunur. Böylece Creutz algoritması kullanılarak üretilen konfigürasyonlardan iç enerjiye bağlı termodinamik nicelikleri hesaplamak mümkün olmaktadır. Üstelik bu algoritma yaygın MC metodlarından on kat daha hızlı çalışmakta ve yüksek kalitede rastgele sayı üreticine gereksinim duymamaktadır.

CCA algoritması kullanılarak dış manyetik alan yokluğunda iki ve üç boyutlu Ising modelde yapılan hesaplamalar algoritmanın Ising modelin simülasyonunda oldukça başarılı olduğunu göstermiştir [22]. Bu algoritmadan türetilen çeşitli algoritmalar dış alan [23], ikinci derece en yakın komşu etkileşme ve dört spin etkileşim terimleri içeren Ising model problemlerine uygulanmış ve literatürle uyumlu sonuçlar elde edilmiştir [21, 113]. İki boyutlu Blume-Capel (BC) model için Creutz algoritmasından geliştirilen bir Cellular automaton algoritması ile modelin davranışı test edilmiş ve evrensel Ising model sınıfına dahil olduğu görülmüştür [24]. 2-boyutlu spin-1 Ising model için yapılan hesaplamalar algoritmanın ikinci derece faz geçişlerini taklit etmekteki başarısını tekrarlamıştır [25, 26]. 3-boyutlu BC model için yapılan hesaplamalar algoritmanın, modelin sahip olduğu birinci derece faz geçişlerini, dolayısıyla da üçlü kritik noktayı tespit edemediğini göstermiştir. Bu nedenle CCA’ ı temel alan yeni bir algoritma olan “soğutma algoritması” türetilmiştir [27-29]. 3-boyutlu Blume Emery Griffiths (BEG) model için yapılan

hesaplamlarda modelin sergilediği çift tekrarlayan faz geçişlerinin düşük sıcaklık bölgesindeki kısmını kolayca elde etmek için soğutma algoritması ile aynı mantık çerçevesinde “ısıtma algoritması” geliştirilmiştir [30].

## 3.2. Cellular Automaton Algoritmaları

### 3.2.1. Standart algoritma

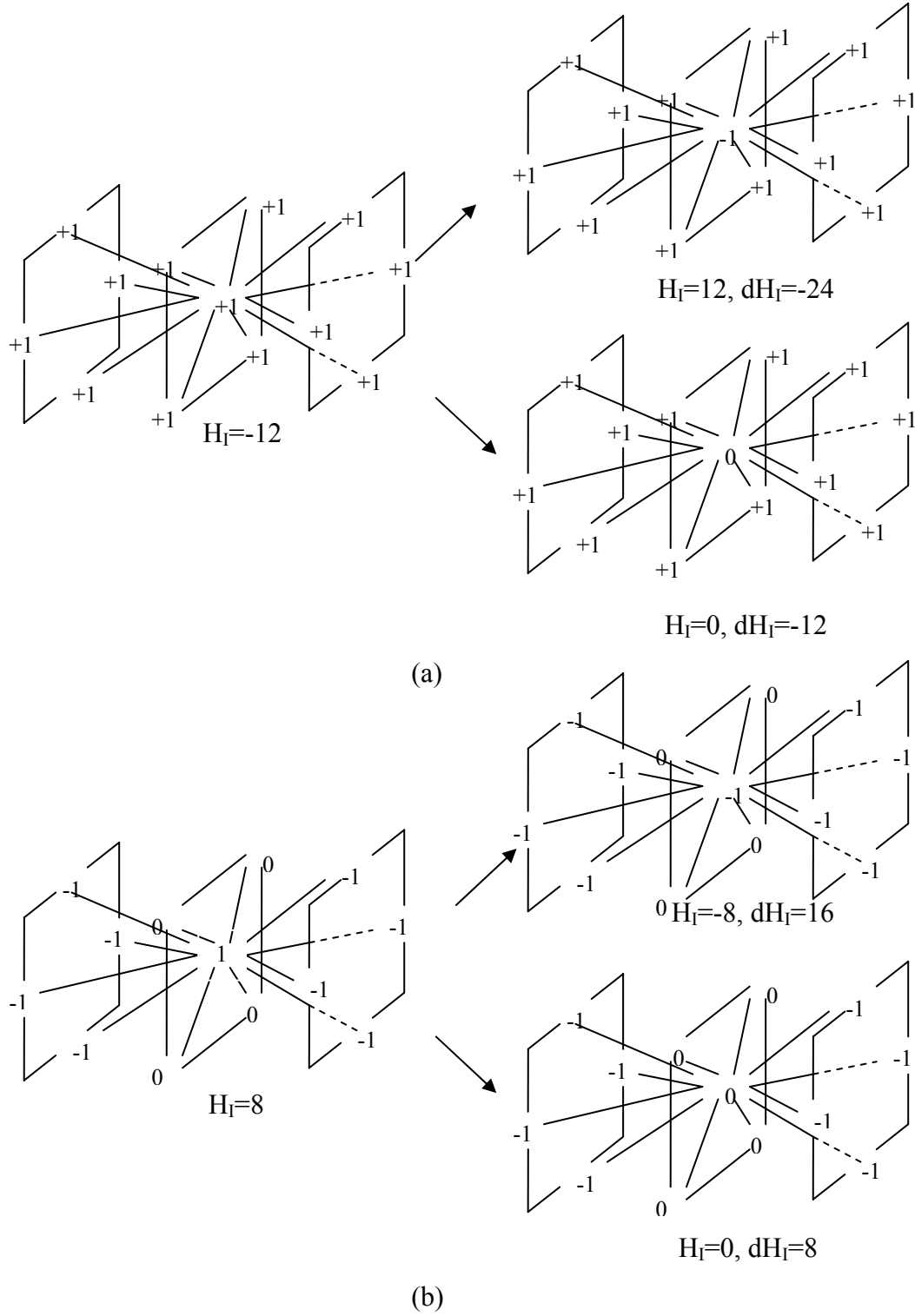
Bu algoritmada örgünün her bir hücresinde üç değişken bulunmaktadır. Bu değişkenler; Ising spin değişkeni, spine eşlik eden momentum ve paritedir. Her bir hücredeki bu değişkenlerin değerleri, kendi değişkenleri ve en-yakın komşuların değişkenlerinden bir cellular automaton kuralı ile belirlenir. Her bir hücreye atanan değişkenlerden ilki  $B_i$  Ising spinidir.  $B_i = 0, 1, 2$  değerlerini alır.  $S_i = B_i - 1$  olmak üzere en-yakın etkileşmeli BEG model için Ising spin enerjisi

$$H = K \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 S_j^2 + J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + D \sum_i S_i^2 + L \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^2 S_j + S_i S_j^2) \quad (3.1)$$

ile ifade edilir. İkinci değişken spine eşlik eden momentum değişkenidir. Momentuma karşılık gelen kinetik enerji  $H_k$ ,  $(0, m)$  aralığında herhangi bir spin değişimi için Ising enerjideki değişime eşit olan tamsayı değerler almaktadır. Toplam enerji ise

$$H = H_I + H_K \quad (3.2)$$

olmak üzere tüm zaman adımlarında korunur. Algoritmanın ilk adımı en düşük iç enerjili (Ising enerjisi) durumun taban durumu olarak tanımlanması ve başlangıç konfigürasyonu olarak alınmasıdır. İkinci adımda algoritma spin değişimine karar vermektedir. Bu aşamada spin konfigürasyonunun  $t$  zamanındaki  $H_t'$  Ising enerjisi



Şekil 3.1.  $J=-1, K=D=L=0$  parametre seti için taban durum konfigürasyonunun tespiti ve iç enerjideki değişim,  $dH_I$

hesaplanır. Değeri değiştirilecek hücrenin spini  $\frac{1}{2}$  olasılıkla diğer iki halden birine çevrilir ve t+1 zamanında  $H_I^{t+1}$  Ising enerjisi elde edilir. Daha sonra Ising enerjisindeki değişim,  $dH_I$ , hesaplanır. Ising enerjisindeki değişim bu hücrelerin momentum değişkenine aktarılabilir veya momentum değişkeninden alınabilecek bir değer ise ve toplam enerji korunuyorsa spin ters çevrilir ve yeni konfigürasyon kabul edilmiş olur. Buna uygun olarak momentum değiştirilir. Aksi halde spin ve momentum değiştirilmez. Bu işlem örgüdeki bütün siyah hücrelere aynı zaman adımında uygulanmaktadır. Aşağıdaki eşitliklerde Ising enerji değişiminin,  $dH_I$ , hesaplanması görülmektedir.

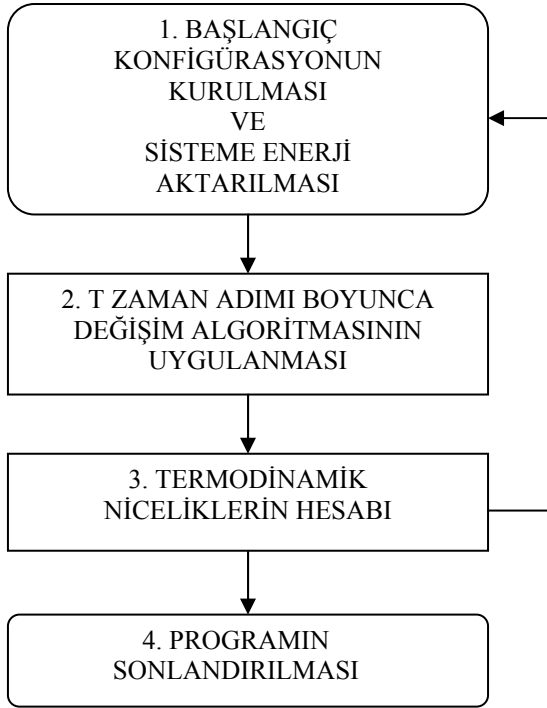
$$H_T^t = H_T^{t+1} \quad (3.3)$$

$$H_I^t + H_K^t = H_I^{t+1} + H_K^{t+1} \quad (3.4)$$

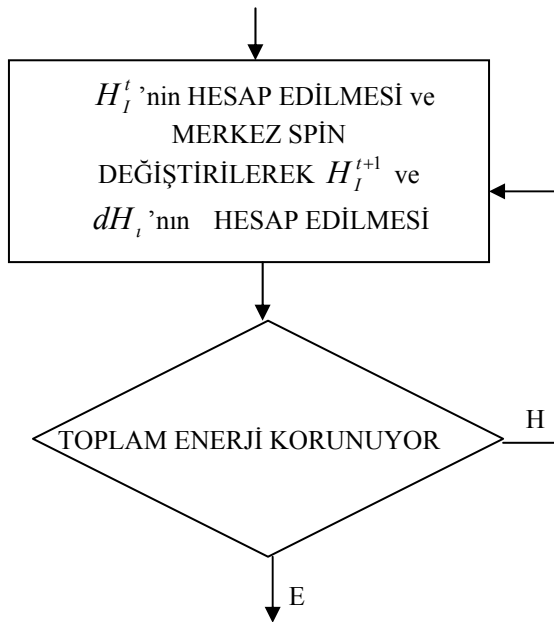
$$H_K^{t+1} = H_I^t - H_I^{t+1} + H_K^t \quad (3.5)$$

$$H_K^{t+1} = H_K^t + dH_I \quad (3.6)$$

Şekil 3.1.' de Ising enerjisindeki değişime göre kabul görmüş yeni konfigürasyonlar görülmektedir. Spinlerin tümünün +1 olduğu ferromanyetik taban durumunda merkez spinin -1' e dönebilmesi için 12 birim, 0' a dönebilmesi için 24 birim enerji alması gerektiği görülmektedir ( $dH_I < 0$ ) (Şekil 3.1.a). Şekil 3.1.b' de ise spin sisteminin, merkez spinin -1' e dönebilmesi için 16 birim, 0' a dönebilmesi için 8 birim enerjiyi dışarı vermesi gerekmektedir ( $dH_I > 0$ ). Üçüncü bit parite bittir. CA' nın zamanla dama tahtası üzerinde gelişimini sağlamakta, böylece Ising modelin " CA " ile simülasyonunu mümkün kılmaktadır. Şekil 3.2' de tüm algoritma bir akış çizelgesi ile özetlenmiştir. Kutucuklar algoritmada takip edilen adımlarla etiketlenmiştir. Buraya kadarki değişim algoritması T zaman adımı boyunca uygulanmaktadır (Şekil 3.3).



Şekil 3.2. Standart algoritmanın akış çizelgesi



Şekil 3.3. Değişim algoritmasının akış çizelgesi

Üçüncü adımda verilen bir toplam enerji değeri için sistemin sıcaklığı aşağıdaki şekilde tanımlanan kinetik enerji ortalama değerlerinden elde edilir.

$$\langle E_i \rangle = \frac{\sum_{n=0}^3 n e^{-4n\beta}}{\sum_{n=0}^3 e^{-4n\beta}} \quad (3.7)$$

Termodinamik niceliklerin spin başına ve zaman adımı başına ortalama değerleri

$$M = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i \quad (3.8)$$

$$H = K \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 S_j^2 + J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + D \sum_i S_i^2 + L \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^2 S_j + S_i S_j^2) \quad (3.9)$$

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial h} = (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) / kT \quad (3.10)$$

$$C = \partial H_i / \partial T = N(\langle H_i^2 \rangle - \langle H_i \rangle^2) / (kT)^2 \quad (3.11)$$

$$U_L = 1 - \langle M^4 \rangle / (3 \langle M^2 \rangle^2) \quad (3.12)$$

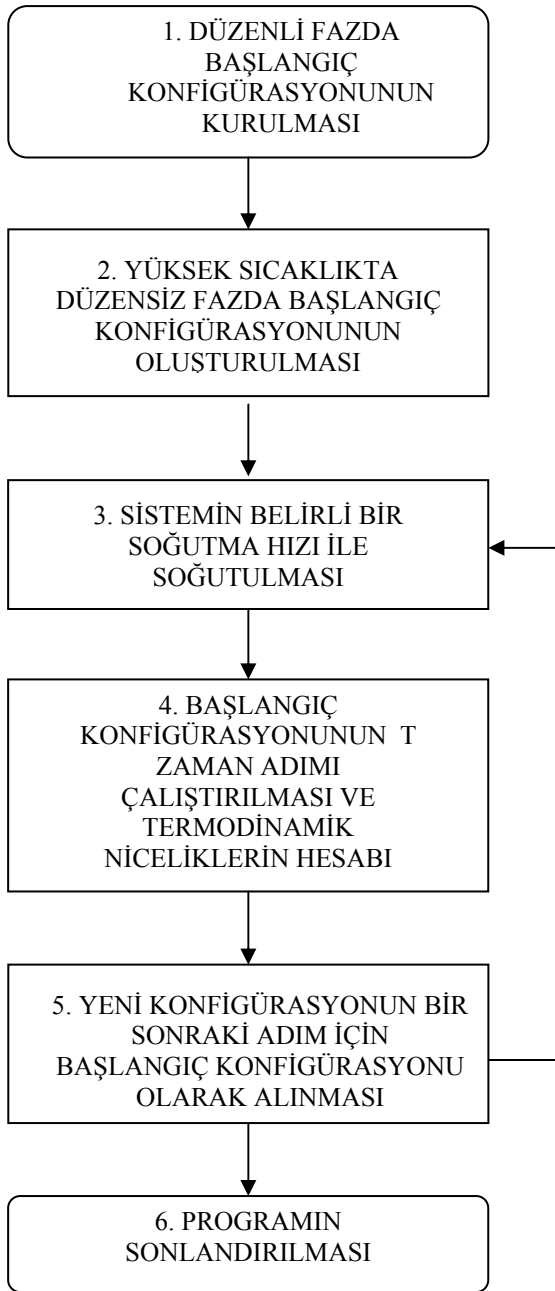
şeklinde elde edilir. Alınganlık ve öz ısı ise manyetizasyon ve iç enerjideki dalgalanmalardan elde edilmektedir. Termodinamik niceliklerin zaman ortalamaları ise

$$\langle a \rangle = \frac{1}{t} \sum_{i=1}^t a(t) \quad (3.13)$$

İle hesap edilir.

### 3.2.2. Soğutma algoritması

Soğutma algoritması, başlangıç prosedürü ve ölçümlerin alınması olmak üzere iki temel bölümden oluşmaktadır. Başlangıç prosedüründe, ilk olarak örgü üzerindeki spinler modelin mutlak sıfırda sahip olduğu taban durumda alınır. İkinci adımda göz başına düşen kinetik enerji, her spin dönmesi için gerekli Ising spin enerjisindeki maximum değişime eşit alınarak, ikinci değişken yoluyla, sisteme verilir. Bu



Şekil 3.4. Soğutma algoritmasının akış çizelgesi

konfigürasyon 20000 CA (Cellular Automaton) adımı için çalıştırılır. Böylece başlangıç prosedürü tamamlanır. Soğutma işleminin ilk adımında, düzensiz yapıdaki son konfigürasyon soğutma işlemi için başlangıç konfigürasyonu olarak alınır. Soğutma işlemi boyunca enerji spin sisteminden ikinci değişken (demon) yardımıyla alınır ve T zaman adımı boyunca çalıştırılır. Demon tarafından  $H_k$  kinetik enerjili hücreden alınan enerji miktarı (soğutma hızı x  $H_k$ ) kadardır. Her toplam enerjiye

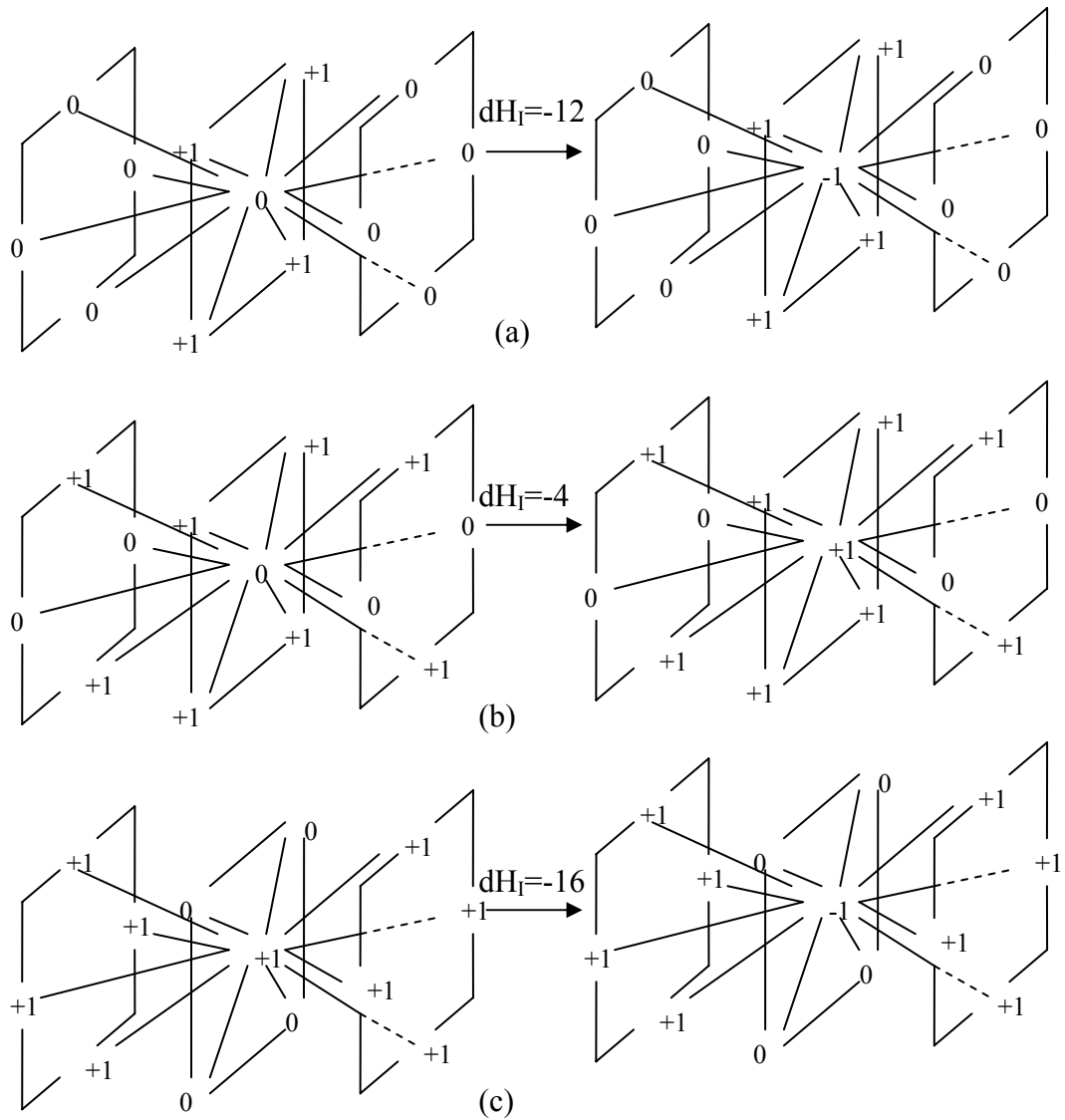
karşılık gelen sonuç konfigürasyon bir sonraki için başlangıç teşkil eder. Şekil 3.4' te tüm algoritma bir akış çizelgesi ile özetlenmiştir. “4” ile etiketlenen kutucukta Şekil 3.3'te görülen değişim algoritması uygulanmaktadır.

İki boyutlu Blume Capel (BC) modelin cellular automaton ile incelenebilmesi için Creutz Cellular Automaton algoritmasından standart algoritma türetilmiştir. Standart algoritma  $0 \leq D/J \leq 1.5$  aralığında ikinci derece faz geçişi gösterirken  $D/J=2$ ' de birinci derece faz geçişi sergilemiş, modeli sahip olduğu üçlü kritik nokta  $1.5 < D/J < 2$  aralığında tahmin edilmiştir [102]. Bu tahmin üçlü kritik noktayı  $D/J=1.98$  olarak tahmin eden MC hesaplamaları ile uyumludur [90]. 2-boyutlu spin-1 Ising model için yapılan hesaplamalar algoritmanın ikinci derece faz geçişlerini taklit etmekteki başarısını bir kez daha ortaya koymuştur [25, 26]. Üç boyutlu Blume Capel için cellular automaton ile yapılan hesaplamalar ise standart algoritmanın yarı kararlı durumları üretememesinden dolayı modelin  $D/J=3$ ' e kadar birinci derece faz geçişlerini ikinci derece faz geçişlerinden ayırt edemediği görülmüştür [27-29]. Bu nedenle standart algoritmayı temel alan soğutma algoritması türetilmiştir.

### 3.2.3. Isıtma algoritması

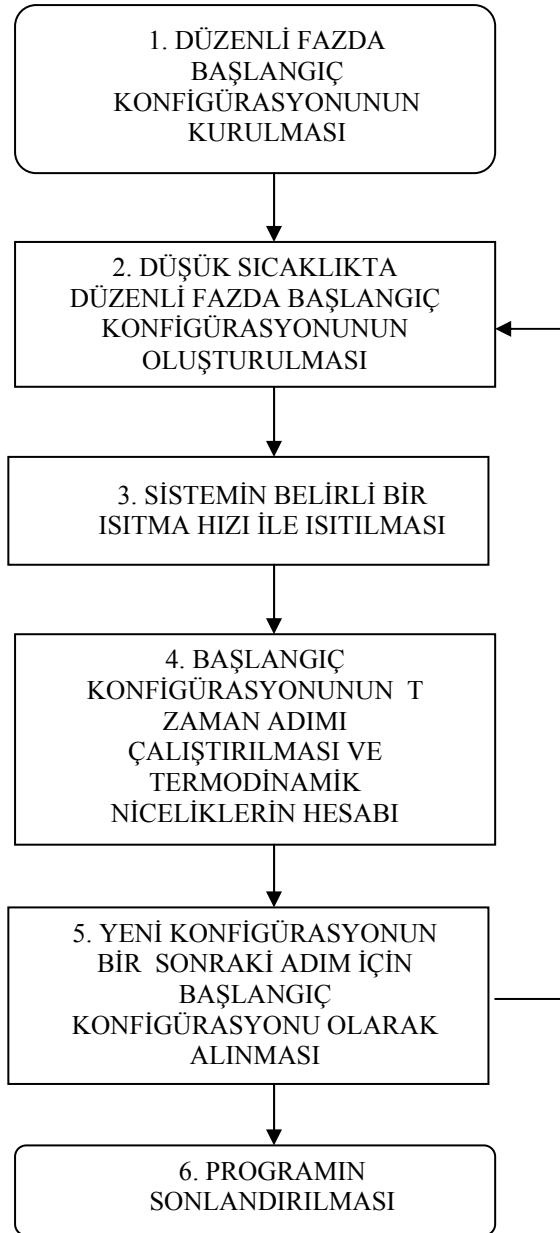
Çift tekrarlayan faz geçişlerinde düşük sıcaklık bölgesinde görülen faz geçişleirni kolayca elde edebilmek için soğutma algoritmasından türetilen ısıtma algoritması, başlangıç prosedürü ve ölçümlerin alınması olmak üzere iki temel bölümden oluşmaktadır. Başlangıç prosedüründe, ilk olarak örgü üzerindeki spinler modelin mutlak sıfırda sahip olduğu taban durumda alınır. İkinci adımda göz başına düşen kinetik enerji, örgü noktalarının bir kısmına ikinci değişken yoluyla rastgele dağıtılır. Bu konfigürasyon 20000 CA (cellular automaton) adımı için çalıştırılır ve düzenli yapıda bir konfigürasyon elde edilir. Üçüncü adımda, düzenli yapıdaki son konfigürasyon ısıtma işlemi için başlangıç konfigürasyonu olarak alınır ve Isıtma işlemi boyunca enerji spin sistemine ikinci değişken (demon) yardımıyla verilir. Demon tarafından  $H_k$  kinetik enerjili hücreye verilen enerji miktarı (ısıtma hızı  $\times H_k$ ) kadardır.  $t$  zaman adımı boyunca uygulanan ısıtma işleminin sonunda termodinamik nicelikler hesaplanır. Üçüncü değişkenden dolayı iki Cellular

Automaton adımı bir Monte Carlo adımına karşılık gelir. Bu çalışmada ısıtma hızı; ferromanyetik bölgede yapılan hesaplamalarda 0.08, SQ bölgede yapılan hesaplamalarda 0.05 alınmıştır. Isıtma hızlarının değerleri elde edilen sonuçlar referans alınan çalışmalarla uyumlu olacak şekilde seçilmiştir. Soğutma algoritmasında olduğu gibi her sonuç konfigürasyon bir sonraki için başlangıç konfigürasyonu teşkil eder.



Şekil 3.5. Taban durum konfigürasyonları ve spin değişimi; a)  $A_3B$  ( $d=-4$ ,  $k=-3$ ), b)  $AB$  ( $d=-12$ ,  $k=-3$ ), c)  $AB_3$  ( $d=-20$ ,  $k=-3$ )

Şekil 3.5' te; fcc BEG modelde;  $A_3B$ , AB ve  $AB_3$  yapılar için taban durum konfigürasyonları ve yüksek sıcaklıkta bir başlangıç konfigürasyonu oluşturmak için hücrelere aktarılan gerekli enerji miktarları görülmektedir. Cu-Au tipi ikili alaşımlara



Şekil 3.6. Isıtma algoritmasının akış çizelgesi

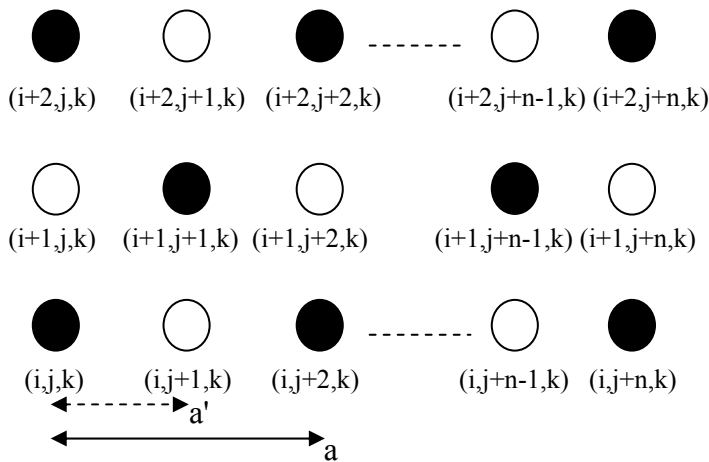
özgü bu yapıların görüldüğü bölgelerde başlangıç konfigürasyonunun doğru seçimi önemlidir. Örnek olarak, AB yapının görüldüğü bölgede başlangıç konfigürasyonu olarak  $A_3B$  alındığında sistem kısa sürede gerçekte bulunduğu yapıya dönmekte

fakat veriler AB taban durumu seçilerek yapılan hesaplama sonuçları kadar düzgün olmayıp dalgalanmakta ve kritik sıcaklık tespiti zorlaşmaktadır. Bu tespitler alt örgü düzen parametreleri takip edilerek yapılmaktadır. Taban durumun doğru seçilmesi kadar sisteme aktarılacak enerjinin seçimi de önemlidir. Örnek olarak, taban durumu aktarıldığında alt örgü düzen parametrelerinin beklenen davranışı göstermediği görülmüştür. Bu nedenle yapılan simülasyonlarda;  $A_3B$  taban durumlu bölgede “0”ın “-1”e, AB taban durumlu bölgede “0”ın “+1”e ve  $AB_3$  taban durumlu bölgede “+1”in “-1”e dönmesi için gerekli enerji verilmiştir. Şekil 3.6 ısıtma algoritmasını özetleyen akış çizelgesini göstermektedir. “4” ile etiketlenen kutucukta Şekil 3.3’te görülen değişim algoritması uygulanmaktadır.

### 3.3. fcc Örgüde Örgü Uzunluğu

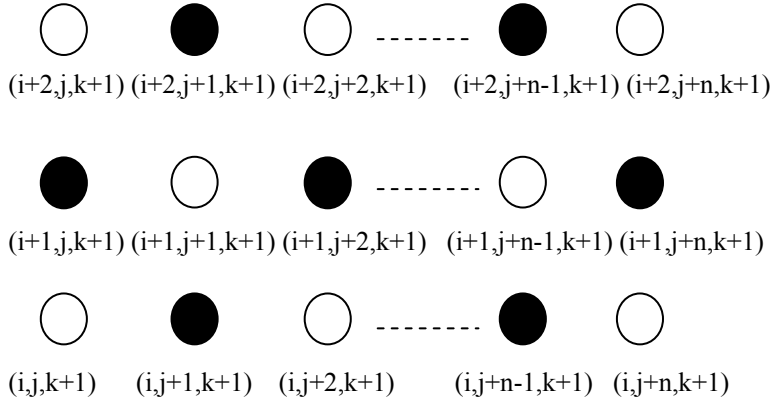
fcc örgünün basit kübik örgü üzerindeki tanımı Şekil 3.7 ve Şekil 3.8’ de görülmektedir. Basit kübik örgüde, örgünün periyodikliği nedeniyle, tekrarlayan iki örgü noktası arasındaki mesafe  $a$  iken fcc örgüde aynı mesafe  $a'=2a$  dır.

$L$  uzunluklu bir basit kübik örgüde nokta sayısı  $N=L^3$  iken fcc örgüde  $N=4L^3$  tür. Burada  $L=L'/2$  dir. Bu nedenle basit kübik örgüde  $L'= 8, 12, 16, 18$  ve  $24$  örgü uzunlukları fcc örgüde  $L= 4, 6, 8, 9, 12$  uzunluklarına karşılık gelir. Sonlu örgü



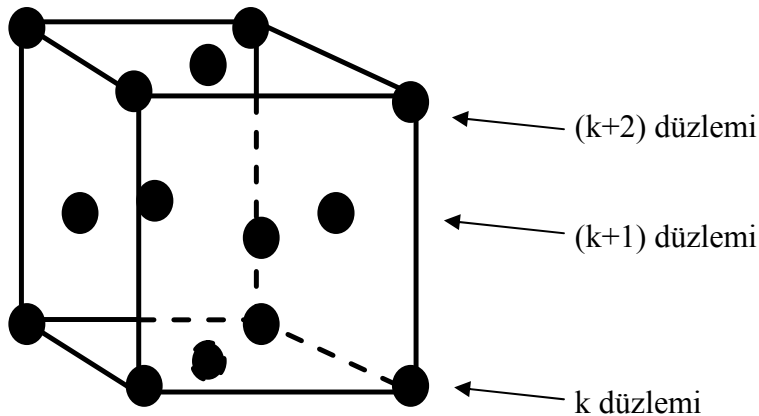
Şekil 3.7. Basit kübik örgü üzerinde fcc örgünün tanımlanması. Dolu daireler fcc örgü yerlerini, boş daireler fcc örgüde kullanılmayan basit kübik örgü yerlerini göstermektedir

ölçekleme analizinde de örgü boyutu olarak fcc örgü için tanımlanan uzunluklar (L) alındığında veriler ölçeklenmektedir. Simülasyon esnasında fcc örgü, sadece indisleri



Şekil 3.8. Basit kübik örgü üzerinde fcc örgünün  $k+1$ ' inci düzlemin tanımlanması. Dolu daireler fcc örgü yerlerini, boş daireler fcc örgüde kullanılmayan basit kübik örgü yerlerini göstermektedir

toplamı tek olan basit kübik örgü noktaları kullanılarak, kurulmaktadır. Örnek olarak  $(i, j, k)$  indis setinin  $(1, 1, 1)$ ;  $(1, 3, 1)$ ;  $(2, 2, 1)$ ;  $(3, 1, 1)$ ;  $(3, 3, 1)$ ;  $(2, 1, 2)$ ;  $(1, 2, 2)$ ,  $2, 3, 2$  ve  $(3, 2, 2)$  elemanları fcc örgü için tanımlı örgü noktalarıdır. Fcc örgüde düzlemler 2 indiste bir tekrar etmektedir (Şekil 3.9). Bu nedenle  $k$  inci düzlem (Şekil 3.7) ile  $k+1$  inci düzlemin (Şekil 3.8) görüntüsü birbirinden farklıdır.



Şekil 3.9. fcc örgünün genel görünümü

#### 4. BULGULAR VE TARTIŞMA

Bu tez çalışması kapsamında; ferromanyetik bilineer, dört kutup, çift kutup-dört kutup etkileşimli, tek iyon anizotropi terimli Blume-Emery-Griffiths (BEG) model yüz merkezli kübik örgü üzerinde Cellular Automaton ile incelendi. Simülasyon çalışmalarında, Creutz Cellular Automaton algoritmasını temel alan ısıtma algoritması kullanıldı. Hesaplamalarda tekrarlayan faz geçişlerinin düşük sıcaklıkta meydana gelen kısmını kolayca ortaya koyduğu için ısıtma algoritması tercih edildi.

Fcc BEG model sahip olduğu zengin faz diyagramları ve taban durumları, sergilediği faz geçiş türleri ile pek çok çalışmaya konu olmaktadır. Ortalama alan yaklaşımı (MFA) [2, 68, 69], EFT [73, 74], Bethe-Peierls yaklaşımı [75, 76], seri açılımı metodu [77, 78], SCOZA yaklaşımı [79, 80], RG teorisi [32, 34, 81, 82], CVM [9, 83, 84], MC [19, 85-87] ve CA [69, 88, 89, 104] gibi metodlarla elde edilen faz diyagramlarında BEG modelin sahip olduğu çoklu kritik noktaların tespitleri arasında farklılıklar göze çarpmaktadır. Fcc örgü üzerinde incelenen BEG model karışık dört kutuplu bölgede, basit kübik örgüde elde edilen sonuçlardan farklı olarak, Cu-Au tipi ikili alaşımlarda görülen taban durumlarına ( $A_3B$ ,  $AB$ ,  $AB_3$ ) sahiptir [8,9]. Diğer taraftan, çift kutup-dört kutup etkileşiminin (L) BEG model üzerindeki etkisi henüz çalışılmamıştır. Bu nedenlerle fcc BEG model' in sözü edilen bölgelerde Cellular Automaton ile çalışılması ihtiyacı duyulmuştur.

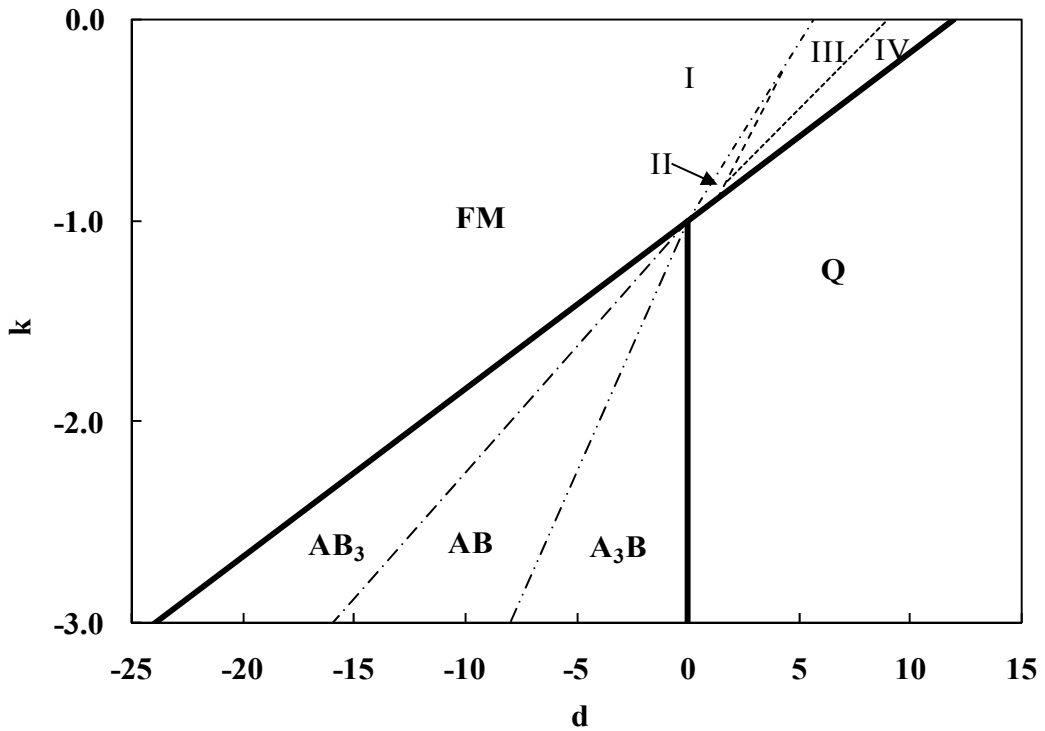
–  $3 < k \leq 0$  ve  $25 \leq d < 12$  aralığında yapılan hesaplamalar üç kısma ayrılmaktadır;

- i) Ferromanyetik bölgede taban durumu ve faz diyagramlarının ve özel (çoklu kritik) noktaların elde edilmesi,
- ii) Karışık dört kutuplu bölgede taban durumu ve faz diyagramlarının elde edilmesi,
- iii) Çift kutup-dört kutup etkileşiminin faz geçişleri ve sonlu örgü ölçeklemesi üzerindeki etkisi.

Ferromanyetik bölgede, yüz merkezli kübik örgü üzerinde Blume-Emery-Griffiths (BEG) modelin sahip olduğu fazlar, faz geçiş türleri ve özel noktaların tespit

edilmesi amacıyla,  $-1 \leq k < 0$  ve  $0 \leq d \leq 12$  aralığında,  $L=9$  kenar uzunluklu örgü için incelendi.  $d=0, 0,5; 1; 2$  ve  $k=0; -0,25; -0,5; -0,75$  ve  $-0,9$  değerleri için  $(kT/z, k)$  ve  $(KT/zJ, d)$  faz diyagramları elde edildi. Ardışık ve tekrarlayan faz geçişi sergileyen parametre setlerinde sonlu örgü ölçeklemesi analizi ilk kez yapıldı.

Karışık dört kutuplu taban durumlu bölgede, yüz merkezli kübik örgü üzerinde Blume-Emery-Griffiths (BEG) modelin sahip olduğu fazlar ve faz geçiş türleri,  $(k=-3; -24 \leq d < 0)$  ve  $(d=-4; -3 \leq k < -1,3)$  parametre aralıklarında,  $L=9$  kenar uzunluklu örgü için incelendi. Manyetik alınganlık piklerinin kritik sıcaklık değerlerinden yararlanarak; CVM [9] ile elde edilmiş olan  $(kT/zJ, k=-3)$  faz diyagramı ve daha önce çalışılmamış olan  $(kT_C/z, d=-4)$  faz diyagramı elde edildi.



Şekil 4.1. fcc BEG model faz diyagramı. Ferromanyetik ve karışık dört kutuplu bölgeler faz geçiş türlerine göre ayrılmıştır.

Faz diyagramları üzerinde modelin sahip olduğu;  $A_3B$ ,  $AB$  ve  $AB_3$  bölgeler ve faz geçiş türleri gösterildi. Şekil 4.1' de fcc BEG model için  $(d, k)$  faz diyagramı görülmektedir. Bu faz diyagramı; Ferromanyetik (F), karışık dört kutup (SQ) ve sıfır düzen (Q) olmak üzere üç taban duruma sahiptir. Yapılan hesaplamalar

ferromanyetik ve karışık dört kutup bölgelerinde, sergiledikleri faz geçiş türleri ve düzenlenimlere göre alt bölgelere ayrıldığını göstermiştir.

Çift kutup-dört kutup etkileşiminin faz geçişleri üzerindeki etkisini incelemek amacıyla; tekrarlayan, çift tekrarlayan, ardışık faz geçişleri ve özel noktalar çeşitli  $\ell$  değerleri için ilk kez incelendi.  $k=-0,9$  için;  $(kT/zJ, \pm\ell)$  faz diyagramı ve  $\ell=-0,005$  değerinde  $(kT/zJ, d)$  faz diyagramı ve elde edildi. Ferromanyetik ve karışık dört kutuplu bölgede daha önce çalışılmamış olan  $\ell$ 'nin sonlu örgü ölçekleme üzerindeki etkisi  $L=4, 6, 8, 9$  ve  $12$  kenar uzunluklu örgüler için incelendi.

Hesaplamalar periyodik sınır şartlarında, spin başına ve  $1\ 000\ 000$  cellular automaton zaman adımı üzerinden ortalama alınarak yapıldı. Spin başına ısıtma hızı, yarı kararlı durumları ortaya çıkaracak şekilde, ferromanyetik bölgede  $0.08H_k$ , karışık dört kutuplu bölgede ise  $0.05H_k$  alındı. Faz diyagramları ferromanyetik bölgede manyetik alınganlık piklerinin sıfır düzenli bölgede ise özısı piklerinin sıcaklık değerlerinden elde edildi. Sıcaklık tespitinde hata, pik genişliklerinin yarısı alınarak belirlendi. Sonlu örgü ölçeklemesinde ise örgü kritik sıcaklık değerleri,  $L=4, 6, 8, 9$  ve  $12$  kenar uzunluklu örgüler için elde edilen  $(kT/J, U_L)$  grafiklerinin kesim noktasından tespit edildi. Bu tespitteki hata ise kesim noktasına en yakın iki nokta aralığının yarısı kadardır.

fcc BEG modelin ferromanyetik faz geçiş bölgesinde ortaya çıkan faz durumları aşağıdaki şekilde tanımlanmaktadır [101].

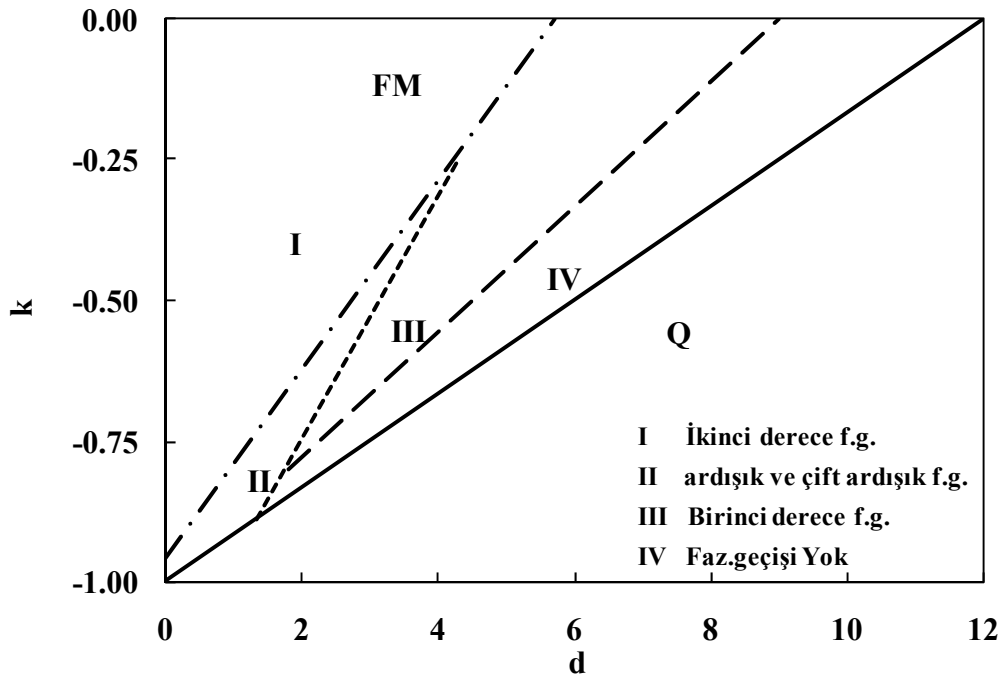
Ferromanyetik (f)  $M \neq 0, Q \neq 0$

Sıfır (a)  $M = 0, Q = 0$

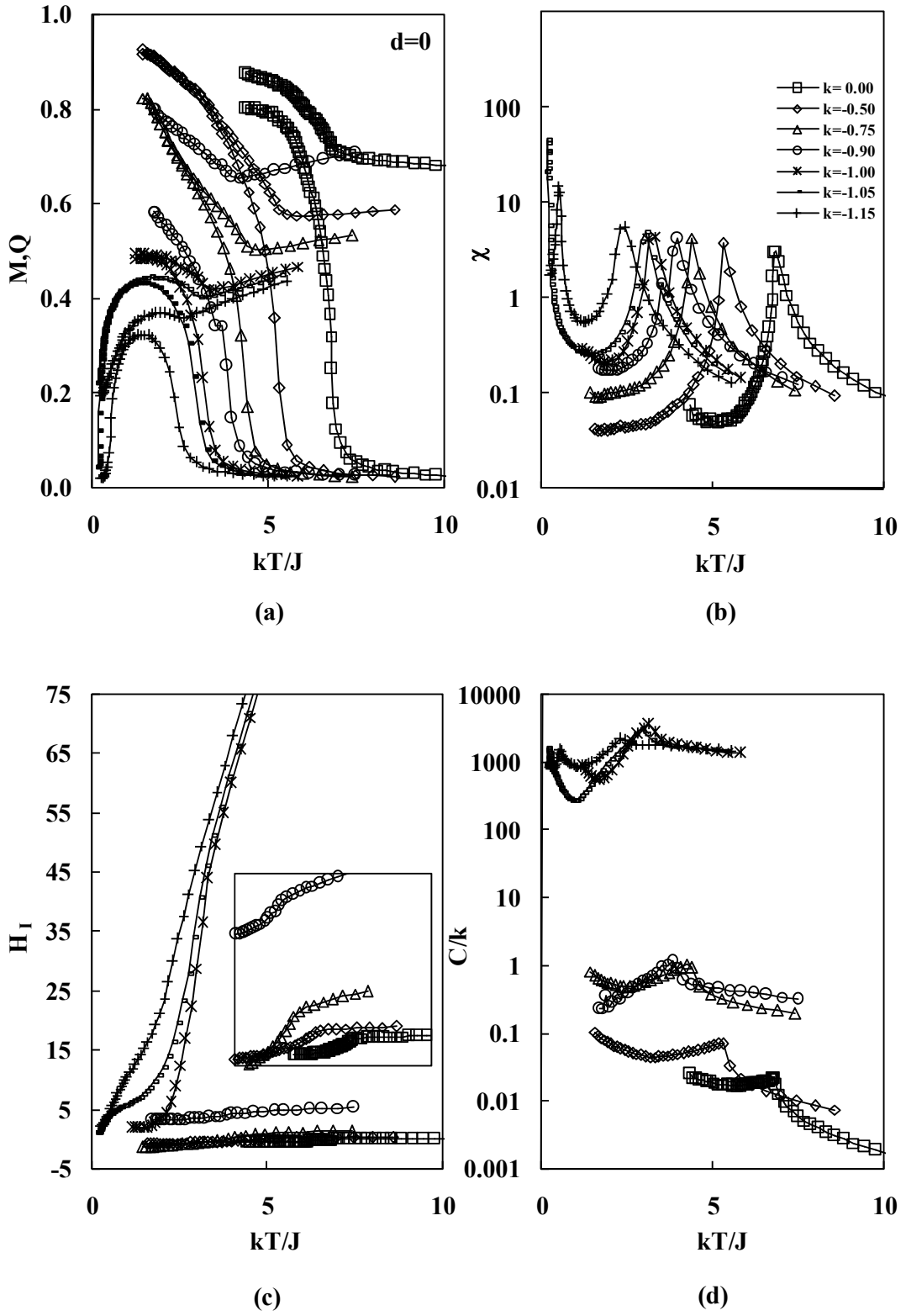
Paramanyetik (P)  $M = 0, Q \neq 0$

#### 4.1. Ferromanyetik BEG Modelin Taban Durumu ve Faz Tanımları

Fcc BEG modelin  $-1 < k \leq 0$  ve  $0 \leq d < 12$  parametre aralığında yapılan hesaplamalar ferromanyetik bölgenin farklı faz geçiş tipleri sergileyen dört alt bölgeye ayrıldığını göstermektedir. Şekil 4.2' de sözü edilen düzenler ve alt bölgeler I' den IV' e kadar numaralandırılmıştır. Bu alt bölgelerden ; I,  $P-F$  ikinci derece faz geçişleri; II,  $P-F-a$ ,  $P-F-a-F$ ,  $P-F-F-a-F$  ardışık ve çoklu faz geçişleri; III,  $P-F$  birinci derece faz geçişleri sergilerken IV bölgesinde faz geçişi gerçekleşmemektedir. IV bölgesi mutlak sıfırda ferromanyetik, sıfırdan büyük sıcaklıklarda ise sıfır düzen göstermektedir. Bu çalışmada yüz merkezli kübik BEG modelin  $(kT_C/zJ, d)$  ve  $(kT_C/zJ, k)$  faz diagramları  $d= 0; 0,5; 1, 2$  ve  $k= 0; -0,25; -0,5; -0,75; -0,9$  parametre değerleri için oluşturuldu. Kritik sıcaklık değerleri manyetik alınganlık piklerinden elde edildi.



Şekil 4.2. BEG modelin yüz merkezli kübik örgüde sahip olduğu taban durumları ve faz geçiş türleri. Ferromanyetik bölge; I ikinci derece faz geçişi, II tekrarlayan faz geçişi, III birinci derece faz geçişi sergileyen ve IV faz geçişi olmayan bölgeler olarak ayrılmıştır.

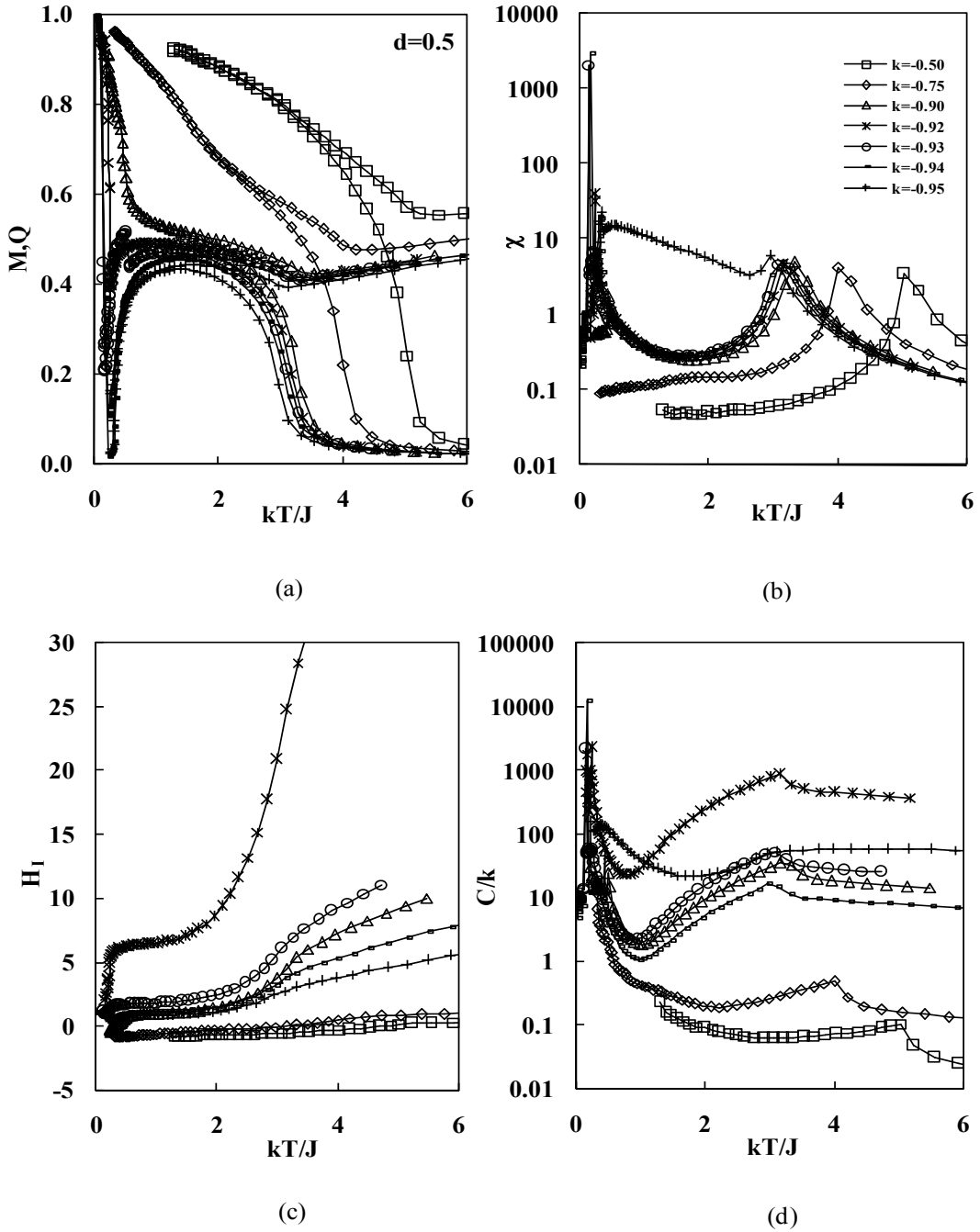


Şekil 4.3.  $d=0$  için; a) düzen parametreleri, b) manyetik alınganlık ( $\chi$ ), c) iç enerji ve d) özısının ( $H_1$ ) sıcaklıkla değişimi.

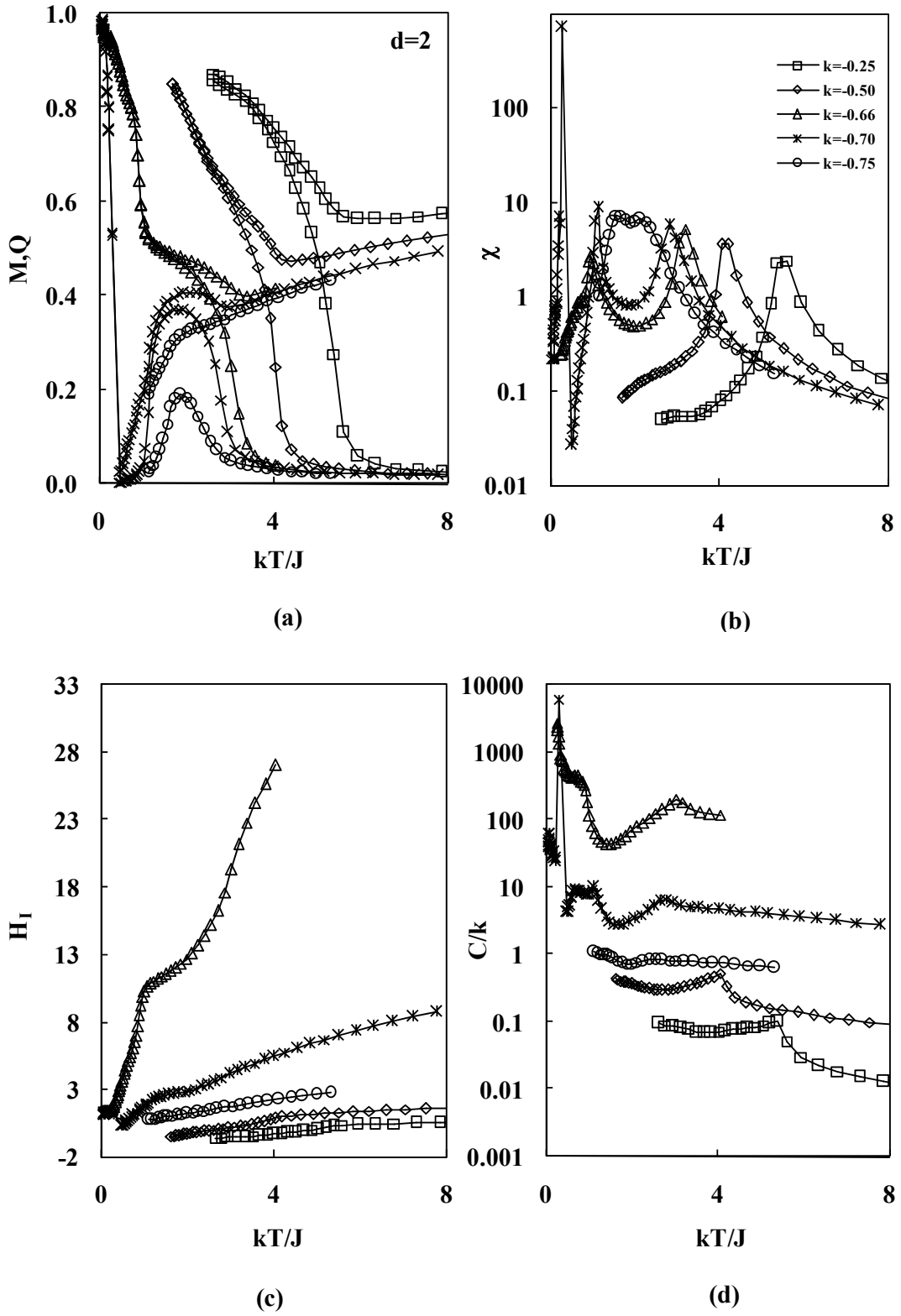
Şekil 4.3' te  $d=0$  doğrusu boyunca yapılan hesaplamalar sonucunda elde edilen düzen parametreleri (M, Q), manyetik alınganlık ( $\chi$ ), özısı (C) ve iç enerji ( $H_I$ )' nin sıcaklıkla değişimi görülmektedir.  $-1 \leq k \leq 0$  aralığında düzen parametreleri ve iç enerji ikinci derece  $P-f$  faz geçişi gösterirken (Şekil 4.3.a ve 4.3.c) manyetik alınganlık ve özısı karakteristik pik vermektedir (Şekil 4.3.b ve 4.3.d).  $k$  parametresinin değeri -1' e yaklaşırken düzen parametrelerinin düşük sıcaklıktaki değerlerinin de düştüğü görülmektedir. Ferromanyetik bölgenin sıfır (Q) faza yakın  $-1,23 \leq k < -1$  parametre aralığında ise ardışık ikinci derece  $P-F-a$  faz geçişleri gerçekleşmektedir. Düzen parametreleri ve iç enerji ard arda iki tane ikinci derece faz geçişi gösterirken manyetik alınganlık ve özısı iki karakteristik pik vermektedir.

Şekil 4.4' te ( $k, d$ ) faz diyagramı üzerinde  $d=0,5$  doğrusu boyunca; düzen parametreleri (M, Q), manyetik alınganlık ( $\chi$ ), özısı (C) ve iç enerji ( $H_I$ )' nin sıcaklıkla değişimi verilmiştir. düzen parametreleri ve iç enerji ikinci derece  $P-f$  faz geçişi sergilediği (Şekil 4.4.a ve c)  $-0,75 \leq k \leq 0$  aralığında manyetik alınganlık ve özısı karakteristik pike sahiptir (Şekil 4.4.b ve d).  $-0,93 < k < -0,75$  aralığında ise düzen parametresi ve iç enerji ard arda iki ikinci derece  $P-F-F$  faz geçişi gerçekleştirir.  $k=-0,9$  değerinde düzen parametresi ve iç enerji ard arda ikinci derece  $P-f-f$  faz geçişleri sergiler. Manyetik alınganlık ve özısı ise bu faz geçişlerine karşılık iki karakteristik pike sahiptir.  $k=-0,92$  değerinde düzen parametresi ve iç enerji  $P-f-f$  faz geçişleri sergiler.  $f-f$  faz geçişi birinci derece iken  $P-f$  faz geçişleri ikinci derecedir. Diğer yandan, manyetik alınganlık ve özısı bu faz geçişlerine karşılık bir keskin bir de karakteristik pike sahiptir.  $k=-0,93$  değerinde model çoklu  $P-F-F-a-F$  faz geçişleri gerçekleştirir. Düşük sıcaklıktaki  $a-F$  faz geçişi ve  $F-F$  faz geçişi birinci derece, diğer geçişler ise ikinci derecedir. Bu parametrede düzen parametresi ve iç enerji düşük sıcaklıktaki  $a-F$  faz geçişi ve  $F-F$  faz geçişlerinde süreksizlik diğer faz geçişlerinde ise süreklilik göstermektedir. Buna karşılık manyetik alınganlık ve öz ısı birinci derece faz geçişlerinde keskin, ikinci derece faz geçişlerinde karakteristik piklere sahiptir.  $k=-0,94$ 'de çift ardışık  $P-F-a-F$  faz geçişi göze çarpar. Bu faz geçişlerinde sadece düşük sıcaklıktaki  $a-F$  faz geçişi birinci derecedir. Bu nedenle düzen parametresi ve iç enerji  $a-F$  faz geçişinde süreksizlik diğer geçişlerde ise

sürekli sergiler. Manyetik alınganlık ve özısı ise bir keskin ve iki karakteristik pike sahiptir.  $k=-0,95$  değerinde ise faz geçişleri ardışık ve ikinci derecedir. Düzen parametresi ve iç enerjinin sürekli davrandığı faz geçişlerinde manyetik alınganlık ve özısı iki karakteristik pik sergiler.



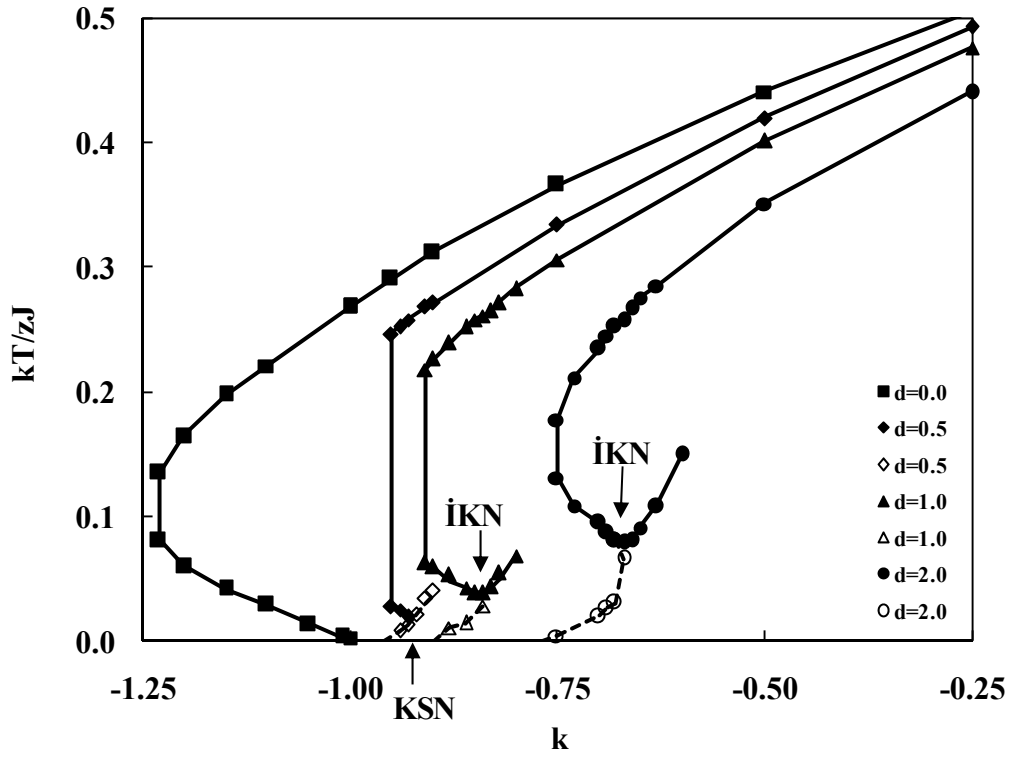
Şekil 4.4.  $d=0,5$  için; a) düzen parametreleri, b) manyetik alınganlık ( $\chi$ ), c) iç enerji ve d) özısının ( $H_I$ ) sıcaklıkla değişimi.



Şekil 4.5.  $d=2$  için; a) düzen parametreleri, b) manyetik alınganlık ( $\chi$ ), c) iç enerji ve d) özısının ( $H_I$ ) sıcaklıkla değişimi.

( $kT_C/zJ$ ,  $k$ ) faz diyagramında  $d=2$  doğrusu boyunca; düzen parametreleri ( $M$ ,  $Q$ ), manyetik alınganlık ( $\chi$ ), özısı ( $C$ ) ve iç enerji ( $H_I$ )' nin sıcaklıkla değişimi Şekil 4.5' te verilmiştir. Bu doğru üzerinde  $-0,6 < k \leq 0$  aralığında ikinci derece  $P-F$  faz geçişi meydana gelmekte, dolayısıyla düzen parametreleri ve iç enerji süreklilik gösterirken manyetik alınganlık ve özısı ise karakteristik pik sergilemektedir. Diğer yandan  $-0,67 < k \leq -0,6$  aralığında ardışık  $P-F-F$  ikinci derece faz geçişleri gözlenir. Bu nedenle, düzen parametreleri ve iç enerji sürekli görünürken, manyetik alınganlık ve özısı iki karakteristik pik sergiler.  $-0,75 \leq k \leq -0,67$  aralığı ise çift ardışık  $P-F-a-F$  faz geçişlerini içerir. Sadece düşük sıcaklık bölgesindeki  $a-F$  faz geçişi birinci derecedir. Düzen parametreleri ve iç enerji düşük sıcaklık bölgesindeki  $a-F$  faz geçişinde süreksizlik diğer geçişlerde süreklilik gösterir. Manyetik alınganlık ve özısı çift ardışık  $P-F-a-F$  faz geçişlerinde bir tane keskin iki tane de karakteristik pike sahiptir.

Şekil 4.6' da ( $kT/zJ, k$ ) düzlemi üzerinde  $d$ ' nin 0; 0,5; 1 ve 2 değerleri için faz diyagramları görülmektedir.  $d=0,5$  için  $k=-0,93$  değerinde kritik sıcaklık eğrisinin birinci derece faz geçiş eğrisi üzerinde sona erdiği nokta kritik son nokta meydana gelir. Birinci derece faz geçiş eğrisini çift ardışık  $P-F-a-F$  ve ardışık  $P-F-F$  faz geçişleri meydana getirmektedir.  $d=1$  ve 2 parametrelerinde görülen  $P-F-F$  faz geçişleri ise birinci derece faz geçiş eğrisi ile birleşerek ikili kritik noktaları oluşturan iki kritik sıcaklık eğrisinden birini oluşturur. Kritik son nokta (KSN) ve ikili kritik nokta (İKN) değerleri Çizelge 4.1' de görülmektedir.  $d=0$  doğrusu üzerinde Blume Emery Griffiths modelin Blume Capel modele indirgendiği ( $d=0$ ,  $k=0$ ) noktası için elde edilen kritik sıcaklık değeri ( $kT_C/zJ=0,57 \pm 0,007$ ) seri açılımı [77] sonucu ile uyumlu fakat MFA [31] sonucu ( $kT_C/zJ=0,66$ ) ile farklıdır. Çizelge 4.2' de ise  $d=0$  eğrisi üzerinde elde edilen üçlü kritik nokta (ÜKN) değerinin diğer yöntemlerin sonuçları ile karşılaştırılması görülmektedir. CA ile elde edilen sonuç MC [96] ve seri yaklaşımı sonucu [77] ile uyumlu iken MFA [31] sonucundan farklıdır.



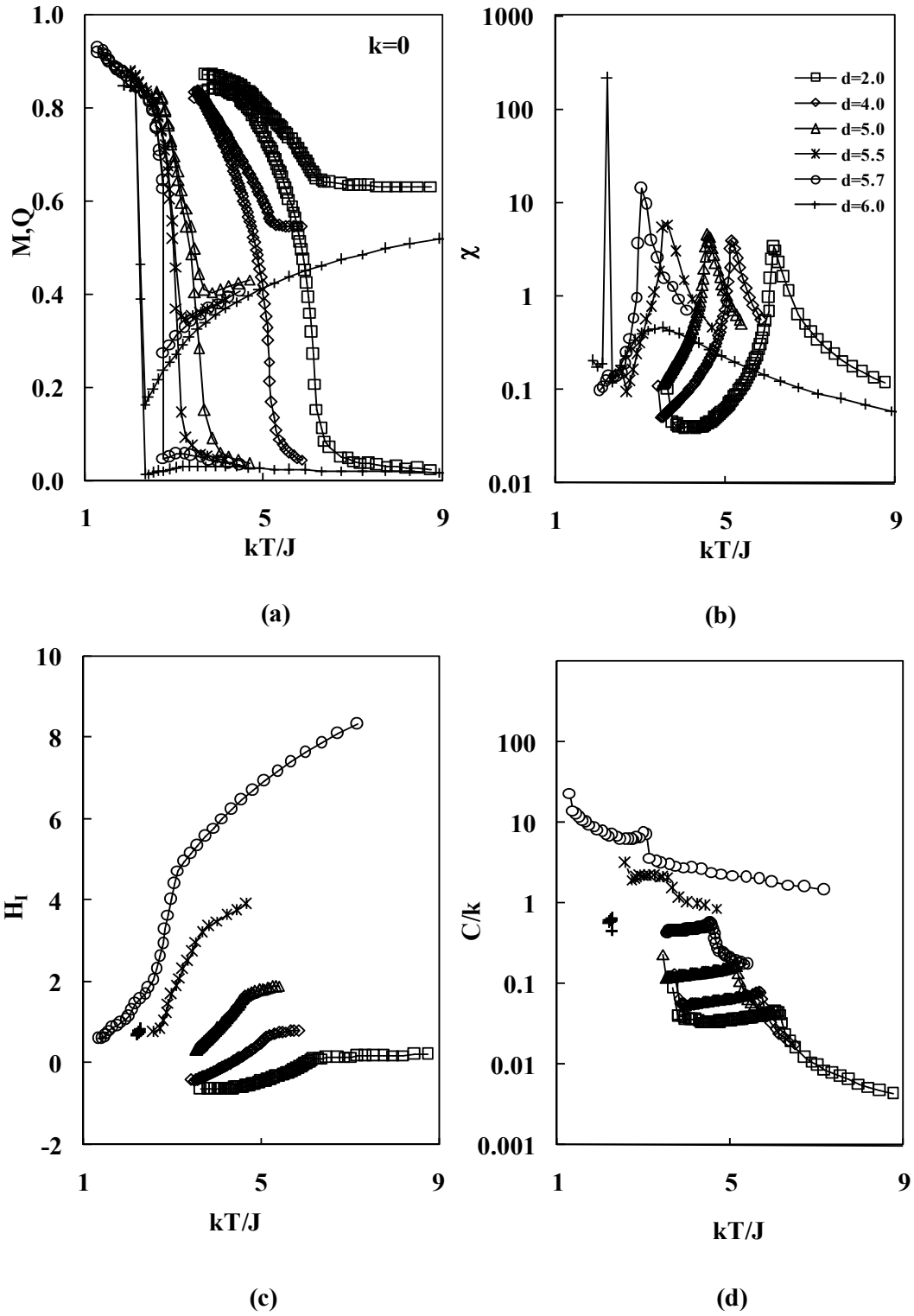
Şekil 4.6.  $d=0; 0.5; 1$  ve  $2$  değerleri için  $(kT/zJ, k)$  düzleminde faz diyagramları. Sürekli çizgiler ikinci derece, kesikli çizgiler ise birinci derece faz geçişlerini işaret eder. Özel noktalar; İKN: ikili kritik nokta ve KSN: kritik son noktadır.

Çizelge 4.1.  $(kT/zJ, k)$  faz diyagramında özel noktalar

| d   | k     | Özel Noktalar | $kT_C/zJ$       |
|-----|-------|---------------|-----------------|
| 0.5 | -0,93 | KSN           | $0,02 \pm 0,01$ |
| 1   | -0,84 | İKN           | $0,04 \pm 0,01$ |
| 2   | -0,67 | İKN           | $0,08 \pm 0,01$ |

Çizelge 4.2.  $k=0$ ' da üçlü kritik nokta değeri

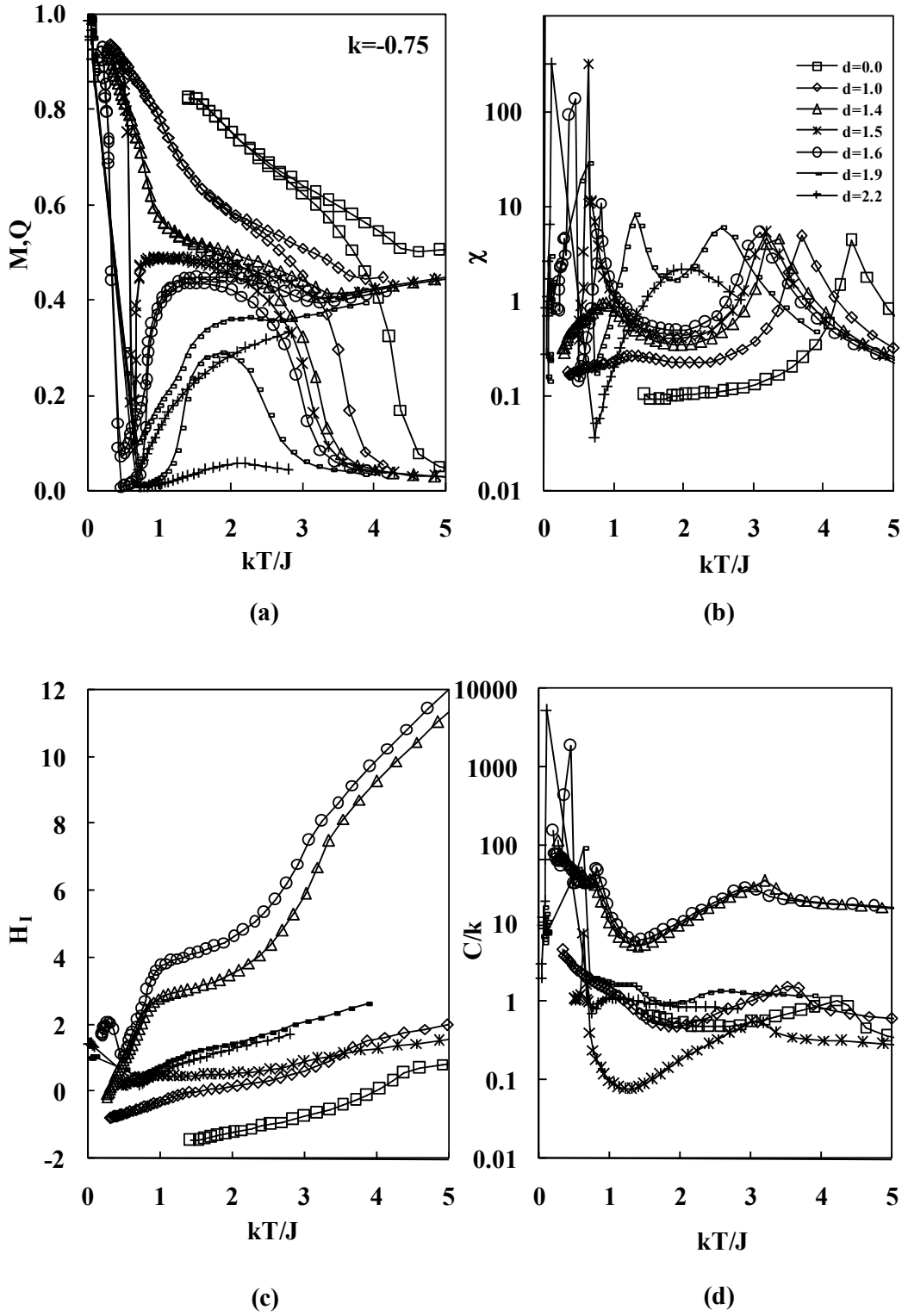
|           | CA              | MC   | Series Expansion | MFA  |
|-----------|-----------------|------|------------------|------|
| d         | 5,7             | 5,62 | 5,62             | 5,55 |
| $kT_C/zJ$ | $0,25 \pm 0,04$ | 0,26 | 0,26             | 0,33 |



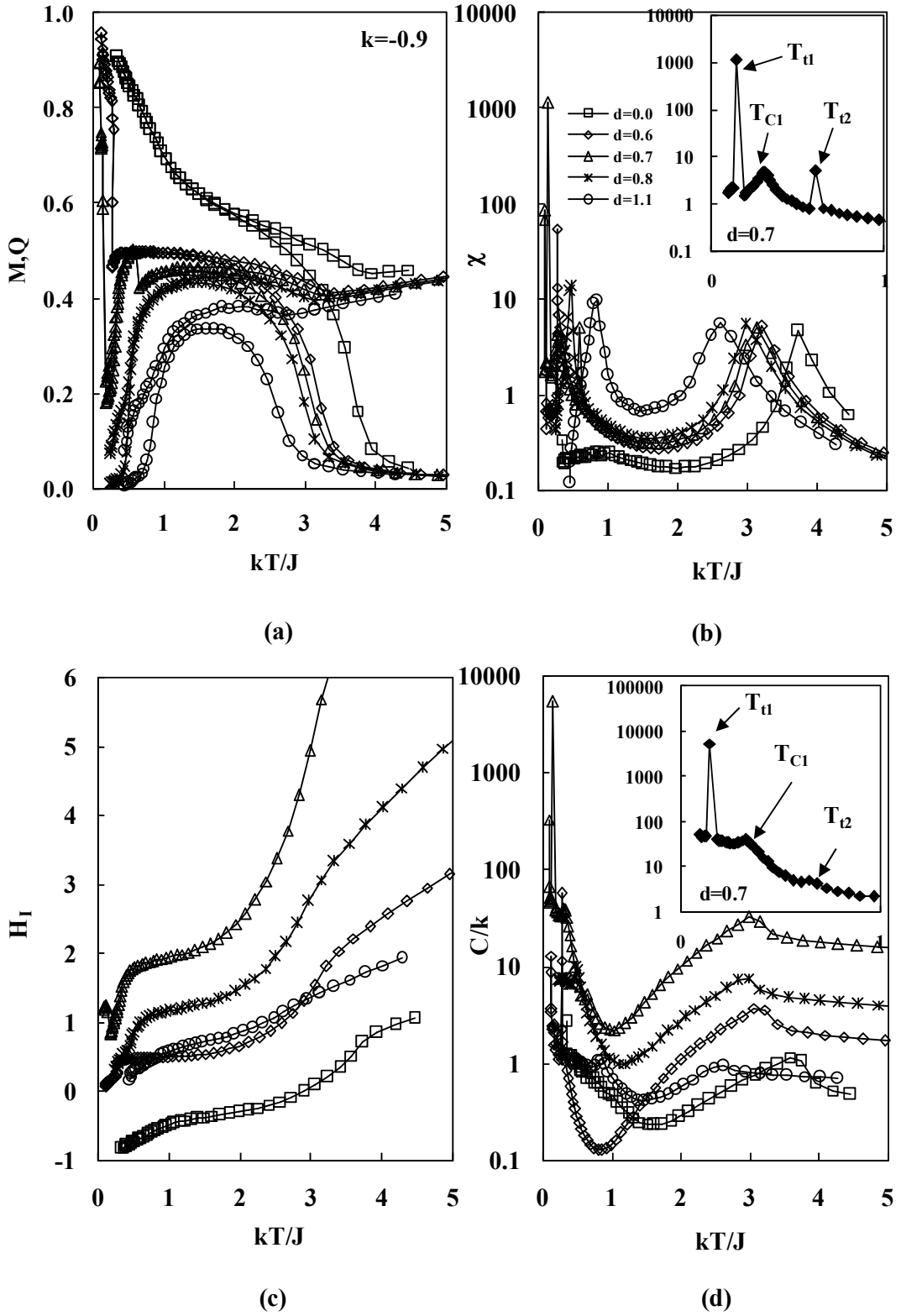
Şekil 4.7.  $k=0$  için; a) düzen parametreleri, b) manyetik alınganlık ( $\chi$ ), c) iç enerji ve d) özısının ( $H_I$ ) sıcaklıkla değişimi.

Şekil 4.7' de  $(kT_C/zJ, d)$  faz diyagramında  $k=0$  doğrusu boyunca; düzen parametreleri, iç enerji, manyetik alınganlık ve özısının sıcaklıkla değişimi görülmektedir. Bu doğru üzerinde  $d=5,7$  değerinde faz geçiş türü ikinci dereceden birinci dereceye geçmekte dolayısıyla bu noktada üçlü kritik nokta meydana gelmektedir. Bu nedenle düzen parametresi ve iç enerji;  $d < 5,7$  parametre bölgesinde süreklilik,  $d \geq 5,7$  bölgesinde ise süreksizlik sergiler. Bu duruma uygun olarak manyetik alınganlık ve özısındaki pik yapısı da  $d \geq 5,7$ ' den itibaren karakteristik pikten keskin pike geçmektedir.

$k=-0,75$  parametresinde düzen parametreleri, iç enerji, manyetik alınganlık ve özısının sıcaklığa bağımlılığı Şekil 4.8' de görülmektedir.  $k=-0,75$  parametresi için  $0 \leq d < 1,4$  aralığında ikinci derece  $P-F$  faz geçişi görülmektedir. Bu aralıkta düzen parametreleri ve iç enerji süreklilik sergilerken manyetik alınganlık ve özısı karakteristik pike sahiptir. Ardışık ikinci derece  $P-F-F$  faz geçişleri  $1,4 \leq d < 1,5$  aralığında görülmektedir.  $F-F$  faz geçişinin varlığı birinci derece faz geçiş eğrisi ile birleşerek ikili kritik noktayı oluşturan iki ikinci derece faz geçiş eğrisinden birinin oluşmasına neden olur. Ardışık ikinci derece  $P-F-F$  faz geçişlerinin sonucunda düzen parametresi ve iç enerji süreklilik sergilerken manyetik alınganlık ve özısı iki karakteristik pike sahiptir.  $1,5 \leq d \leq 2$  aralığında ise sadece düşük sıcaklık bölgesindeki  $a-F$  geçişi birinci derece olan çift ardışık  $P-F-a-F$  faz geçişi yer alır. Düzen parametresi ve iç enerji düşük sıcaklık bölgesindeki  $a-F$  faz geçişinde süreksizlik diğer faz geçişlerinde ise süreklilik sergilerken manyetik alınganlık ve özısı bir keskin iki karakteristik pike sahiptir. Düşük sıcaklık bölgesindeki birinci derece  $a-F$  faz geçişleri ikili kritik noktada iki ikinci derece faz geçiş eğrisiyle birleşen birinci derece faz geçiş eğrisini oluşturur.  $d > 2$  bölgesinde düzen parametreleri ve iç enerjideki süreksizlik  $a-F$  faz geçişinin birinci derece olduğunu işaret etmektedir. Bu faz geçişlerine karşılık manyetik alınganlık ve özısı birer keskin pike sahiptir.



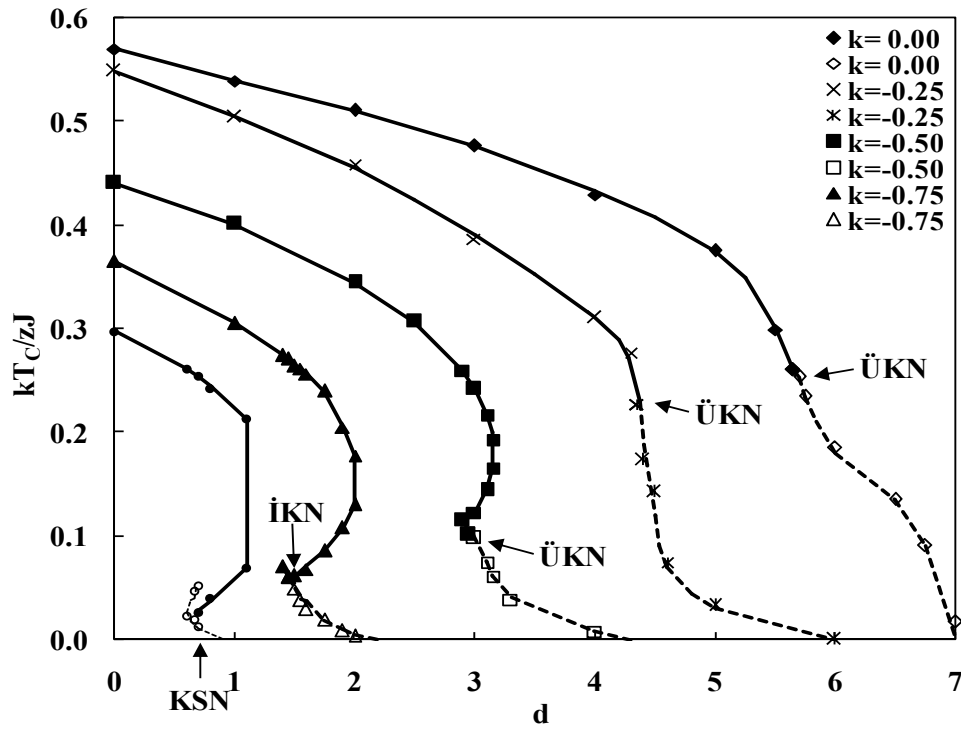
Şekil 4.8.  $k=-0,75$  için; a) düzen parametreleri, b) manyetik alınganlık ( $\chi$ ), c) iç enerji ve d) özısının ( $H_1$ ) sıcaklıkla değişimi.



Şekil 4.9.  $k=-0,9$  için; a) düzen parametreleri, b) manyetik alınganlık ( $\chi$ ), c) iç enerji ve d) özısının ( $H_I$ ) sıcaklıkla değişimi.

( $kT_c/zJ$ ,  $d$ ) faz uzayında kritik son nokta içeren  $k=-0,9$  parametresinde; düzen parametreleri, iç enerji, manyetik alınganlık ve özısının sıcaklığa bağımlılığı Şekil 4.9' da verilmiştir. Model  $0 \leq d < 0,6$  aralığında ikinci derece  $P-F$  faz geçişi sergiler. Bu aralıkta düzen parametreleri ve iç enerji sürekli geçiş sergilerken manyetik alınganlık ve özısı karakteristik tek pike sahiptir.  $0,6 \leq d < 0,7$  aralığında ise  $F-F$  kısmı birinci derece olan ardışık  $P-F-F$  faz geçişi meydana gelir. Birinci derece  $F-F$  faz geçişinin sıcaklığı, kritik son noktada ikinci derece faz geçişinin üzerinde sonlandığı, birinci derece faz geçiş eğrisinin bir kısmını oluşturur. Düzen parametreleri ve iç enerji  $F-F$  geçişinde süresiz  $P-F$  geçişinde ise süreklidir. Buna karşılık manyetik alınganlık ve özısı bir keskin bir de karakteristik pike sahiptir. Kritik son nokta olarak tespit edilen  $d=0,7$  parametresinde ise çoklu  $P-F-F-a-F$  faz geçişi meydana gelir. Bu geçişlerden  $T_{t2}$  ve  $T_{t1}$  geçiş sıcaklıklarında meydana gelen  $F-F$  ve  $a-F$  faz geçişleri birinci derecedendir. Birinci dereceden olan bu geçişlerde düzen parametresi ve iç enerji süresizlik manyetik alınganlık ve özısı ise keskin pike sahiptir.  $d=0,7'$  de meydana gelen çoklu faz geçişinin ferromanyetikten paramanyetiğe ( $P-F$ ) ve sıfır düzenden ferromanyetiğe ( $F-Q$ ) olan kısımlarının düzen parametreleri ve iç enerjileri incelendiğinde ikinci derece olduğu görülmektedir. Bu faz geçişlerine karşılık gelen manyetik alınganlık ve özısı ise  $T_{C1}$  ve  $T_{C2}$  kritik sıcaklıklarında karakteristik piklere sahiptir.  $0,7 < d \leq 0,8$  aralığında çift ardışık  $P-F-a-F$  faz geçişleri gerçekleşmektedir. Bu aralıktaki çift ardışık faz geçişlerinin ferromanyetikten sıfır düzene ( $a-F$ ) olan kısmı birinci dereceden diğer faz geçişleri  $P-F-a$  ise ikinci derecedendir. Bu nedenle manyetik alınganlık ve özısı bir tane keskin iki tane de karakteristik pike sahiptir.  $d > 0,8$  aralığında ise düzen parametreleri ve iç enerjide süreklilik, manyetik alınganlık ve özısıda iki karakteristik pik olarak kendini gösteren tekrarlayan ikinci derece  $P-F-a$  faz geçişleri ortaya çıkar.

Şekil 4.10' da fcc BEG model için ( $kT/zJ$ ,  $d$ ) faz diyagramı görülmektedir. Bu zengin faz diyagramı;  $k=0$ ;  $-0,25$  ve  $-0,5'$  te üçlü kritik nokta (ÜKN);  $k=-0,75'$  te ikili kritik nokta (İKN);  $k=-0,9'$  da ise kritik son nokta (KSN) olmak üzere çoklu kritik noktalar içermektedir.



Şekil 4.10.  $k=0; -0,25; -0,5; -0,75$  ve  $-0,9$  değerleri için  $(kT_c/zJ, d)$  düzleminde faz diyagramları. Sürekli çizgiler ikinci derece kesikli çizgiler ise birinci derece faz eğişlerini işaret eder. Özel noktalar; ÜKN: üçlü kritik nokta, İKN: ikili kritik nokta ve KSN: kritik son noktadır.

Çizelge 4.3.  $(kT_c/zJ, d)$  faz diyagramında özel noktalar

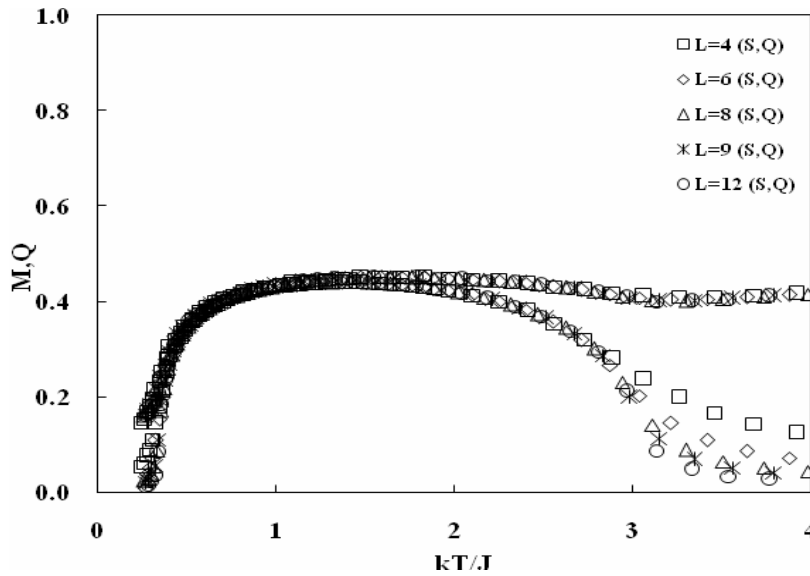
| k     | d    | Özel Noktalar | $kT_c/zJ$       |
|-------|------|---------------|-----------------|
| 0,00  | 5,70 | ÜKN           | $0,25 \pm 0,04$ |
| -0,25 | 4,40 | ÜKN           | $0,17 \pm 0,05$ |
| -0,50 | 3,00 | ÜKN           | $0,10 \pm 0,02$ |
| -0,75 | 1,45 | İKN           | $0,06 \pm 0,04$ |
| -0,90 | 0,70 | KSN           | $0,03 \pm 0,03$ |

Çizelge 4.3' te bu özel noktaların türleriyle beraber ortaya çıktıkları parametre ve sıcaklık değerleri görülmektedir. MFA [31] ve RG [34], CA [105] hesaplamalarında  $k=-0,9$  da elde edilen kritik son noktanın,  $k=-0,5$ ' de olduğunu tahmin etmiştir.

MCRG [31] ve TPCA [33] çalışmaları da  $k=-0,5'$  de kritik son nokta olmadığını gösteren basit kübik örgüde çalışılan CA [30] sonucunu desteklemektedir.

#### 4.1.1. Ferromanyetik bölgede faz sınırı civarında sonlu örgü ölçeklemesi

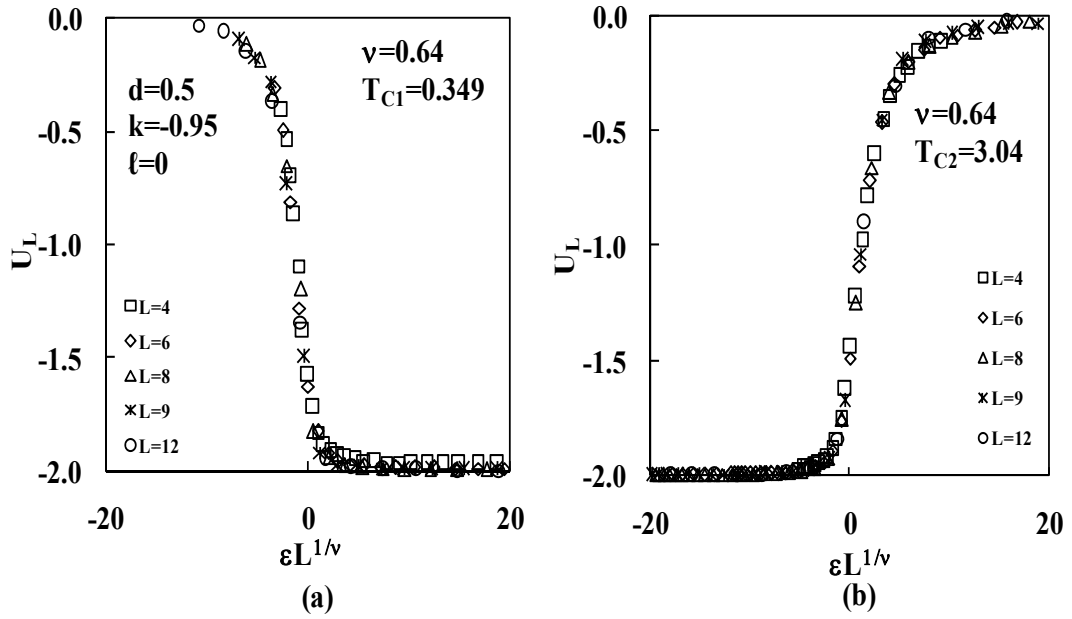
Faz sınırları civarında fcc BEG modelin evrensellik sınıfını tespit etmek amacıyla sıfır düzen-ferromanyetik (Q-FM) ve karışık dört kutuplu-ferromanyetik (SQ-FM) faz sınırlarında sonlu örgü ölçekleme analizi yapıldı. Q-FM faz sınırında, ardışık faz



Şekil 4.11.  $d=0,5$ ;  $k=-0,95$  parametre seti için düzen parametresi.  $P-f-a$  ardışık faz geçişi görülmektedir.

geçişlerinin görüldüğü II bölgesinde ( $d=0,5$ ;  $k=-0,95$ ) parametre setinde  $L=4, 6, 8, 9$  ve  $12$  örgüleri için inceleme yapıldı (Şekil 4.11).

Binder kümülanında ikinci derece  $P-F-a$  ardışık faz geçişleri nedeniyle farklı örgülere ait eğrilerin iki ayrı kritik sıcaklıkta ( $T_{C1}, T_{C2}$ ) kesiştiği görüldü. Binder kümülanının kesim noktasından elde edilen  $T_{C1}=0,349\pm 0,002$  ve  $T_{C2}=3,04\pm 0,04$  kritik sıcaklıkları kullanılarak yapılan analizlerde farklı örgüler için elde edilen kümülan verilerinin  $v=0,64$  için tek bir eğriye uyduğu görüldü (Şekil 4.12.a ve b).

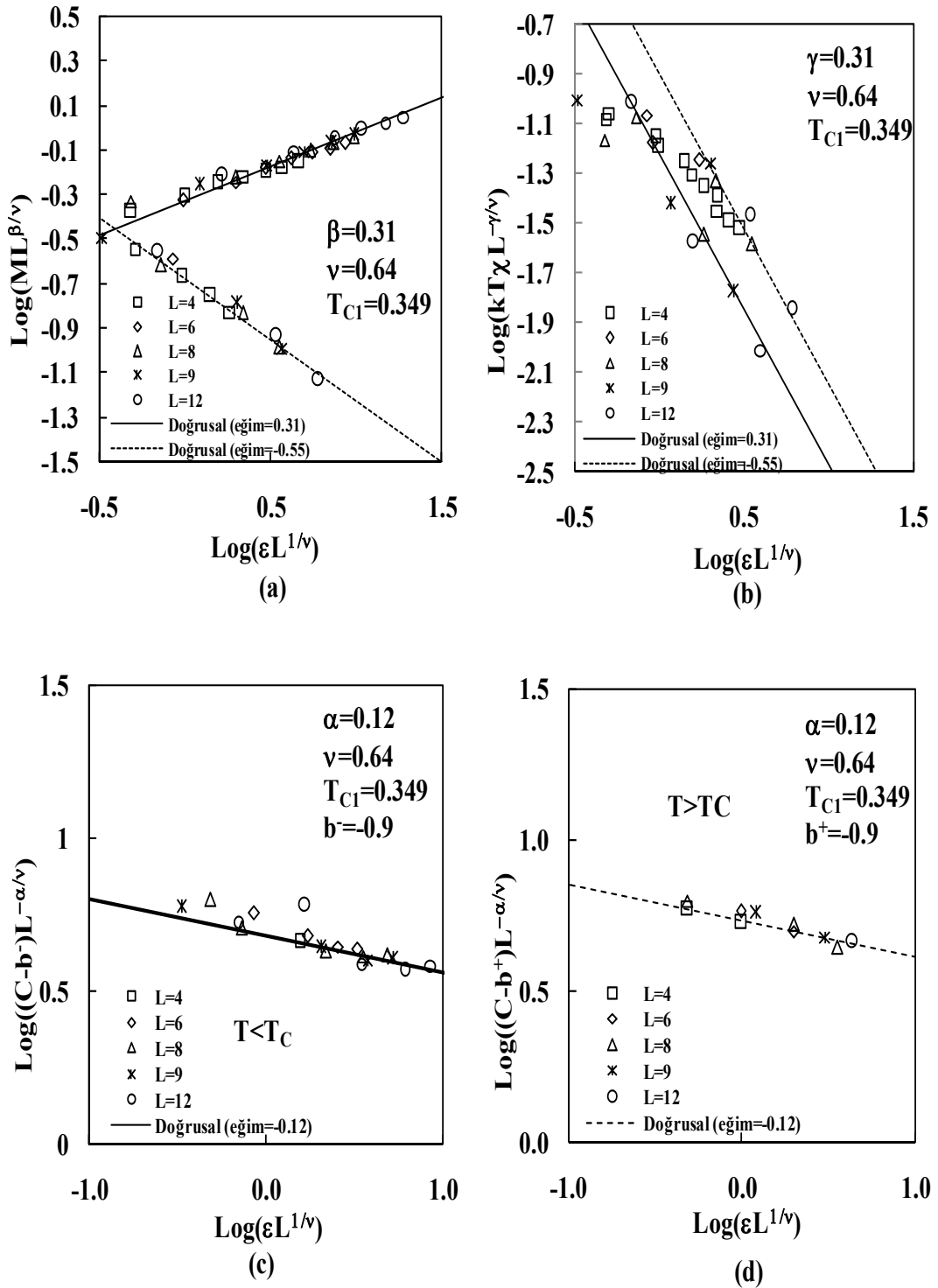


Şekil 4.12.  $P$ - $F$ - $a$  ardışık faz geçişleri sergileyen  $d=0,5$ ;  $k=-0,95$  parametre seti için binder kümülantının ölçeklenmesi. a)  $F$ - $a$  ardışık faz geçişinin verileri, b)  $P$ - $F$  ardışık faz geçişinin verileri.

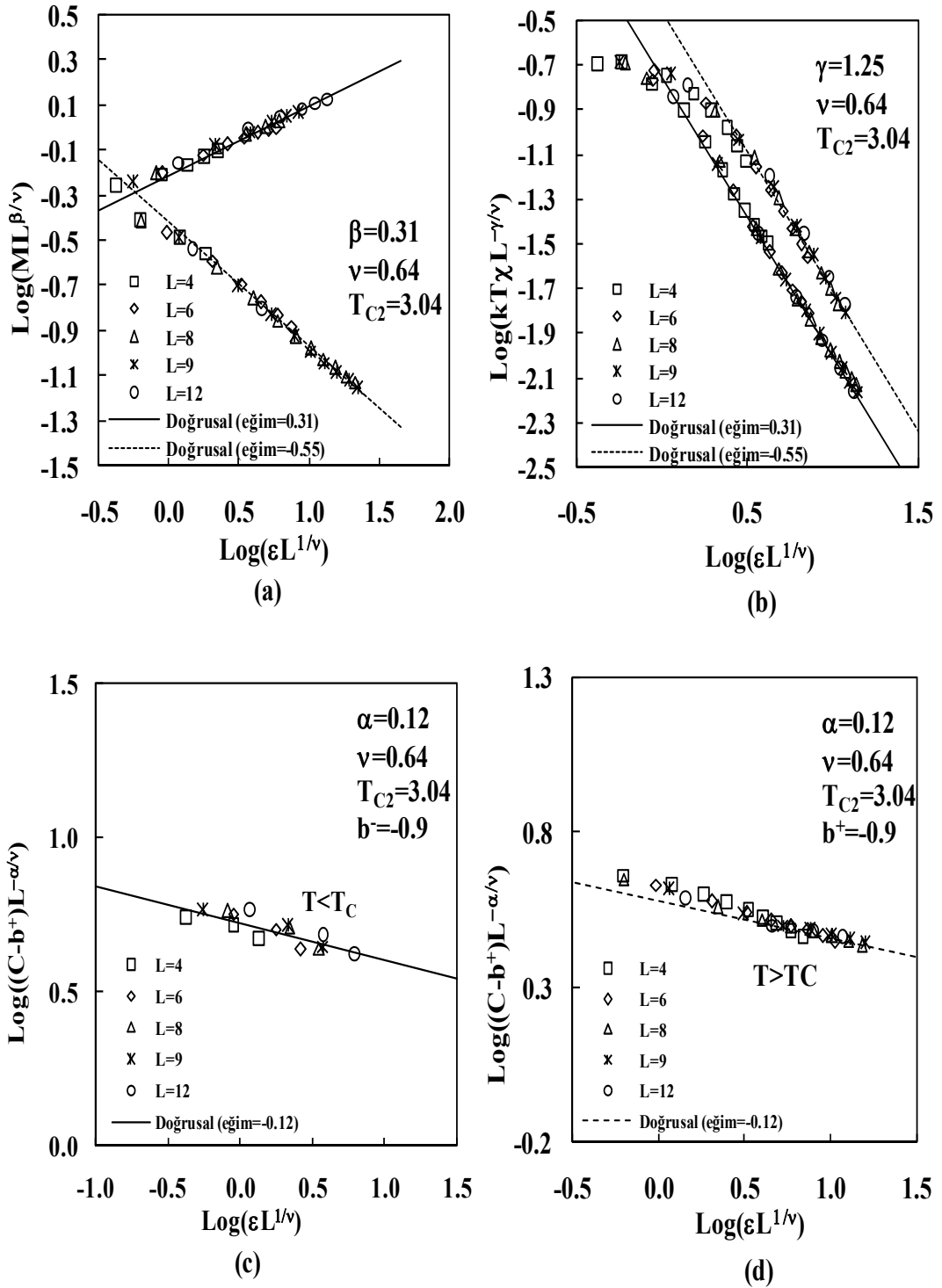
Düzen parametresi için  $\nu=0,64$  ve  $\beta=0,31$  değerlerinde yapılan ölçeklemede verilerin  $T < T_{C1}$  ve  $T < T_{C2}$  bölgesinde  $0,31$ ,  $T > T_{C1}$  ve  $T > T_{C2}$  bölgesinde ise  $0,55$  eğimli birer doğruya uyduğu görüldü (Şekil 4.13.a ve Şekil 4.14.a).

Manyetik alınganlık için  $\nu=0,64$  ve  $\gamma=1,25$  değeri ile yapılan ölçeklemede verilerin  $T < T_{C1}$ ,  $T < T_{C2}$ ,  $T > T_{C1}$  ve  $T > T_{C2}$  bölgelerinde  $1,25$  eğimli birer doğruya uyduğu görüldü (Şekil 4.13.b ve Şekil 4.14.b). İndirgenmiş sıcaklık  $T < T_C$ ' de  $\varepsilon=(T-T_C)/T_C$ ,  $T > T_C$ ' de ise  $\varepsilon=(T-T_C)/T$  alınmıştır.

Özısı niceliği de  $\nu=0,64$  ve  $\alpha=0,12$  kritik üsleri için ölçeklendiğinde verilerin  $T < T_{C1}$ ,  $T < T_{C2}$ ,  $T > T_{C1}$  ve  $T > T_{C2}$  bölgelerinde eğimi  $0,12$  olan birer doğruya uyduğu tespit edildi (Şekil 4.13.c , d ve Şekil 4.14.c ve d).



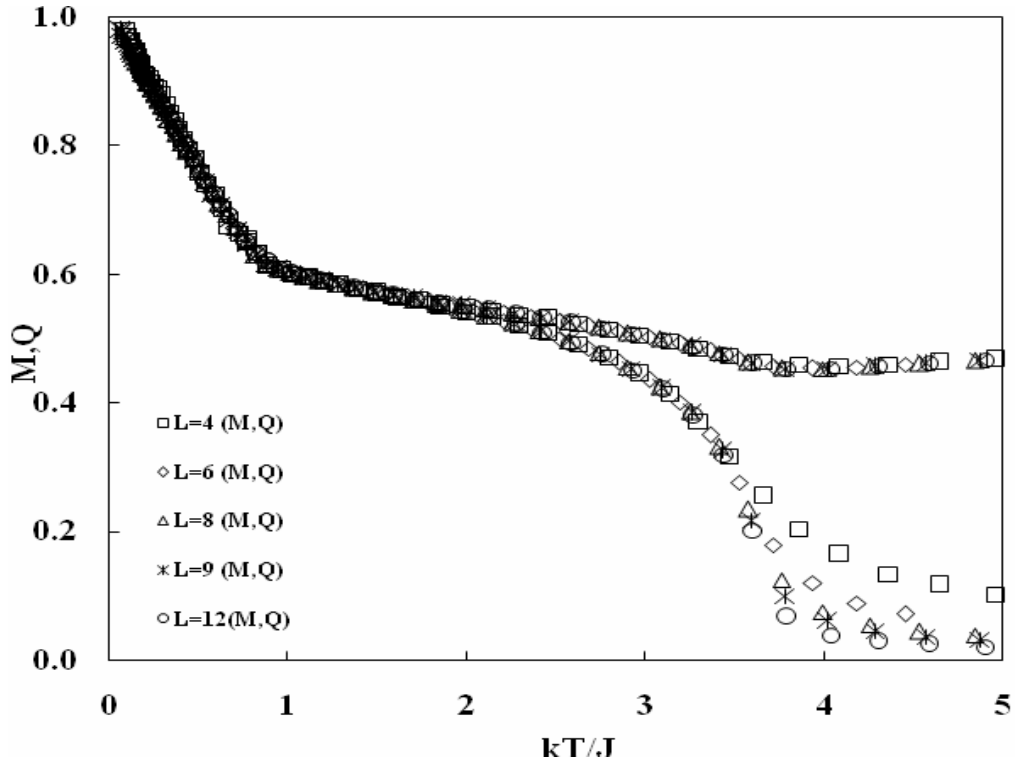
Şekil 4.13.  $d=0,5$ ;  $k=-0,95$  parametre seti için  $P$ - $F$  faz geçişinde; a) düzen parametresinin, b) alınganlığın, c)  $T < T_{C1}$ ' de özısının ve d)  $T > T_{C1}$ ' de özısının sonlu örgü ölçeklemesi.



Şekil 4.14.  $d=0,5$ ;  $k=-0,95$  parametre seti için  $F$ - $a$  faz geçişinde a) düzen parametresinin, b) alınganlığın, c)  $T < T_{C2}'$  de özısının ve d)  $T > T_{C2}'$  de özısının sonlu örgü ölçeklemesi.

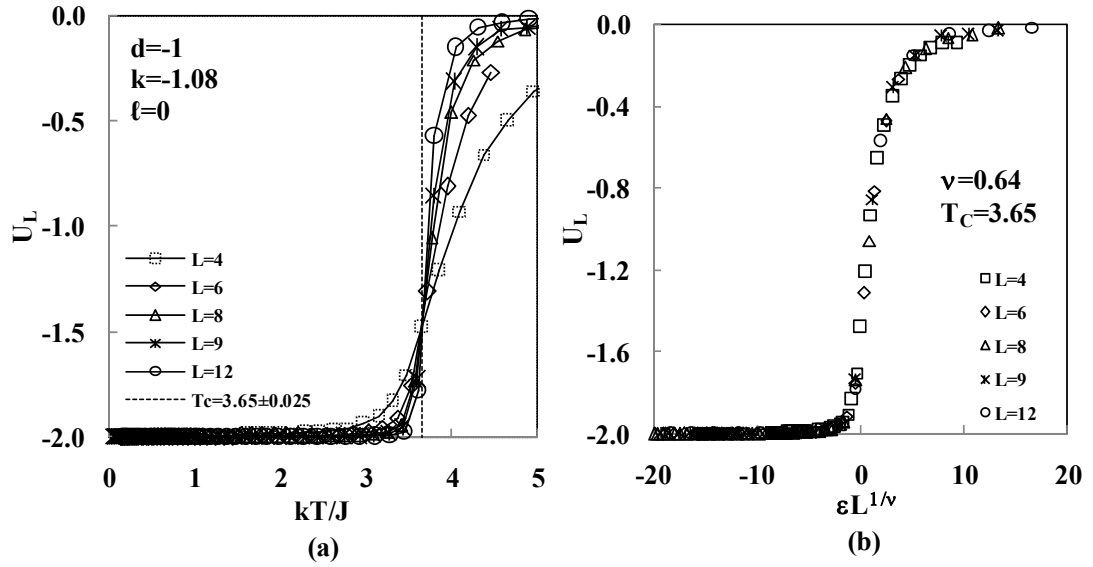
$d=0,5$ ,  $k=-0,95$  parametre seti için yapılan ölçekleme analizleri sonucunda kritik üs değerlerinin 3-boyutlu Ising model kritik üsleri ile uyumlu olduğu görüldü ( $\alpha=\alpha'=0,12$ ;  $\beta=\beta'=0,31$ ;  $\gamma=\gamma'=1,25$ ,  $\nu=\nu'=0,64$ ).

Karışık dört kutuplu (SQ)-Ferromanyetik (FM) faz sınırında modelin evrensellik sınıfını tespit etmek amacıyla  $d=-1$ ,  $k=-1,08$  parametre setinde hesaplamalar yapıldı. İkinci derece  $P-F$  faz geçişinin görüldüğü bu parametre setinde termodinamik nicelikler için sonlu örgü ölçekleme analizi yapıldı.



Şekil 4.15.  $d=-1$ ;  $k=-1,08$  parametre seti için düzen parametresi. İkinci derece  $P-F$  faz geçişi görülmektedir.

$\nu$  kritik üssünü tespit etmek amacıyla binder kümülanı ölçeklemesi yapıldı. Binder kümülanlarının kesim noktasından elde edilen  $T_C=3,65\pm 0,025$  sonlu örgü kritik sıcaklığı ve  $\nu=0,64$  kritik üssü kullanılarak yapılan ölçeklemede verilerin tek bir eğriye uyduğu görüldü (Şekil 4.16).



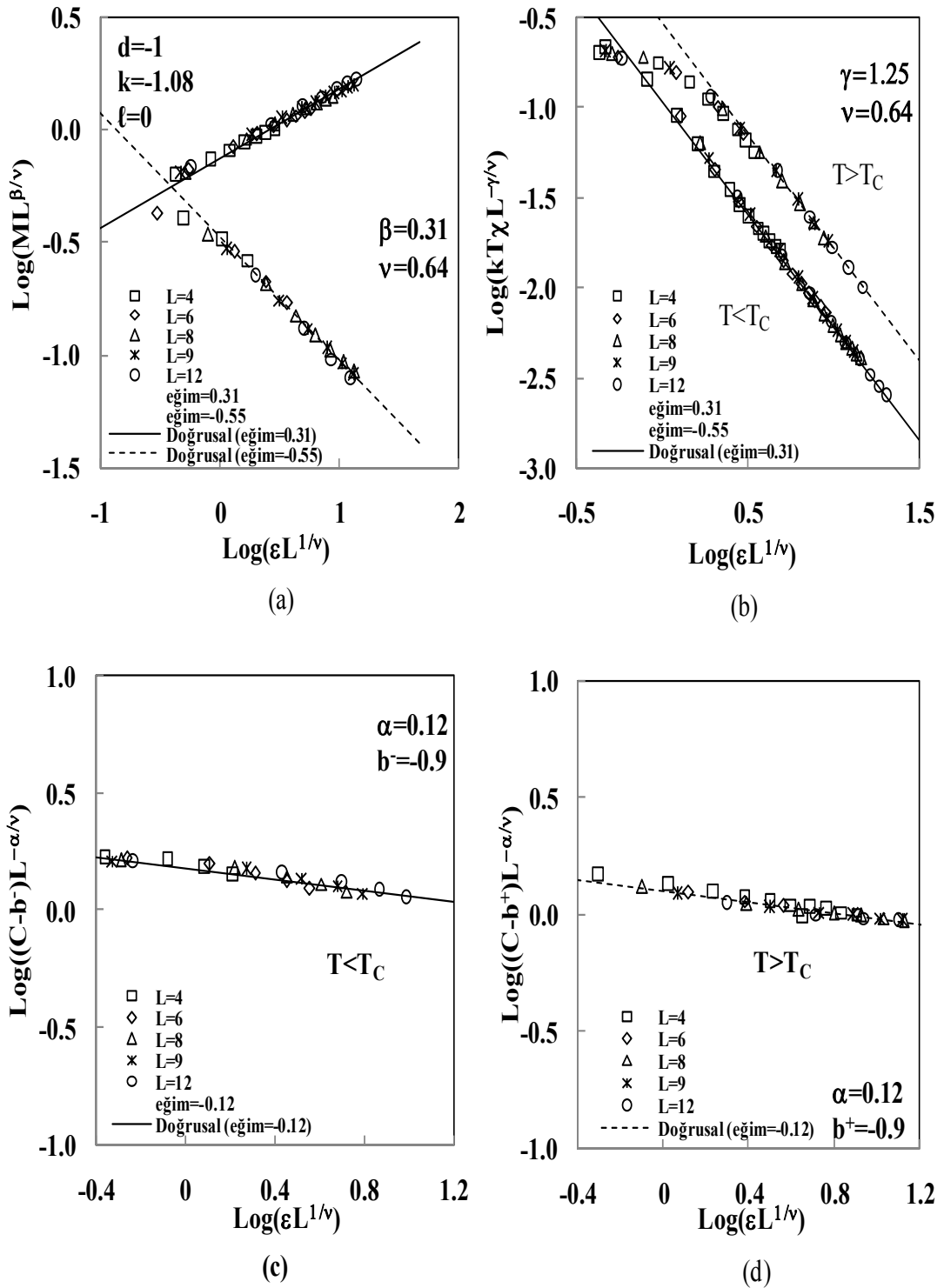
Şekil 4.16. Binder kümülanından a) sonlu örgü kritik sıcaklığının, b)  $\nu$  kritik üssünün tespiti.

$\nu=0,64$  ve  $\beta=0,31$  kritik üsleri kullanılarak düzen parametresi için yapılan ölçeklemede verilerin  $T < T_c$ ' de  $0,31$ ,  $T > T_c$ ' de  $0,55$  eğimli birer doğruya uyduğu görüldü (Şekil 4.17.a).

Şekil 4.17.b' de manyetik alınganlık için yapılan sonlu örgü ölçeklemesi görülmektedir.  $\nu=0,64$  ve  $\gamma=1,25$  kritik üsleri ile yapılan ölçekleme analizinde verilerin kritiğin altında ve üstünde  $1,25$  eğimli birer doğru üzerinde toplandı.

Özısı için sonlu örgü ölçekleme analizi yapıldığında ise  $\nu=0,64$  ve  $\alpha=0,12$  kritik üsleri için yapılan hesaplamalarda verilerin  $T < T_c$  ve  $T > T_c$ ' de  $0,12$  eğimli birer doğruya uyduğu görüldü.

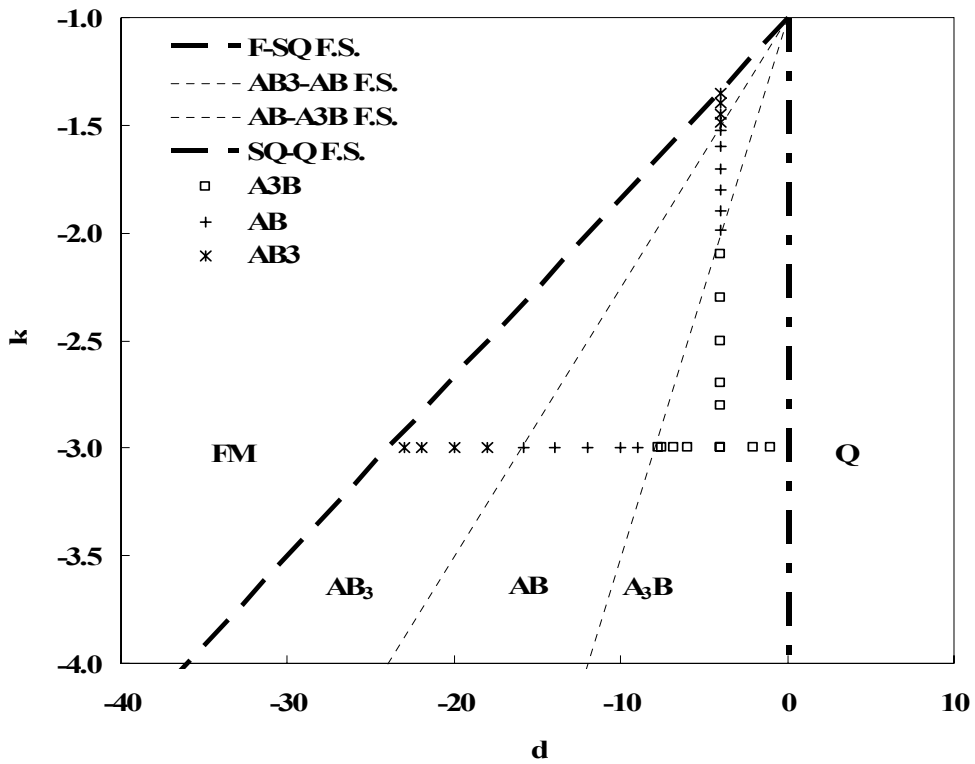
$d=-1$ ;  $k=-1,08$  parametre seti için yapılan ölçekleme analizleri sonucunda modelin 3-boyutlu Ising model evrensellik sınıfına dahil olduğu görüldü ( $\alpha=\alpha'=0,12$ ,  $\beta=\beta'=0,31$ ,  $\gamma=\gamma'=1,25$ ,  $\nu=\nu'=0,64$ ).



Şekil 4.17.  $d=-1$ ;  $k=-1,08$  parametre seti için f-a faz geçişinde; a) düzen parametresinin, b) alınganlığın, c)  $T < T_c$ ' de özısının ve d)  $T > T_c$ ' de özısının sonlu örgü ölçeklemesi.

#### 4.2. Karışık Dört kutuplu Bölgede Blume Emery Griffiths Modelin Taban Durumu ve Faz Tanımları

fcc BEG modelin karışık dört kutuplu (SQ) taban durumuna sahip bölgesinde hesaplamalar  $-3 \leq k < -1$  ve  $-24 \leq d < 0$  aralıklarında yapılmıştır. ( $k=-3$ ;  $-24 \leq d < 0$ ) ve ( $d=-4$ ;  $-3 \leq k < -1,3$ ) parametre aralıklarında ( $kT_C/zJ$ ,  $d$ ) faz diyagramları elde edildi. Alt örgü düzen parametrelerinin durumuna bakılarak modelin sergilediği faza ve faz geçiş türlerine karar verildi. Ferromanyetik etkileşimli fcc BEG modelin Cu-Au ikili alaşımında görülen üç farklı taban durumunu ( $A_3B$ ,  $AB$  ve  $AB_3$ ) sergilediği görüldü (bkz. Çizelge 2.3).



Şekil 4.18. fcc BEG modelin SQ bölgedeki faz diyagramı ve sahip olduğu taban durumlar

fcc örgü iç içe girmiş dört basit küpten oluşmaktadır. Modelin sahip olduğu taban durumlarını ve faz geçişlerini incelemek amacıyla bu dört alt örgü incelendi. Örgü özsisinin pik verdiği sıcaklığa bakılarak  $k=-3$  için ( $kT_C/zJ$ ,  $d$ ) ve  $d=-4$  için ( $kT/zJ$ ,  $k$ ) faz diyagramları elde edildi.

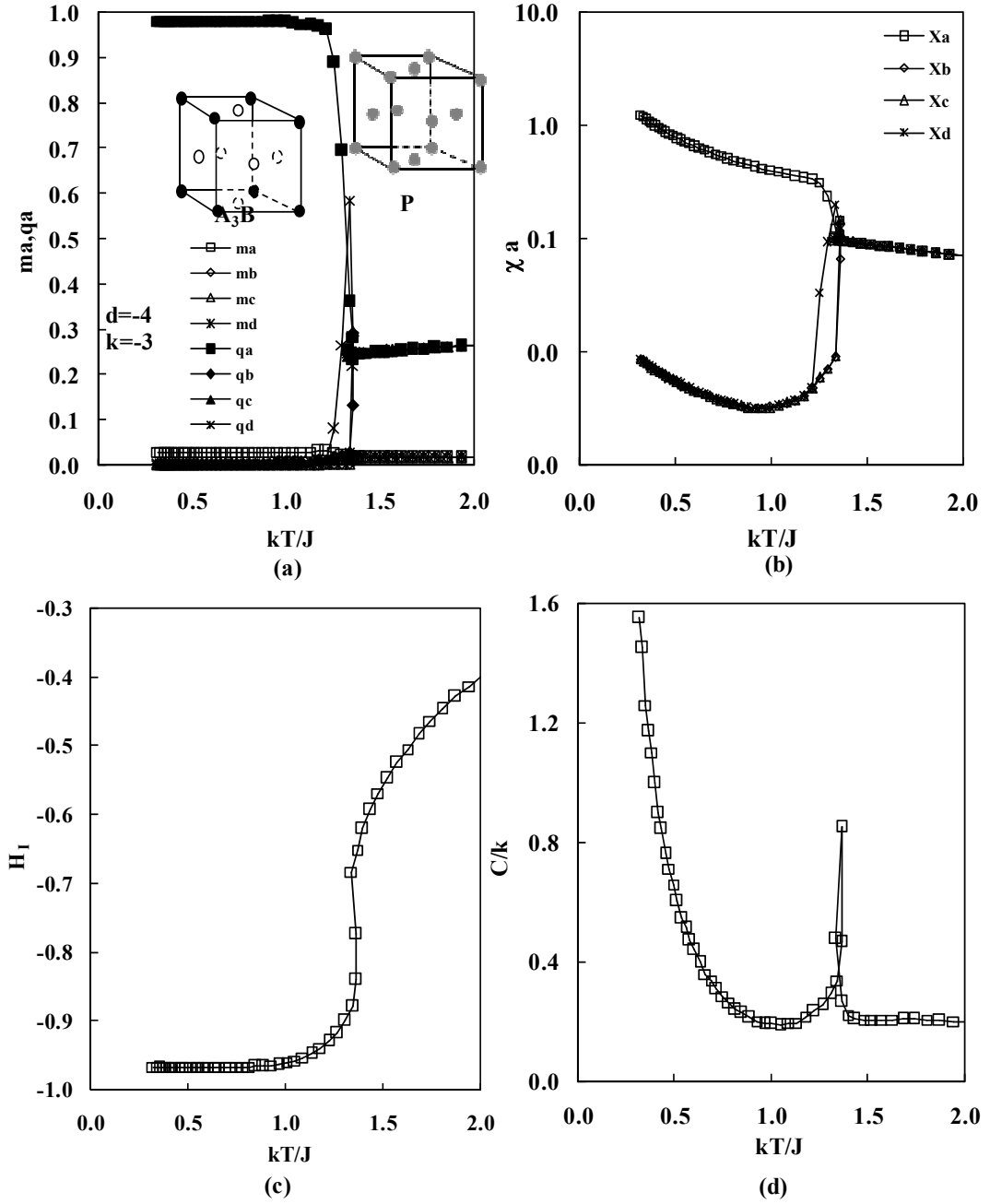
#### 4.2.1. $A_3B$ düzen bölgesinde faz geçişleri

Fcc BEG modelin karışık dört kutuplu bölgesinde ( $k=-3$ ,  $-8 < d < 0$ ) ve ( $d=-4$ ,  $k \leq -2$ ) aralıklarında, mutlak sıfırda, Cu-Au tipi ikili alaşımlarda da görülen  $A_3B(P)$  fazı ortaya çıkmaktadır. Artan sıcaklıkla beraber alt örgü momentleri ve ikinci düzen parametreleri bir araya gelerek düzenli  $A_3B$  yapıdan düzensiz paramanyetik (P) yapıya birinci derece faz geçişi yapmaktadır (Şekil 4.19.a ve b). Alt örgü düzen parametrelerindeki ( $m_a$ ,  $m_b$ ,  $m_c$ ,  $m_d$ ) dalgalanmalardan elde edilen alt örgü alınganlıkları ( $\chi_a$ ,  $\chi_b$ ,  $\chi_c$ ,  $\chi_d$ ) ve örgü özısıısı, P- $A_3B(P)$  birinci derece düzensizlik-düzen faz geçişinde birer keskin pik verirken örgü iç enerjisi ise süreksizlik sergilemektedir (Şekil 4.19.c ve d).

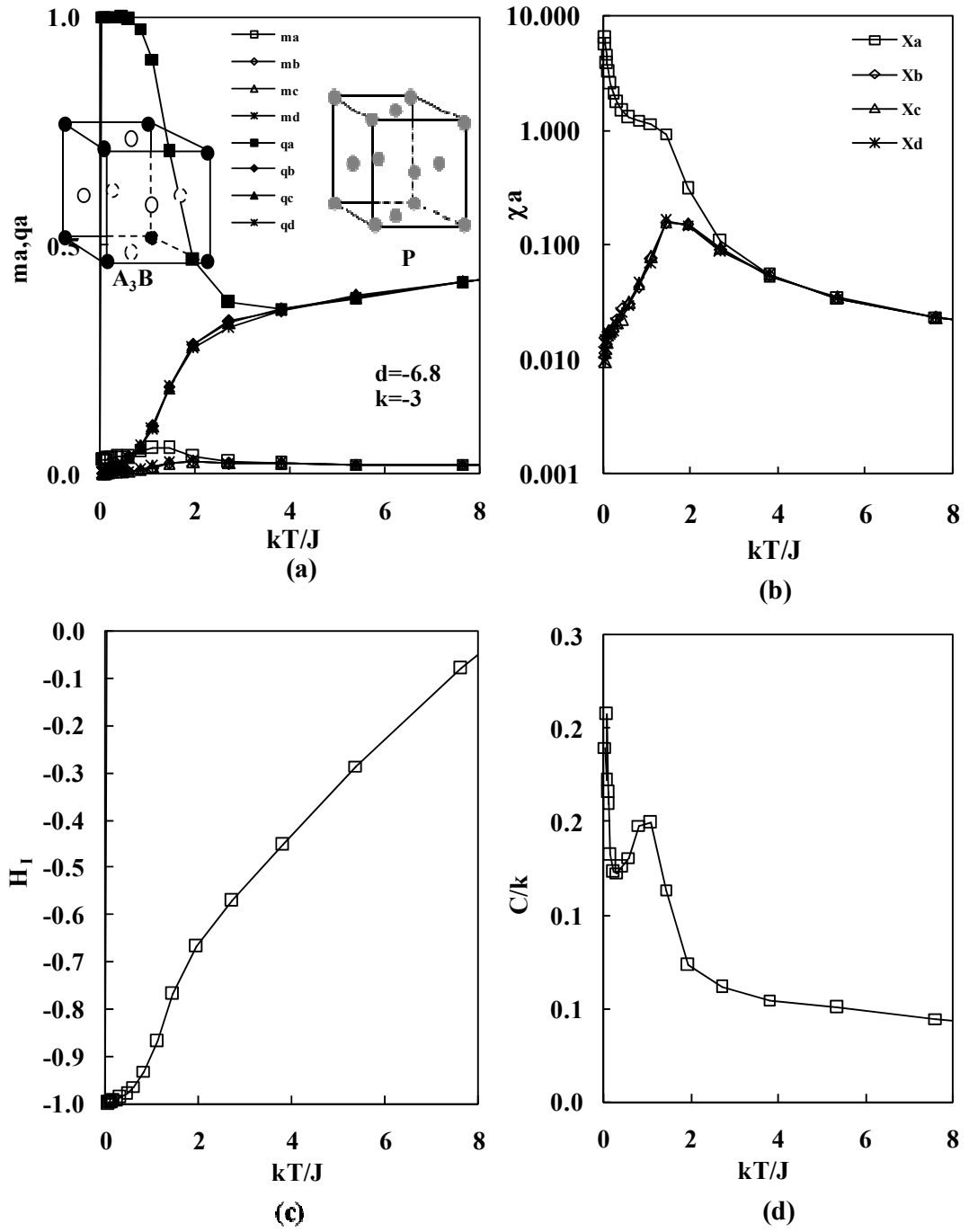
Paramanyetik (P) ve ferromanyetik (F) faz bölgeleri arasındaki ikinci derece faz geçiş eğrisi, ( $kT_C/zJ=0,104$ ;  $d=-6,8$ ) ikili kritik noktasında,  $A_3B(P)$  ve P faz bölgeleri arasındaki birinci derece faz geçiş çizgisi ve  $A_3B(P)$  ve F bölgeleri arasındaki ikinci derece faz geçiş çizgisi ile birleşmektedir.  $d=-6,8$  parametresinin alt örgü momentlerine ve örgü iç enerjisine bakıldığında P- $A_3B(P)$  faz geçişinin ikinci derece olduğu görülür. Bu duruma uygun olarak alt örgü alınganlıkları ve örgü özısıısı karakteristik pik, iç enerjisi ise sürekli değişim göstermektedir. Sonuç olarak P- $A_3B(P)$  düzensizlik-düzen faz geçişi birinci derece veya ikinci derece olabilmektedir(Şekil 4.20).

$k=-3$ ,  $d=-7,7$  parametre setinde, düşük sıcaklık bölgesinde düzen parametreleri  $A_3B(P)$  ( $m_a=m_b=m_c=m_d=0$ ;  $q_b=q_c=q_d < q_a$ ) durumundadır. Artan sıcaklıkla beraber a alt örgüsüne ait düzen parametresi diğerlerinden ayrılarak yükselmekte ve ferrimanyetik  $A_3B(f)$  ( $0=m_b=m_c=m_d < m_a$ ;  $q_b=q_c=q_d < q_a$ ) düzenine  $A_3B(f)$ - $A_3B(P)$  ikinci derece faz geçişi yapmaktadır. Alt örgü düzen parametreleri biraraya gelerek  $A_3B(f)$  ferrimanyetik düzenden ferromanyetik (F) düzene F- $A_3B(f)$  ve ferromanyetik düzenden paramanyetik düzene P-F ikinci derece faz geçişleri yapmaktadır. Alt örgü alınganlıklarına ve örgü özısıısına bakıldığında ikinci derece P-F-  $A_3B(f)$ - $A_3B(P)$  faz geçişlerine uygun olarak üç karakteristik pike sahiptir (Şekil 4.21). Diğer taraftan

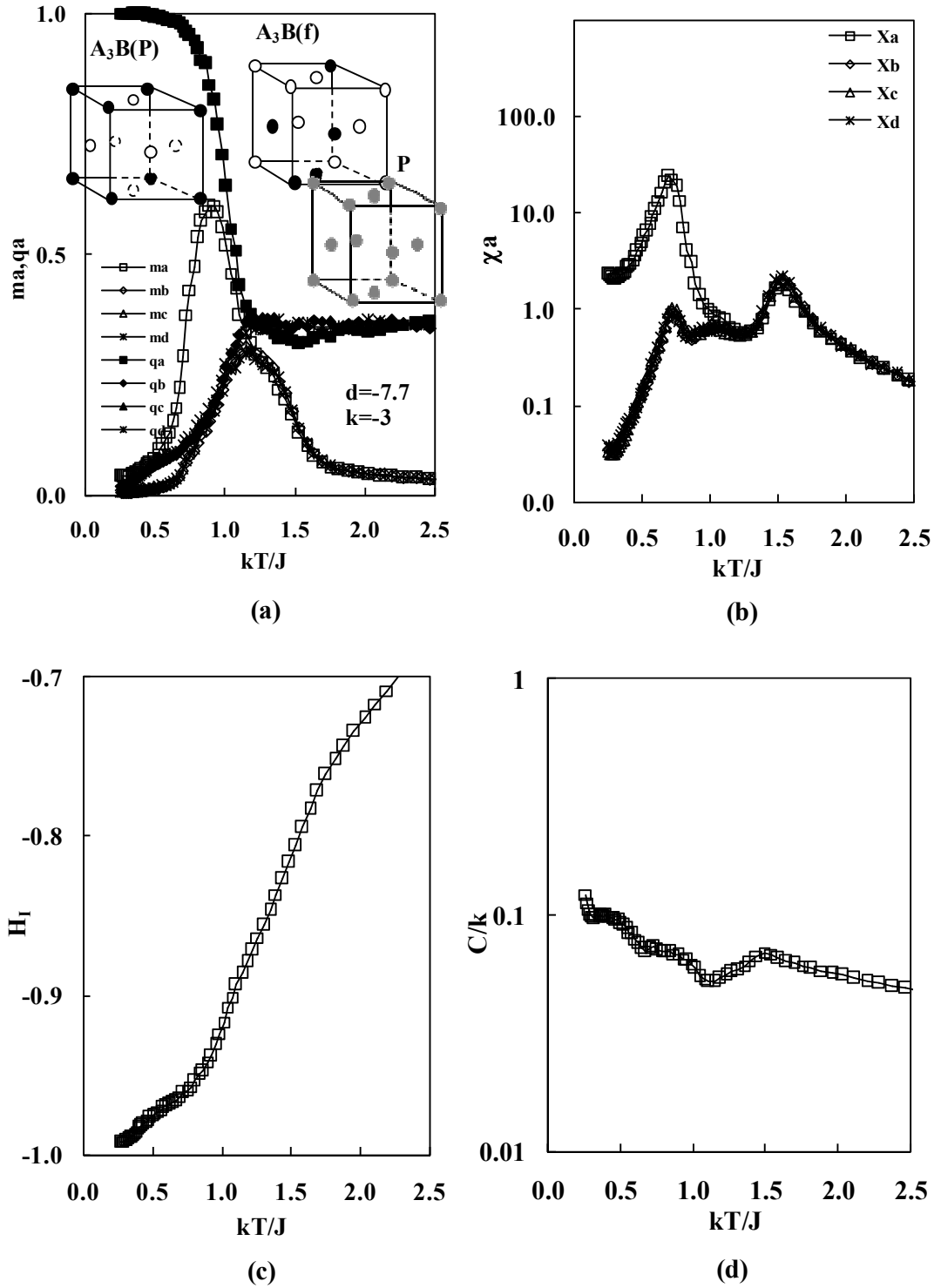
örgü iç enerjisi sürekli faz geçişlerine uygun olarak üç sürekli büküm noktasına sahiptir.



Şekil 4.19.  $A_3B$  taban durumlu bölgede ( $d=-4, k=-3$ ) için ; a) alt örgü momentleri ve ikinci düzen parametrelerinin, b) alt örgü momentlerinin alınganlığının, c) örgü iç enerjisinin ve d) örgü özısıısının sıcaklıkla değişimi



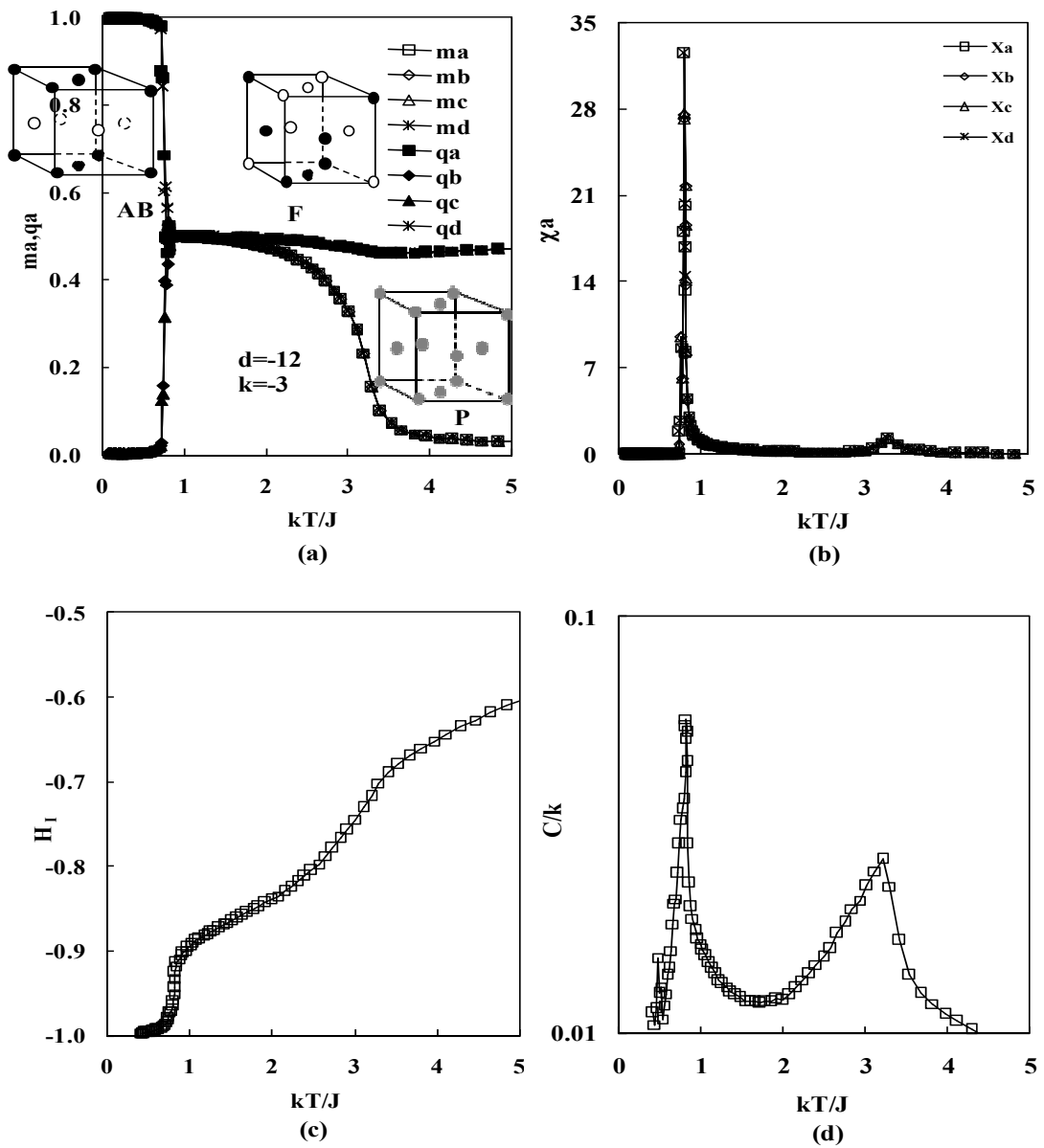
Şekil 4.20.  $A_3B$  taban durumlu bölgede ( $d=-6,8$ ,  $k=-3$ ) için ; a) alt örgü momentleri ve ikinci düzen parametrelerinin, b) alt örgü alınganlığının, c) örgü iç enerjisinin ve d) örgü özısıısının sıcaklıkla değişimi



Şekil 4.21.  $A_3B$  taban durumlu bölgede ( $d=-7,7$ ,  $k=-3$ ) için ; a) alt örgü momentleri ve ikinci düzen parametrelerinin, b) alt örgü alınganlığının, c) örgü iç enerjisinin ve d) örgü özısıısının sıcaklıkla değişimi

#### 4.2.2. AB düzen bölgesinde faz geçişleri

Model ( $k=-3$ ,  $-16 < d < -8$ ) ve ( $d=-4$ ,  $-2 < k \leq -1,5$ ) aralığında, mutlak sıfırda,  $AB(f)$  fazındadır. Bu aralıkta fcc örgüyü oluşturan dört alt örgünün durumu  $m_a=m_d > m_b=m_c$ ;  $q_a=q_d > q_b=q_c$  dır. Artan sıcaklıkla beraber alt düzen parametreleri ( $m_a, m_b, m_c, m_d$ ) ve ( $q_a, q_b, q_c, q_d$ ) kendi aralarında bir araya gelerek düzenli  $A_3B(f)$  yapıdan düzensiz ferromanyetik (F) faza, ferromanyetik (F) fazdan



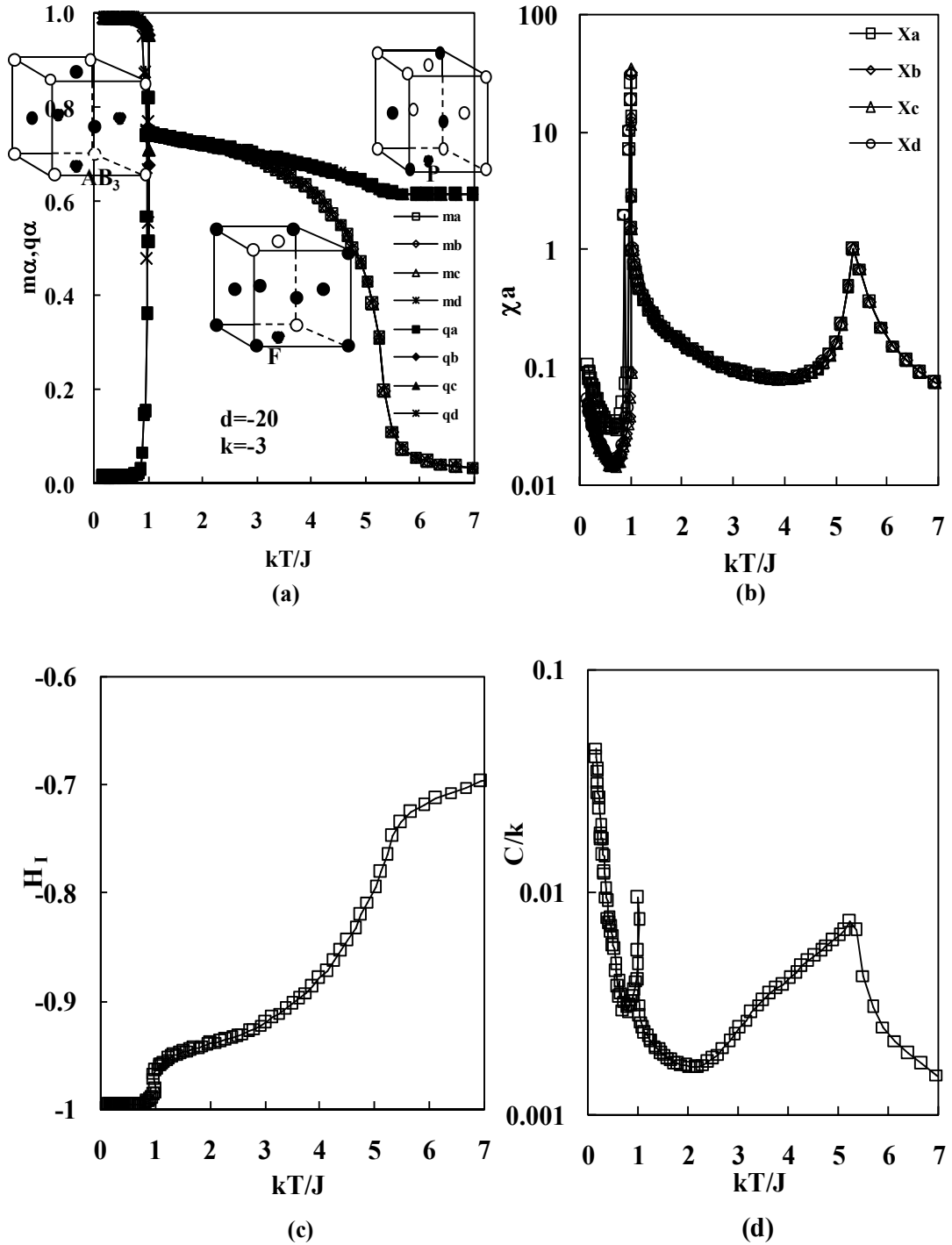
Şekil 4.22. AB taban durumlu bölgede ( $d=-12$ ;  $k=-3$ ) için ; a) alt örgü momentleri ve ikinci düzen parametrelerinin, b) alt örgü alınganlığının, c) örgü iç enerjisinin ve d) örgü özısıısının sıcaklıkla değişimi

paramanyetik (P) faza geçiş yapmaktadır (Şekil 4.22.a). Alt örgü düzen parametreleri ve örgü iç enerjisindeki süreksizliğe bakılarak ( $k=-3$ ,  $-16 < d < -8$ ) ve ( $d=-4$ ,  $-1,9 < k < -1,7$ ) aralığında  $F-A_3B(f)$  geçişinin birinci derece olduğuna karar verilmiştir.  $d=-4$  için  $-2 \leq k \leq -1,9$  ve  $-1,7 \leq k \leq -1,5$  aralıklarında yapılan hesaplamalar modelin bu aralıklarda  $F-A_3B(f)$  faz geçişlerinin ikinci derece olarak sergilediğini göstermiştir. ( $k=-3$   $-16 < d < -8$ ) ve ( $d=-4$ ,  $-2 < k \leq -1,5$ ) parametre aralıklarında  $P-F$  faz geçişlerinin ikinci derece olduğu görülmüştür. Şekil 4.22' de  $k=-3$  ve  $d=-12$  parametre seti için yapılan hesaplamaların sonuçları görülmektedir. Alt örgü düzen parametreleri ve örgü iç enerjisi  $AB(f)$  ferrimanyetik yapıdan ferromanyetik yapıya gerçekleşen birinci derece faz geçişinde süreksizlik, ferromanyetik fazdan paramanyetik faza gerçekleşen ikinci derece faz geçişinde ise süreklilik sergilemektedir. Alt örgü alinganlığı ve örgü özısıısı, ferromanyetik yapıdan  $AB$  yapıya ( $F-AB$ ) birinci derece düzen-düzensizlik faz geçişinde birer keskin pik, ferromanyetik yapıdan paramanyetik yapıya ( $P-F$ ) ikinci derece faz geçişinde ise birer karakteristik pik sergilemektedir.

#### 4.2.3. $AB_3$ düzen bölgesinde faz geçişleri

Model ( $k=-3$ ,  $-24 < d < -16$ ) ve ( $d=-4$ ,  $-1,5 < k \leq -1,3$ ) aralığında, mutlak sıfırda,  $AB_3(f)$  fazındadır. Artan sıcaklıkla beraber alt örgü momentleri ( $m_a, m_b, m_c, m_d$ ) ve ikinci düzen parametreleri ( $q_a, q_b, q_c, q_d$ ) bir araya gelerek  $AB_3(f)$  düzenli yapısından ferromanyetik (F) düzensiz yapıya, ferromanyetik (F) yapıdan da paramanyetik (P) yapıya  $P-F-AB_3(f)$  faz geçişleri gerçekleştirmektedir. Alt örgü düzen parametreleri ve örgü iç enerjisine bakıldığında bu niceliklerin ( $k=-3$ ,  $-24 < d < -16$ ) ve ( $d=-4$ ,  $-1,45 < k \leq -1,3$ ) aralığında  $F-AB_3(f)$  faz geçişinde süreksiz,  $P-F$  faz geçişinde ise sürekli davrandığı görüldü. Böylece  $F-AB_3(f)$  faz geçişinin birinci dereceden,  $P-F$  faz geçişinin ikinci dereceden olduğuna karar verildi (Şekil 4.23.a ve 4.23.c). ( $d=-4$ ,  $-1,5 \leq k \leq -1,45$ ) aralığında ise  $F-AB_3(f)$  faz geçişi ikinci derecedendir. Şekil 4.23' te  $k=-3$  ve  $d=-20$  için yapılan hesaplamalar görülmektedir. Alt örgü düzen parametresi ve örgü iç enerjisindeki dalgalanmalardan elde edilen alt örgü alinganlık ve örgü özısıısı,  $F-AB_3(f)$  birinci derece düzen-

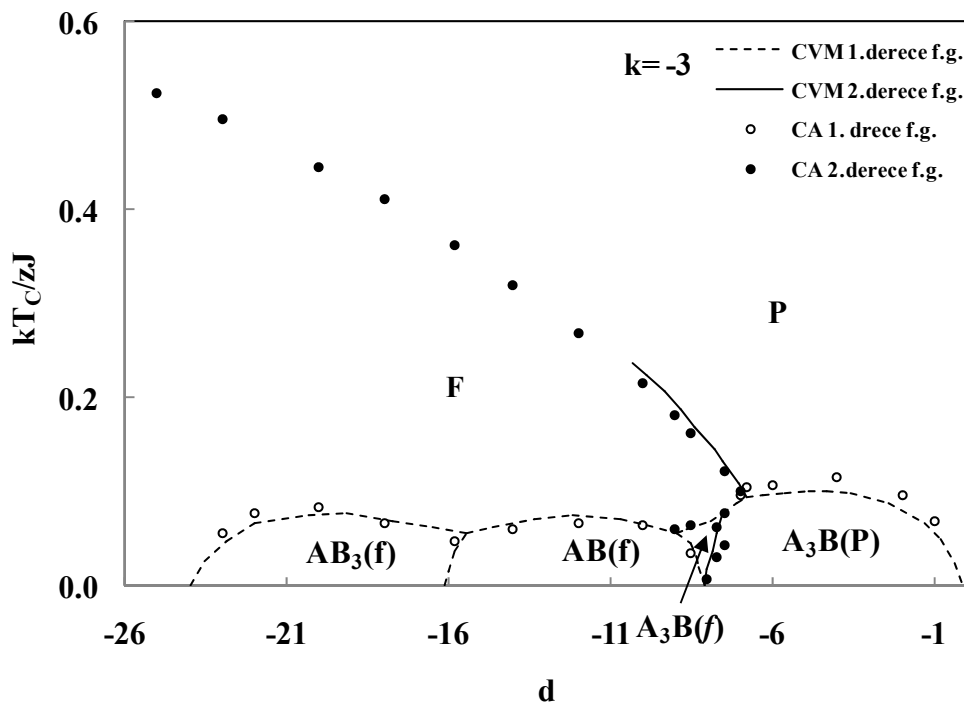
düzensizlik faz geçişine karşılık birer keskin pike sahiptir. P-F ikinci derece faz geçişinde ise alt örgü alınganlık ve örgü özısısı birer karakteristik pike sahiptir.



Şekil 4.23.  $AB_3$  taban durumlu bölgede ( $d=20$ ,  $k=3$ ) için ; a) alt örgü momentleri ve ikinci düzen parametrelerinin, b) alt örgü alınganlığının, c) örgü iç enerjisinin ve d) örgü özısısının sıcaklıkla değişimi

#### 4.2.4. Karışık dört kutuplu bölgede faz diyagramları

Ferromanyetik BEG modelin antiferromanyetik Potts modele karşılık geldiği  $k=-3$  değeri için  $-24 \leq d \leq 0$  aralığında  $(kT_C/zJ, d)$  faz diyagramı elde edildi (Şekil 4.24). Modelin  $-8 < d \leq 0$ ,  $-16 < d < -8$  ve  $-24 < d < -16$  aralıklarında Cu-Au tipi ikili alaşımlarda görülen  $A_3B(P)$ ,  $A_3B(f)$ ,  $AB(f)$  ve  $AB_3(f)$  taban durumlarının var olduğu

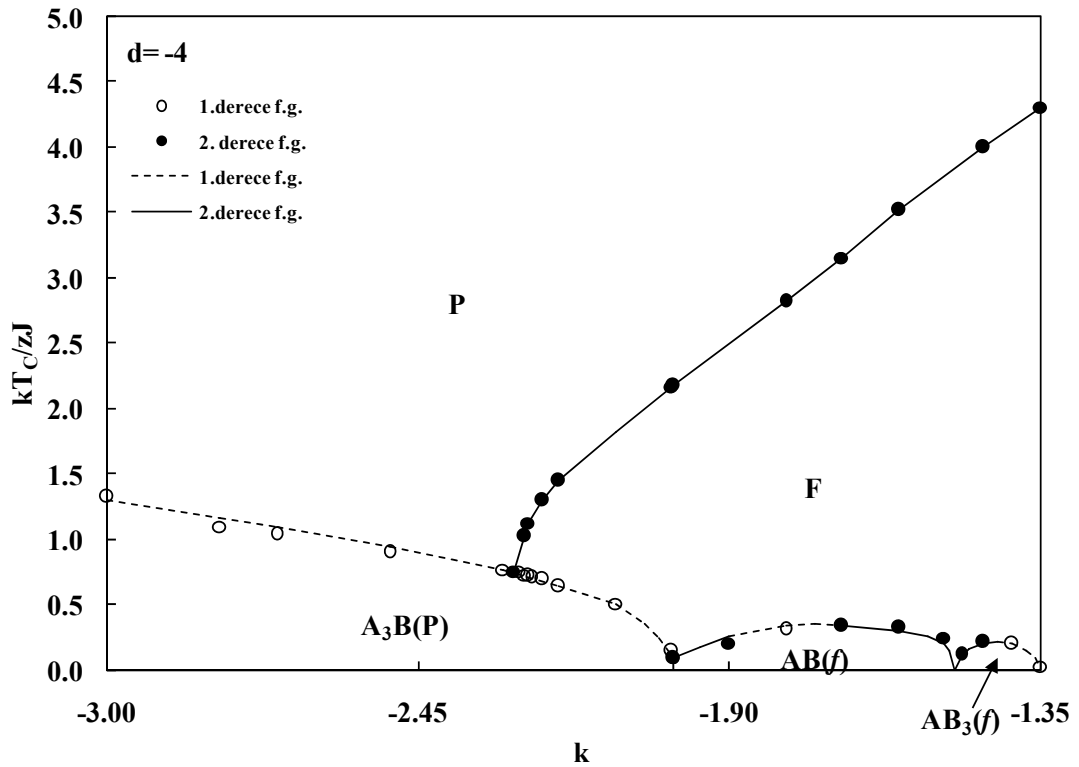


Şekil 4.24.  $k=-3$  için  $(kT_C/J, d)$  faz diyagramı. Sürekli çizgiler ve dolu simgeler ikinci derece faz geçişlerini, kesikli çizgiler ve boş simgeler birinci derece faz geçişlerini temsil eder. Kesikli ve sürekli çizgiler CVM tespitleridir

görüldü.  $AB(f)$  ve  $AB_3(f)$  düzenden ferromanyetik düzene geçilen  $F-AB(f)$  ve  $F-AB_3(f)$  faz geçişlerinin ve  $AB_3(f)-AB(f)$  faz geçişlerinin birinci derece, ferromanyetik düzenden paramanyetik düzene geçilen  $P-F$  faz geçişlerinin ikinci derece olduğu görüldü. Ferrimanyetik ve paramanyetik kısımlara ayrılan  $A_3B$  bölgede ise  $P-A_3B(P)$ ,  $F-AB(f)$  ve  $F-AB_3(f)$  faz geçişleri birinci derece,  $F-A_3B(f)$  ve  $A_3B(f)-A_3B(P)$  faz geçişleri ise ikinci derece olarak elde edildi. Tespit edilen faz geçiş türleri ve sıcaklık değerleri CVM [9] ile yapılan tespitlerle  $F-A_3B(f)$  faz geçişlerinin türü dışında uyum

içerisindedir. CVM tarafından birinci derece olarak sunulan  $F-A_3B(f)$  faz geçişleri CA ile yaptığımız incelemeler sonucunda ikinci derece olarak elde edildi. P-F ve  $F-AB_3(f)$  kritik çizgisinin  $A_3B(P)$  birinci derece faz geçiş çizgi ile birleştiği “ikili kritik nokta” değeri ( $d=-6,8$ ;  $kT_C/zJ=0,105\pm 0,03$ ) CVM’ nin tahmin ettiği “kritik son nokta” değeri ile uyumludur.

Şekil 4.25’ te ise  $d=-4$  için  $(kT_C/zJ, k)$  faz diyagramı görülmektedir.  $-3 \leq k \leq -1,35$  aralığında elde edilen faz diyagramı da  $k=-3$  için elde edilen faz

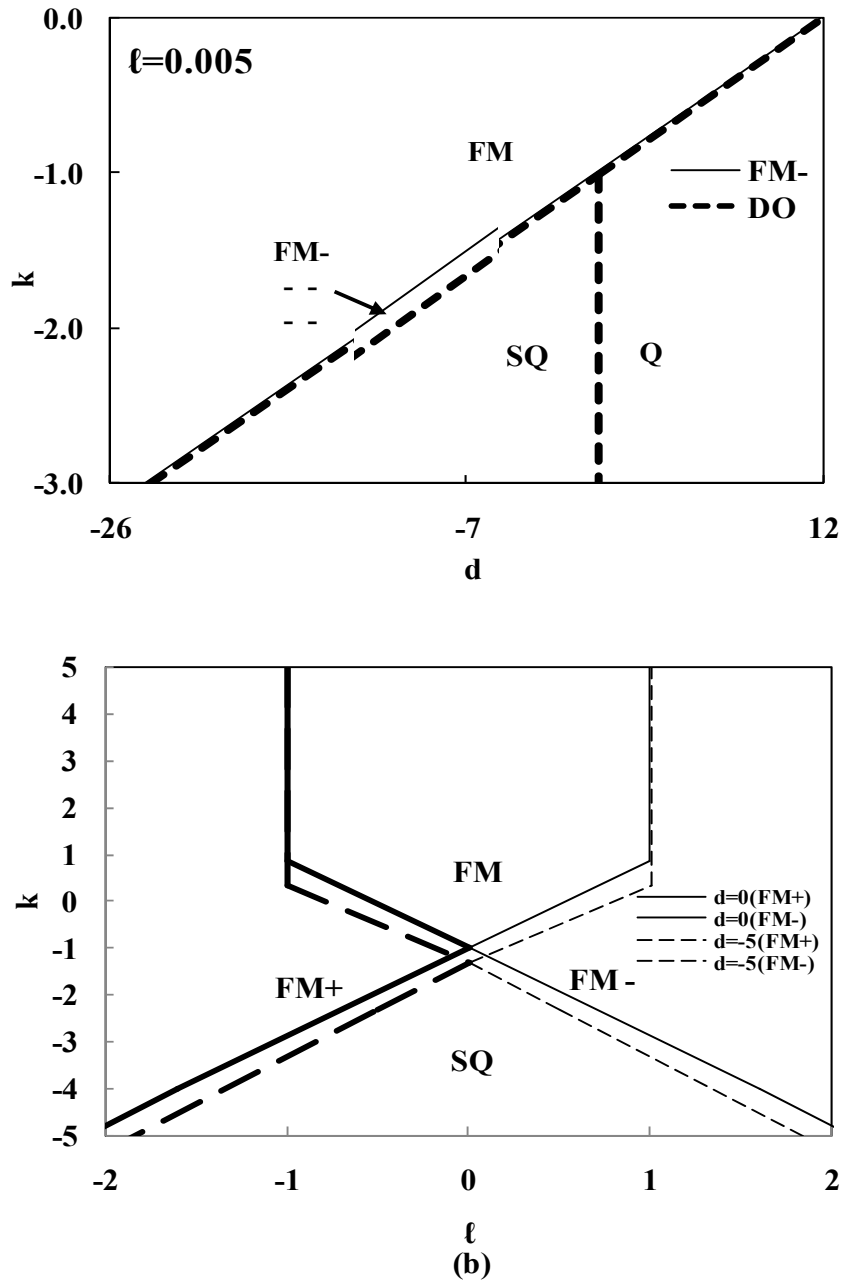


Şekil 4.25.  $d=-4$  için  $(kT_C/zJ, k)$  faz diyagramı. Sürekli çizgiler ikinci derece faz geçişlerini, kesikli çizgiler birinci derece faz geçişlerini temsil eder

diyagramında olduğu gibi  $A_3B(P)$ ,  $AB(f)$  ve  $AB_3(f)$  düzenler içermektedir.  $d=-4$  faz diyagramında  $k=-3$  faz diyagramından farklı olarak  $AB$  bölgenin  $A_3B(P)$ - $AB(f)$  ve  $AB(f)$ - $AB_3(f)$  faz sınırları civarında ve  $AB_3(f)$  bölgenin  $AB(f)$ - $AB_3(f)$  faz sınırı civarında faz geçişlerinin ikinci derece olmasıdır. P-F kritik çizgisinin  $A_3B(P)$  bölgesinin birinci derece faz geçiş çizgisi üzerinde sonlanmasıyla  $k=-2,28$ ;  $kT_C/zJ=0,76\pm 0,02$  değerlerinde kritik son nokta meydana gelmektedir. ( $k=-1,9$ ;

$kT_C/zJ=0,26\pm 0,02$ ); ( $k=-1,70$ ;  $kT_C/zJ=0,34\pm 0,02$ ) ve ( $k=-1,45$ ;  $kT_C/zJ=0,21\pm 0,02$ ) noktalarında faz geçiş türünün değişerek üçlü kritik nokta meydana getirdiği tahmin edilmektedir.

#### 4.3. fcc Blume Emery Griffiths Modelin Faz Uzayı Üzerinde Çift Kutup-Dört Kutup Etkileşmenin Etkisi



Şekil 4.26. Taban durum faz diyagramları; a)  $l=0,005$  için  $k$ - $d$  faz diyagramı, b)  $d=0$  ve  $-5$  için  $k$ - $l$  faz diyagramı

fcc BEG modelde çift kutup-dört kutup etkileşim parametresi  $\ell$ ' nin; faz geçişleri, faz diyagramları ve özel noktalar üzerindeki etkisini belirlemek amacı ile  $\ell=0,005$  için  $k$ - $d$  faz diyagramı ve  $d=0$  ve  $-4$  için  $k$ - $\ell$  taban durum faz diyagramları elde edildi.  $\ell=0,005$  için elde edilen  $k$ - $d$  faz diyagramında,  $\ell=0,000$ ' dan farklı olarak, ferromanyetik (F)-karışık dört kutuplu (SQ) bölgeler arasında ve ferromanyetik F-sıfır düzenli (Q) bölgeler arasında tüm spinlerin aşağı (-1) olduğu ara bir bölgenin varlığı tespit edildi.  $\ell=0,000$ ' da buna benzer bir ara faz bölgesi görülmemektedir. İlk olarak, kritik son nokta üzerinde çift kutup-dört kutup etkileşimin etkisi araştırmak amacıyla faz uzayı üzerindeki ferromanyetik bölgede  $k=-0,9$  ve  $\ell=0,005$  değerleri için hesaplamalar yapılarak ( $kT/zJ$ ,  $d$ ) faz diyagramı elde edildi. Diğer taraftan SQ bölgede  $d=-4$  için elde edilen faz uzayı üzerinde, faz sınırlarına yakın bölgelerde;  $\ell=0,005$ ,  $k=-1,3$  ve  $k=-3$  için çift kutup-dört kutup etkileşimin etkisine bakıldı.

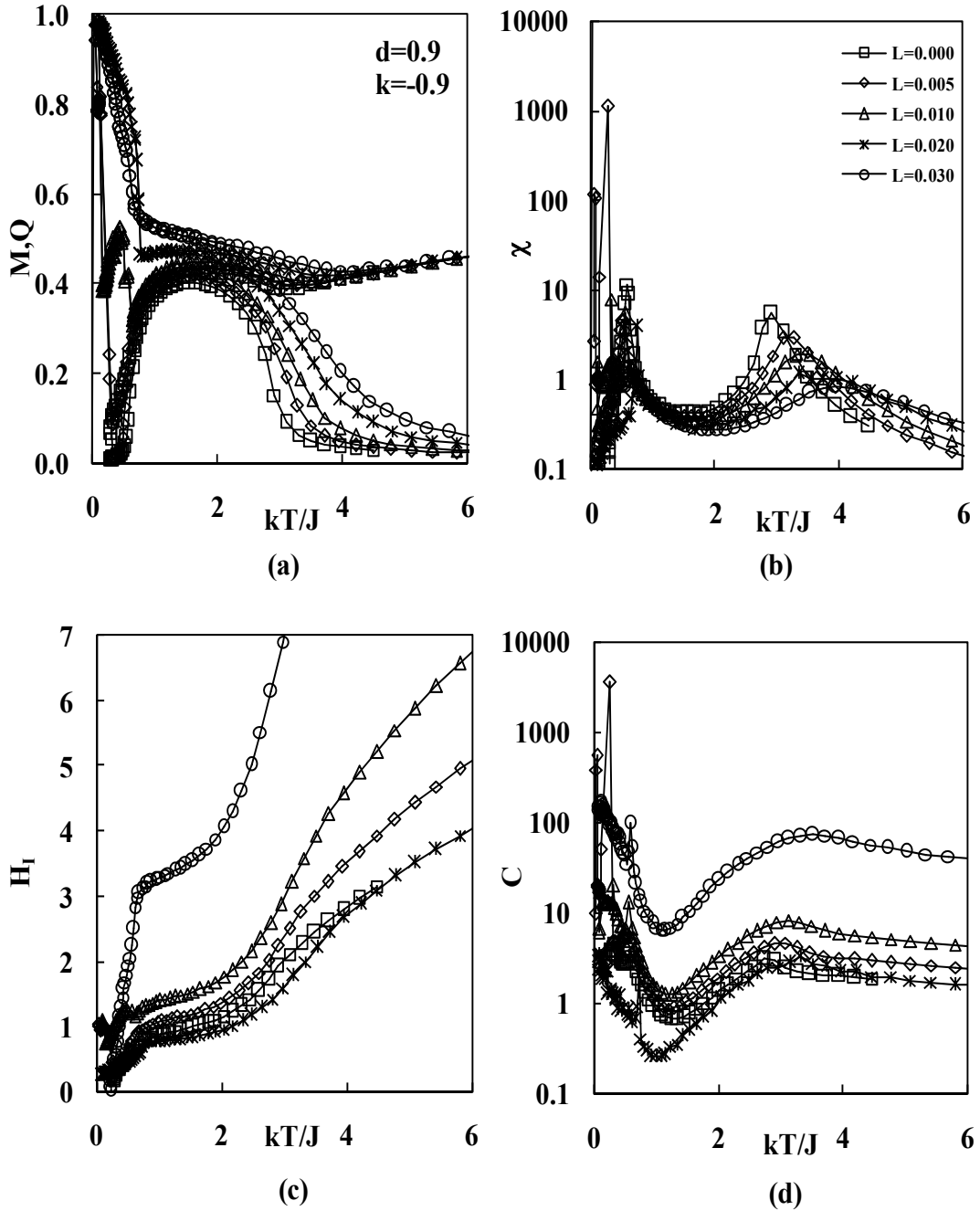
Ferromanyetik ve SQ bölgelerde çift kutup-dört kutup ( $\ell$ ) etkileşimin faz geçişleri ve özel noktalar üzerindeki etkisi incelendi.  $k=-0,9$  için; ( $kT/zJ$ ,  $\pm\ell$ ) faz diyagramı elde edildi. SQ bölgede  $\ell$ ' nin sonlu örgü ölçekleme üzerindeki etkisi  $L=4, 6, 8, 9$  ve  $12$  kenar uzunluklu örgüler için incelendi. Karışık dört kutuplu bölgede fazları ve faz geçişlerini ifade edebilmek amacıyla alt örgü düzen parametreleri takip edilmiştir.

#### 4.3.1. Ferromanyetik bölgede çift kutup-dört kutup ( $\ell$ ) etkileşimin etkisi

##### Çift kutup-dört kutup ( $\ell$ ) etkileşimin faz geçişleri üzerindeki etkisi

Ferromanyetik bölgede ( $k=-0,9$ ;  $d=0,9$ ) parametre setinde faz geçişlerinde  $\ell$ ' nin etkisi incelendi.  $\ell=0$  için bu parametre setinde, düzen parametreleri ve iç enerjiye bakıldığında, tekrarlayan  $P$ - $f$ - $a$  ikinci derece faz geçişi görüldü. Bu faz geçişlerine karşılık olarak alınganlık ve özısı ise iki karakteristik pik sergilemektedir.  $\ell=0,005$  değeri için tekrarlayan  $P$ - $f$ - $a$  faz geçişleri çift tekrarlayan  $P$ - $f$ - $a$ - $f$  faz geçişlerine dönüşmektedir. Düzen parametreleri ve iç enerji çift tekrarlayan  $P$ - $f$ - $a$ - $f$  faz geçişlerinin düşük sıcaklık bölgesindeki  $a$ - $f$  faz geçişinde süreksizlik  $P$ - $f$ - $a$  faz

geçişlerinde süreklilik sergiler. Alınanlık ve özısı ise bu geçişlere karşılık bir keskin iki karakteristik pike sahiptir. Çift kutup-dört kutup etkileşiminin  $\ell=0,01$  değerinde

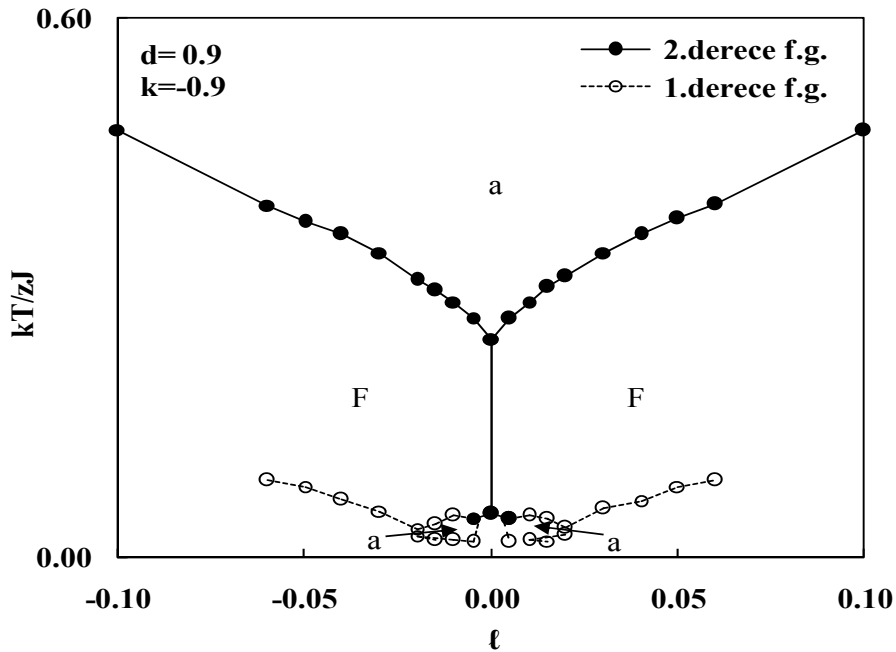


Şekil 4.27. Çift kutup-dört kutup etkileşim parametresi  $\ell$ 'nin  $k=-0,9$  için  $d=0,9$ ' da görülen faz geçişleri üzerindeki etkisi. a) düzen parametreleri, b) alınanlık, c) iç enerji, d) özısı

model çoklu  $P-f-f-a-f$  faz geçişi sergiler. Çoklu faz geçişinin  $f-f$  ve düşük sıcaklık bölgesindeki  $a-f$  faz geçişleri birinci derece diğer geçişler ise ikinci derecedir. Düzen

parametreleri ve iç enerji birinci derece faz geçişlerinde süreksiz diğer geçişlerde sürekli görünürken alınganlık ve özısı iki keskin iki karakteristik pike sahiptir.  $\ell=0,02$ ' den itibaren model ardışık  $P-f-f$  faz geçişleri sergiler.  $\ell=0,02$ ' de  $f-f$  faz geçişi birinci derece,  $\ell=0,03$ ' de ikinci derece iken  $P-f$  faz geçişleri her iki değer için de ikinci derecedir. Alınganlık ve özısı niceliklerine bakıldığında birinci derece geçişler için keskin ikinci derece geçişler için karakteristik pike sahip oldukları görülür (Şekil 4.27).

Pozitif  $\ell$  çift kutup-dört kutup etkileşim teriminin varlığı tekrarlayan  $P-f-a$  faz geçişinin çift tekrarlayan  $P-f-a-f$  faz geçişlerine değişmesine neden olmuştur. Tekrarlayan  $P-f-a$  faz geçişinde başlangıçta tüm spinler sıfır (0)' dır.  $\ell$ ' nin 0,005 gibi küçük bir değeri spinlerin -1' e değişmesine neden olmaktadır. Bu nedenle faz geçişi çift tekrarlayan  $P-f-a-f$  faz geçişine değişmektedir.  $\ell=0,01$  için çift kutup-dört kutup etkileşimin spinleri +1 olmaya zorlaması faz geçişini çoklu  $P-f-f-a-f$  faz geçişine değiştirmektedir.  $\ell=0,015$  için ise spinler üzerindeki +1 olma baskısı sistemin ardışık faz geçişi yapmasına neden olmaktadır.



Şekil 4.28. ( $k=-0,9$ ;  $d=0,9$ ) parametre setinde  $\ell$ 'nin pozitif ve negatif değerleri için ( $kT_c/zJ$ ,  $\ell$ ) faz diyagramı. Sürekli çizgiler ikinci derece faz geçişlerini, kesikli çizgiler birinci derece faz geçişlerini işaret eder

Şekil 4.28' de  $\ell'$  nin pozitif ve negatif değerleri için ( $k=-0,9$ ;  $d=0,9$ ) parametre setindeki faz geçişleri incelenmiş ve ( $kT_C/zJ$ ,  $\ell$ ) faz diyagramı elde edilmiştir.

Yapılan incelemeler sonucunda  $\ell'$  nin işaretinin faz geçişleri ve kritik sıcaklıklar üzerinde etkisi olmadığı görülmüştür ( $\ell \leftrightarrow -\ell$ ).

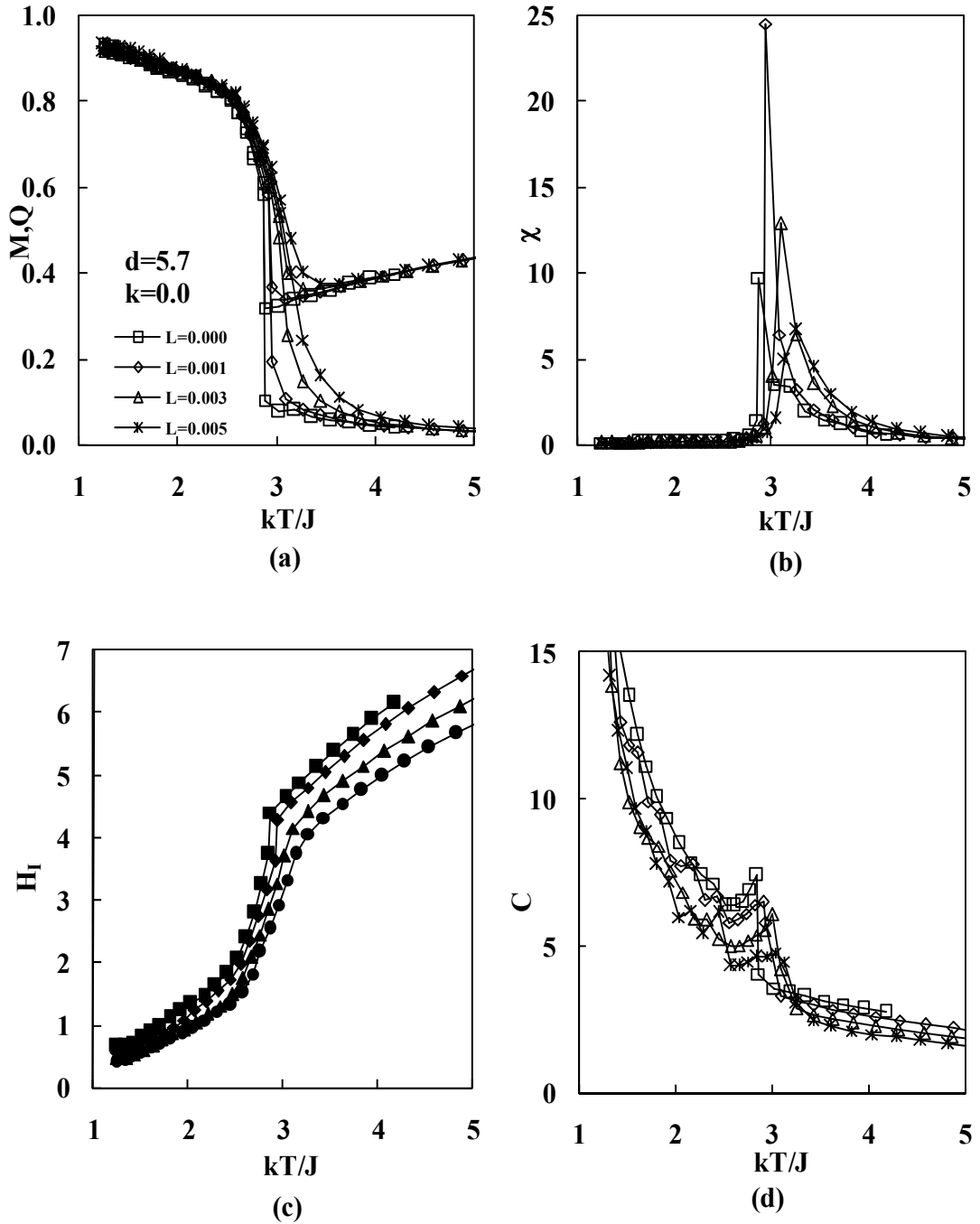
### 4.3.2. Çift kutup-dört kutup ( $\ell$ ) etkileşimin özel noktalar üzerindeki etkisi

Çalışmanın bu kısmında çift kutup-dört kutup ( $\ell$ ) etkileşimin fcc BEG modelin sahip olduğu; üçlü kritik nokta, ikili kritik nokta ve kritik son nokta üzerindeki etkisi araştırıldı.

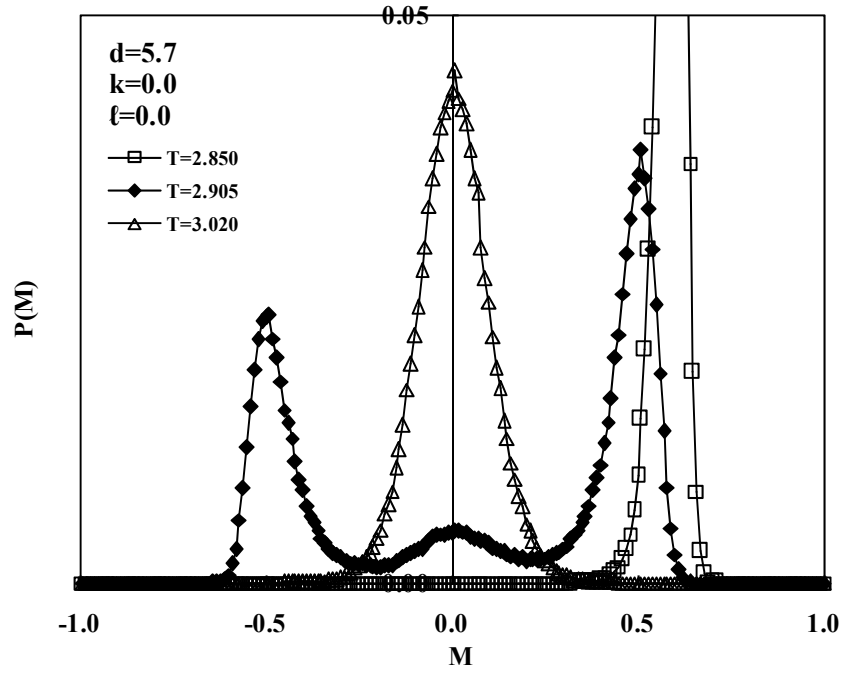
#### Çift kutup-dört kutup ( $\ell$ ) etkileşimin üçlü kritik nokta üzerindeki etkisi

fcc Blume-Emery-Griffiths (BEG) model ( $kT_C/zJ$ ,  $d$ ) faz diyagramında  $k=0$  parametresi için  $d=5,7$ ' de sahip olduğu üçlü kritik nokta üzerinde  $\ell'$  nin etkisi incelendi.  $\ell=0,000$ ;  $0,001$ ;  $0,003$  ve  $0,005$  değerleri için yapılan hesaplamalar  $\lambda \geq 0,003$  için birinci derece faz geçişinin ikinci derece faz geçişine dönüştüğü, kritik sıcaklığın ise  $\ell$  değeri ile birlikte arttığı görüldü. Bu değişim düzen  $\delta$ -fonksiyonu singülerliğine sahip keskin pikin karakteristik pike dönüşmesiyle gözlenir (Şekil 4.29). Şekil 4.30.' de ise  $\ell'$  nin faz geçiş derecesi üzerindeki etkisi düzen parametresinin olasılık dağılımı ile takip edilebilir.  $\ell=0$  durumunda kritiğin altında düzenli yapıya karşılık gelen tek pik, kritik sıcaklık civarında birinci derece faz geçişinin karakteristik özelliği olan düzenli ve düzensiz fazın bir arada bulunmasını işaret eden üç pike dönüşmektedir. Tam kritik sıcaklıkta üç pik aynı yükseklikte elde edilmektedir. Kritiğin üstünde ise  $M=0$ ' da düzensiz fazı temsil eden tek pike dönüşür (Şekil 4.30.a). Kritik noktada  $\ell=0,000$ ;  $0,001$ ;  $0,003$  için olasılık dağılımına bakıldığında, faz geçiş derecesinin değişimini yansıtabilecek şekilde geliştiği görülmektedir.  $\ell=0,000$ ' da birinci derece faz geçişinin üç pikli yapısı görülmektedir.  $\ell=0,001$ 'de de üç pikli yapı,  $\ell$  etkileşiminin pozitif değerleri tüm spinlerin  $-1$  olduğu ferromanyetik düzenlenimin tercih edilmesine neden olduğu için,  $M>0$  bölgesindeki düzenli duruma karşılık gelen pik ortaya çıkmamaktadır.  $\ell=0,003$ '

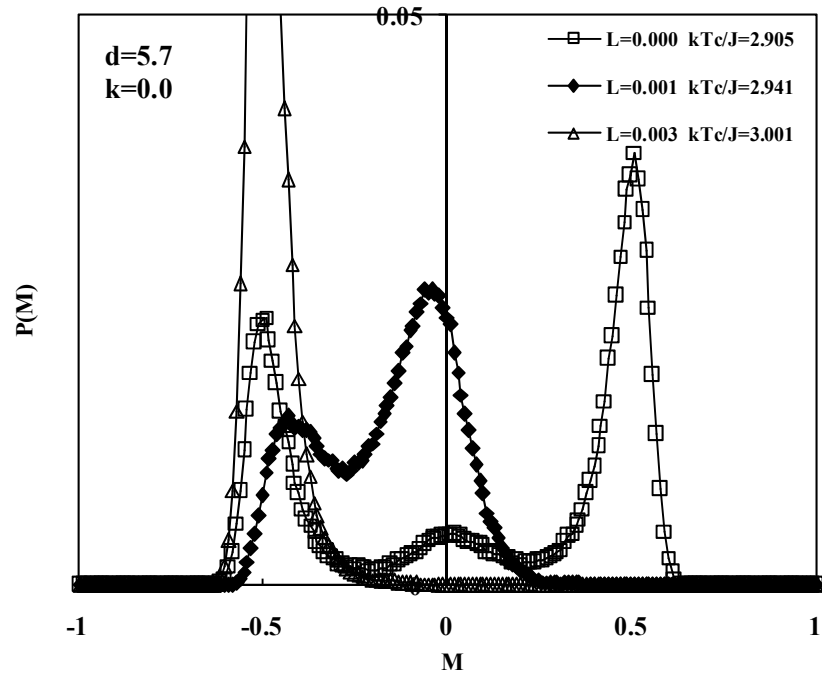
de ise olasılık dağılımı ikinci derece faz geçişini işaret eden iki pikli yapıdadır. Fakat  $\ell'$ 'nin varlığı nedeniyle  $M>0$  bölgesindeki pik ortaya çıkmamaktadır. Pozitif  $\ell$  çift



Şekil 4.29. Çift kutup-dört kutup etkileşim parametresi  $\ell'$ 'nin  $k=0$  için  $d=5,7$ ' de görülen üçlü kritik nokta üzerindeki etkisi. a) düzen parametreleri, b) alınganlık, c) iç enerji, d) özısı



(a)



(b)

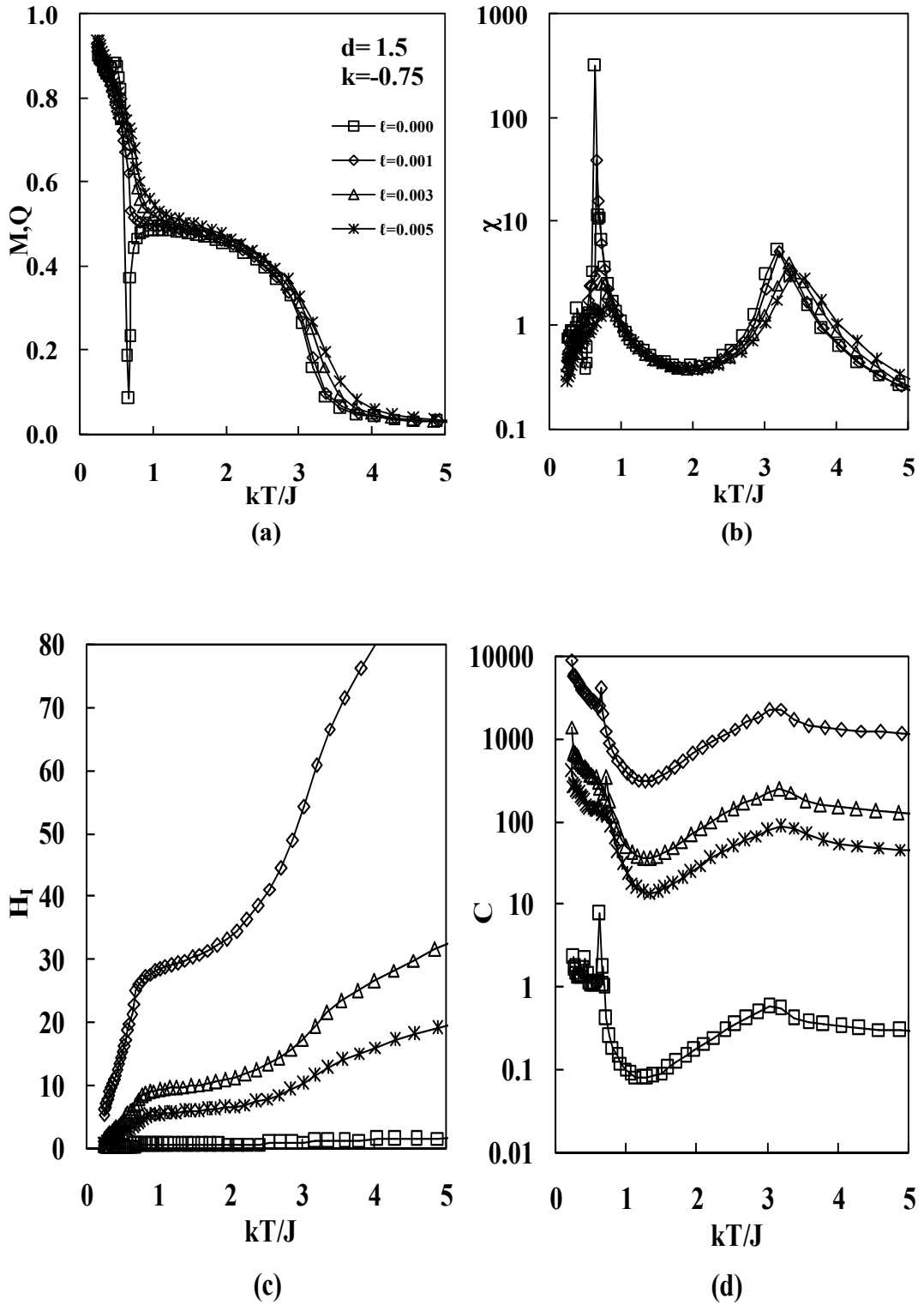
Şekil 4.30.  $k=0$  için  $d=5,7$  de görülen üçlü kritik noktada; a)  $l=0,000$  için, b) kritik noktada  $l=0,000$ ;  $0,001$  ve  $0,003$  için olasılık dağılımı

kutup-dört kutup etkileşim teriminin  $M>0$  bölgesindeki piklerin ortaya çıkmamasına neden olması dış manyetik alan içerisindeki spinlerin alanla aynı yönde yönelmeye zorlanmasına benzemektedir. Bu durum  $\ell$ 'nin spin sistem üzerinde dış alana benzer bir etki yaptığını düşündürmektedir.

#### Çift kutup-dört kutup ( $\ell$ ) etkileşimin ikili kritik nokta üzerindeki etkisi

Ferromanyetik bölgede ( $k=-0,75$ ;  $d=1,5$ ) parametre setinde, iki kritik sıcaklık eğrisinin birleşmesiyle, ortaya çıkan ikili kritik nokta  $\ell$ 'nin etkisi açısından incelendi.  $\ell=0,000$ 'de, düşük sıcaklık bölgesindeki ve ortadaki faz geçişinin birinci derece, yüksek sıcaklık bölgesindeki geçişin ikinci derece olduğu çift tekrarlayan  $P-f-a-f$  faz geçişi görülmektedir. Bu faz geçişi yerini  $\ell$ 'nin küçük bir değeri ile ( $\ell=0,001$ ) düşük sıcaklık bölgesindeki faz geçişi birinci derece olan ardışık  $P-f-f$  faz geçişine bırakmaktadır.  $\ell$ 'nin artan değeri ile beraber ardışık faz geçişinin düşük sıcaklık bölgesindeki birinci derece faz geçişi ikinci derece faz geçişine dönüşmektedir.  $\ell=0,000$ ' da görülen  $P-f-a-f$  faz geçişlerinde düzen parametreleri ve iç enerji düşük sıcaklıkta gerçekleşen birinci derece faz geçişini yansıtabilecek şekilde süresizdir. Alınganlık ve özısıda ise bir keskin iki karakteristik pik ortaya çıkmaktadır.  $\ell=0,001$  için ise, düzen parametreleri ve iç enerji ardışık  $P-f-f$  faz geçişlerinin  $f-f$  kısmında süresizlik a-f kısmında ise süreklilik gösterirken alınganlık ve özısıda bir keskin bir de karakteristik pike sahiptir.  $\ell=0,003$ ' ten itibaren düzen parametreleri ve iç enerjide görülen ardışık  $P-f-f$  ardışık faz geçişlerinin  $f-f$  kısmındaki süresizlik yerini sürekli ikinci derece faz geçişine bırakırken alınganlık ve özısıda görülen keskin pik yerini karakteristik pike bırakmaktadır (Şekil 4.31).

$\ell$ 'nin 0,001 gibi küçük bir değerinin dahi çift tekrarlayan faz geçişini ardışık faz geçişine değiştirmesi spin düzenlenimi üzerindeki etkisinden kaynaklanmaktadır. -1 değerli spinlerin ortaya çıkmasını baskılayan pozitif  $\ell$ , çift tekrarlayan  $P-f-a-f$  faz geçişlerindeki iki düzen arasındaki düzensiz fazı ortadan kaldırmaktadır. Böylece  $P-f-f$  faz geçişleri gerçekleşmektedir.



Şekil 4.31.  $l'$  nin  $k=-0,75$   $d=1,5$  parametre setindeki bikritik nokta üzerindeki etkisi.  
a) Düzen parametreleri, b) alınganlık, c) iç enerji, d) özısı

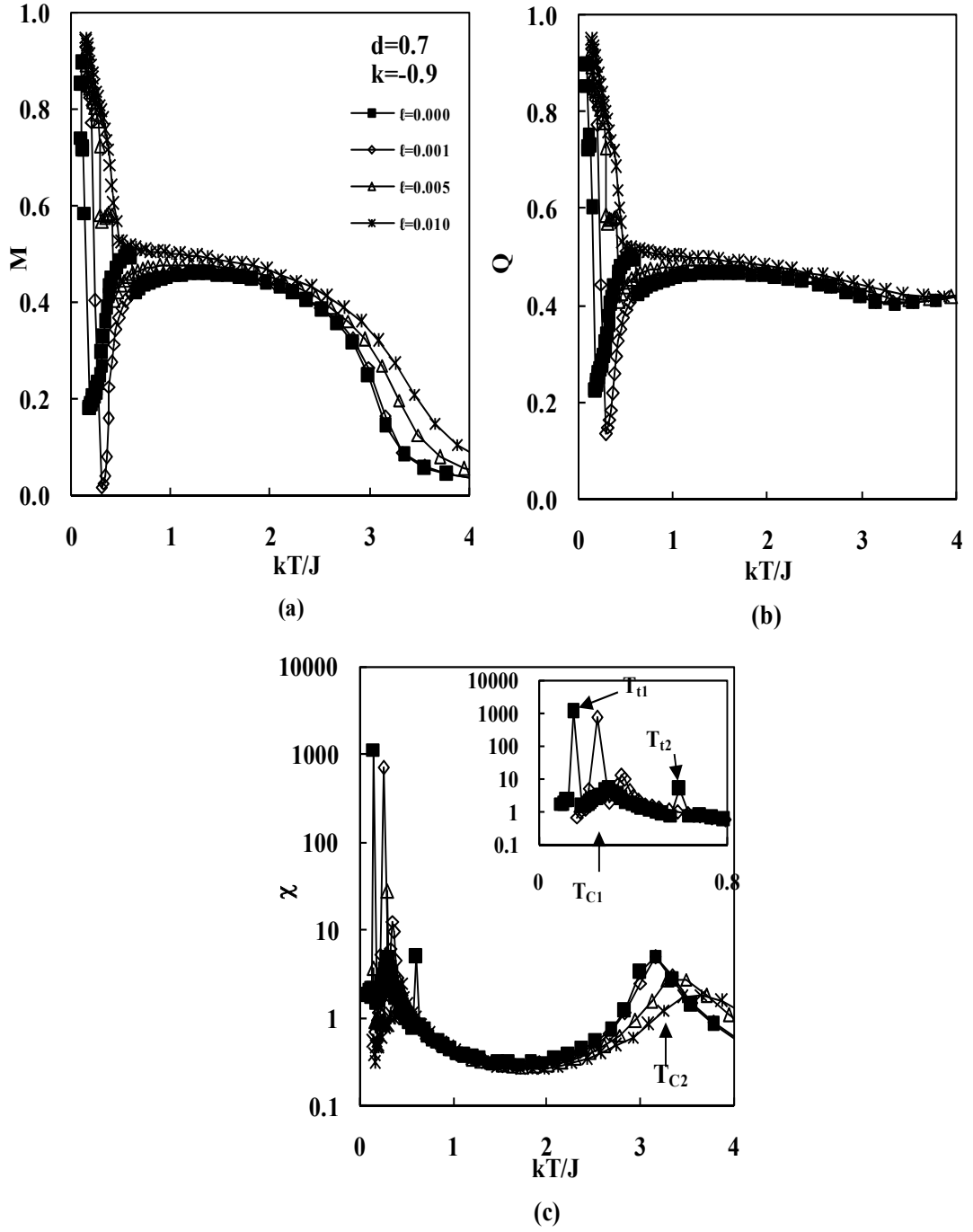
### Çift kutup-dört kutup ( $\ell$ ) etkileşimin kritik son nokta üzerindeki etkisi

Ferromanyetik bölgede kritik sıcaklık eğrisinin birinci derece faz geçiş eğrisi üzerinde sona erdiği ( $k=-0,9$ ;  $d=0,7$ ) parametre setinde ortaya çıkan kritik nokta  $\ell'$  nin etkisi açısından incelendi.  $\ell=0,000$ 'de görülen çoklu  $P-f-f-a-f$  faz geçişi  $\ell=0,001$  değerinde çift tekrarlayan  $P-f-a-f$  faz geçişine,  $\ell=0,005$  değerinde çoklu  $P-f-f-f$  faz geçişine,  $\ell=0,01$  değerinde ise  $P-f-f$  ardışık faz geçişine dönüşmektedir.  $\ell=0,000$ 'de düzen parametreleri ve iç enerjiye bakıldığında düşük sıcaklık bölgesindeki  $a-f$  faz geçişi ve  $f-f$  faz geçişinin süreksiz, diğer geçişlerin sürekli olduğu, çoklu  $P-f-f-a-f$  faz geçişi görülmektedir. Alınganlık ve özısı ise iki keskin iki karakteristik pik görülmektedir.

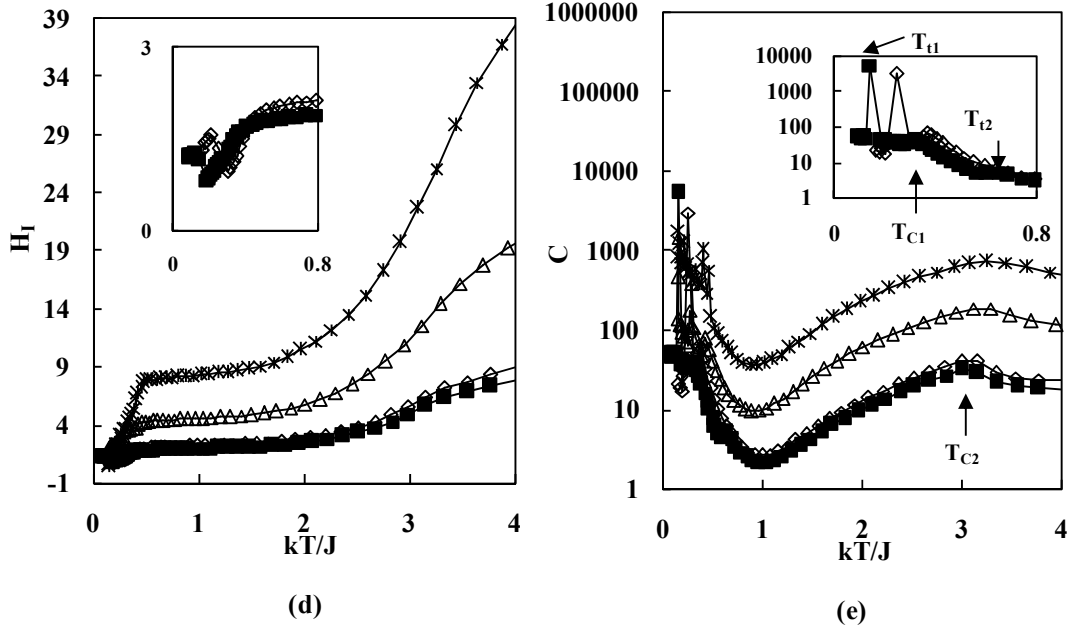
Çift kutup-dört kutup etkileşim parametresinin  $\ell=0,001$  değerinde görülen çift tekrarlayan  $P-f-a-f$  faz geçişinde düzen parametresi ve iç enerji düşük sıcaklık bölgesindeki  $a-f$  faz geçişinde süreksizlik diğer geçişlerde süreklilik gösterirken alınganlık ve özısı bir keskin iki karakteristik pike sahiptir.

$\ell=0,005$  değerinde görülen çoklu  $P-f-a-f$  faz geçişinde düzen parametresi ve iç enerji  $a-f$  faz geçişinde süreklilik diğer geçişlerde süreksizlik gösterir. Alınganlık ve özısı ise bir karakteristik iki keskin pik sergiler.  $\ell=0,01$ ' de düzen parametresi ve iç enerji ard arda iki sürekli faz geçişi sergilerken alınganlık ve öz ısı iki karakteristik pike sahiptir (Şekil 4.32).

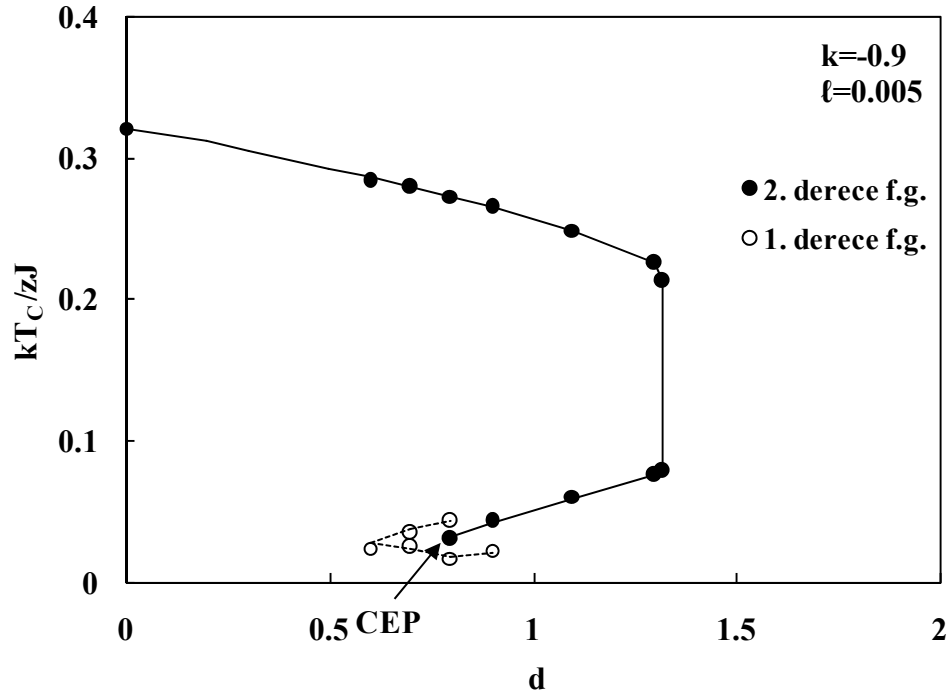
Genel olarak bakıldığında,  $\ell'$  nin artan değeriyle alınganlık ve özısı daha yüksek sıcaklıklarda pik verirken pik yapılarının da genişlediği görülmektedir. Pozitif  $\ell$  değeri -1 değerli spinleri baskılayarak çoklu  $P-f-f-a-f$  faz geçişini çift tekrarlayan  $P-f-a-f$  faz geçişine, bufa geçişini de, ( $k=-0,75$ ;  $d=1,5$ ) parametre setinde olduğu gibi, ardışık  $P-f-f$  faz geçişlerine değiştirmektedir.



Şekil 4.32.  $\epsilon'$  nin ( $k=-0,9$ ;  $d=0,7$ ) parametre setindeki kritik son nokta üzerindeki etkisi. a) Düzen parametreleri, b) alınganlık, c) iç enerji, d) özısı



Şekil 4.32' nin devamı  $\ell'$  nin ( $k=-0,9$ ;  $d=0,7$ ) parametre setindeki kritik son nokta üzerindeki etkisi. a) Düzen parametreleri, b) alınganlık, c) iç enerji, d) ÖZİSİ



Şekil 4.33. ( $k=-0,9$ ;  $\ell=0,005$ ) için ( $kT_C/zJ$ ,  $d$ ) faz diyagramı. Sürekli çizgiler ikinci derece faz geçişini, kesikli çizgiler ise birinci derece faz geçişini temsil eder

$\ell=0,000$  değerinde görülen çoklu  $P-f-f-a-f$  faz geçişinin  $\ell=0,005'$  te çift tekrarlayan  $P-f-a-f$  faz geçişine değişmesi  $k=-0,9$  değeri için elde edilen  $(kT_C/zJ, d)$  faz diyagramında kritik son noktanın  $d=0,7'$  den  $d=0,8'$ e değişmesine neden olmaktadır. Faz diyagramında  $\ell'$  nin varlığına bağlı olarak kritik sıcaklık eğrileri de yüksek sıcaklıklara kaymaktadır (Şekil 4.33).

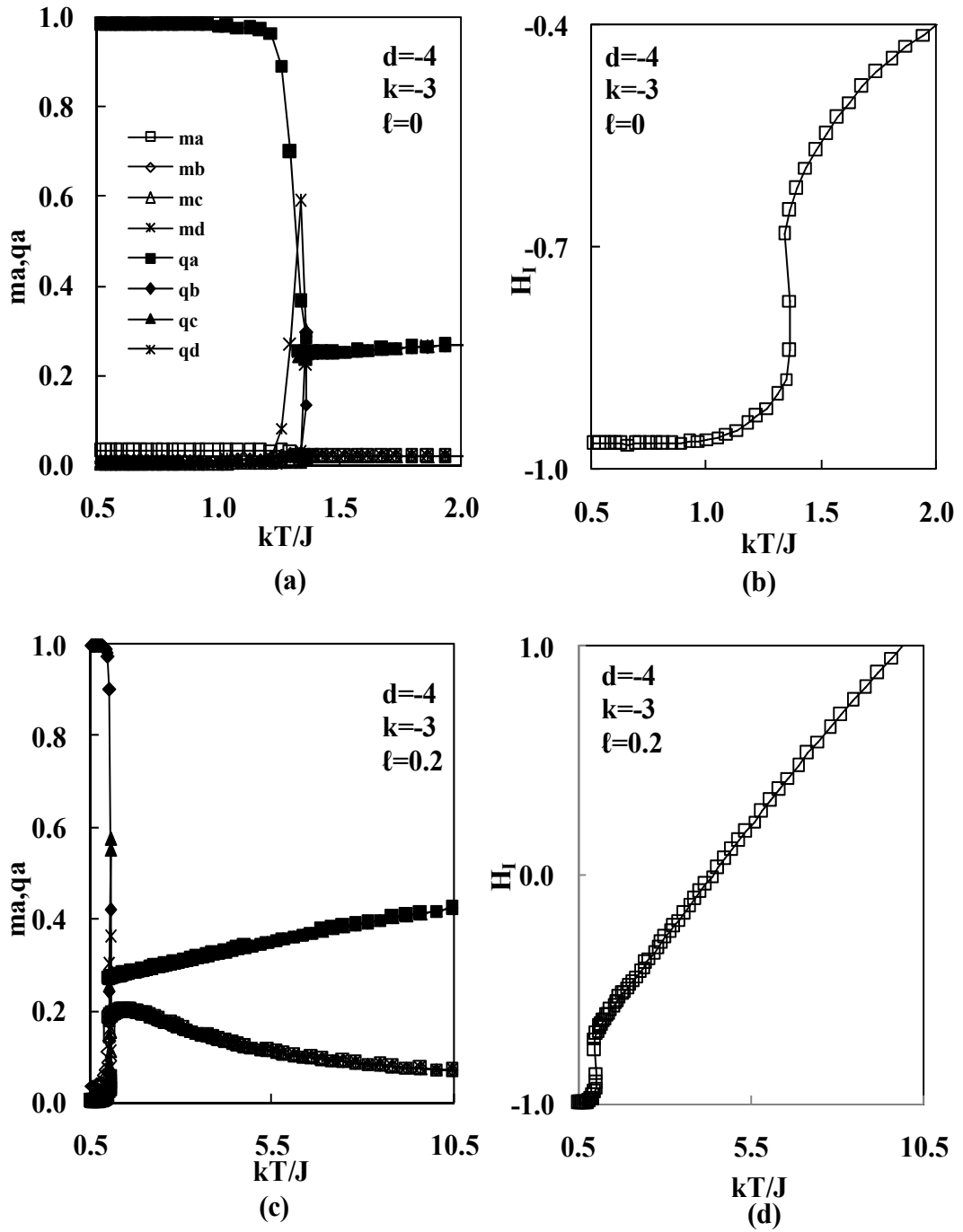
### 4.3.3. Karışık dört kutuplu bölgede çift kutup-dört kutup ( $\ell$ ) etkileşimin etkisi

CuAu tipi ikili alaşımlarda görülen  $A_3B$ ,  $AB$  ve  $AB_3$  düzenlerinin ortaya çıktığı kademeli kuadrupolar bölgede  $-3 \leq k < -1$  ve  $-24 \leq d < 0$  aralıklarında yapılan hesaplamalarda çift kutup-dört kutup etkileşimin faz geçişleri ve ölçeklemeler üzerindeki etkisine bakıldı.

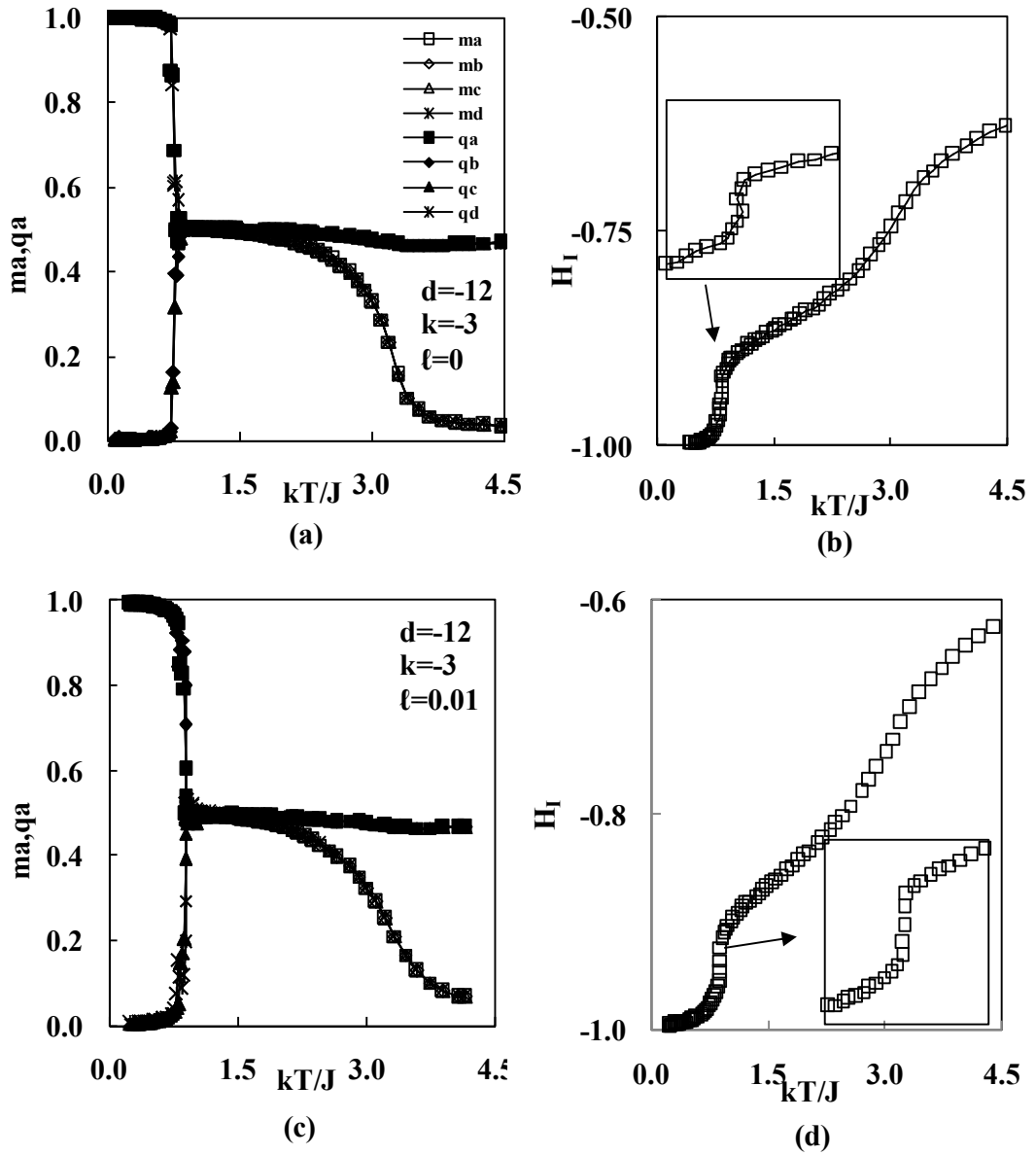
#### Çift kutup-dört kutup ( $\ell$ ) etkileşimin faz geçişleri üzerindeki etkisi

$A_3B$  bölgede yer alan  $d=-4$ ,  $k=-3$  parametre setinde çift kutup-dört kutup etkileşimin  $0 \leq \lambda \leq 0,2$  değerleri için  $\ell'$  nin etkisine bakıldı.  $\ell=0$  için düzen parametreleri birinci derece  $F-A_3B$  faz geçişine uygun olarak s-şekilli süreksizlik sergilerken iç enerji  $\delta$ -fonksiyonu iraksamasına sahiptir. Çift kutup-dört kutup etkileşimin  $\ell=0,2$  gibi daha büyük bir değerinde de düzen parametreleri ve iç enerji s-şekilli süreksizlik sergilemektedir. Bu  $\ell'$  nin  $0 \leq \lambda \leq 0,2$  aralığında  $A_3B$  bölgede faz geçişi türü üzerinde etkili olmadığını göstermektedir. Yüksek sıcaklık bölgesinde ise herhangi bir büküm noktasına sahip olmayan iç enerji lineer olarak artmakta bu da faz geçişi olmadığını göstermektedir.

$d=-12$ ,  $k=-3$  parametre setinde görülen faz geçişleri  $\ell'$  nin etkisi açısından incelendi.  $0 \leq \lambda \leq 0,01$  değerleri için yapılan hesaplamalarda modelin P-F-AB faz geçişleri yaptığı görüldü. F-AB faz geçişi  $\ell'$  nin incelenen tüm değerleri için birinci derece iken P-F faz geçişi ikinci derecedir. Dolayısıyla  $\ell'$  nin  $0 \leq \lambda \leq 0,01$  aralığında faz geçiş türü üzerinde etkisi yoktur.



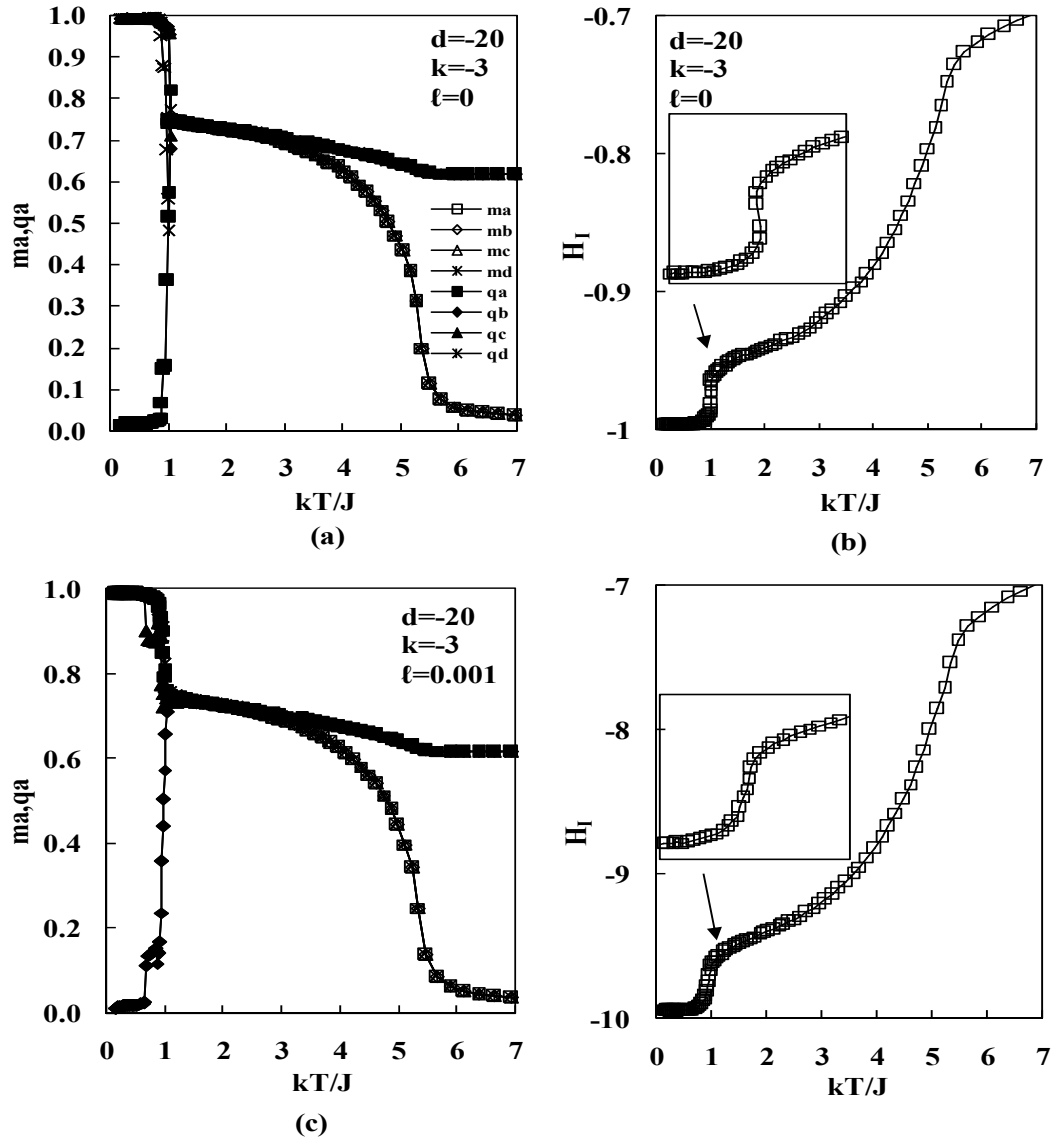
Şekil 4.34.  $\ell$ ' nin  $d=-4$ ,  $k=-3$  parametre setinde faz geçişi üzerindeki etkisi.  $\ell =0$  için a) düzen parametreleri ve b) iç enerji;  $\ell =0,2$  için c) düzen parametreleri ve d) iç enerji



Şekil 4.35.  $l$ ' nin  $d=-12$ ,  $k=-3$  parametre setinde faz geçişi üzerindeki etkisi.  $l=0$  için a) Düzen parametreleri ve b) iç enerji;  $l=0,2$  için c) düzen parametreleri ve d) iç enerji

$AB_3$  bölgedeki  $d=-20$ ,  $k=-3$  parametre setinde gerçekleşen P-F- $AB_3$  faz geçişleri üzerinde  $l$ ' nin etkisine bakıldı.  $l=0,000$  için birinci derece olan F- $AB_3$  faz geçişinin  $l=0,001$ ' de alt örgü düzen parametreleri süreklilik, örgü özısıısı ise karakteristik pike sahiptir. Bu nedenle  $l$ ' nin,  $AB_3$  bölgede faz geçiş türünü değiştirdiği söylenebilir.

$\ell=0,001$  gibi küçük bir değerde ikinci dereceye dönüştüğü görüldü.  $\ell=0,000$  için düzen parametreleri s-şekilli süreksizlik, özısı  $\delta$ -fonksiyonu ıraksaması sergilerken  $\ell=0,001$ ' de alt örgü düzen parametreleri süreklilik, örgü özısı ise karakteristik pike sahiptir. Bu nedenle  $\ell$ ' nin,  $AB_3(f)$  bölgede faz geçiş türünü değiştirdiği söylenebilir.



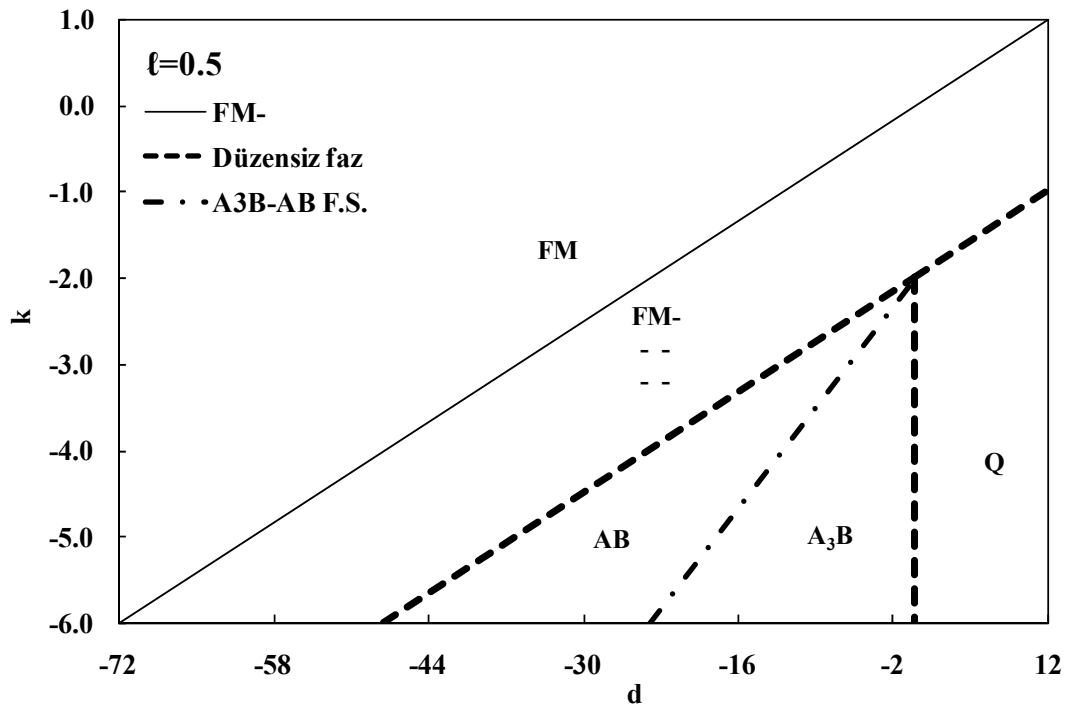
Şekil 4.36.  $\ell$ ' nin  $d=-20$ ,  $k=-3$  parametre setinde faz geçişi üzerindeki etkisi.  $\ell =0$  için a) düzen parametreleri ve b) iç enerji;  $\ell =0,001$  için c) düzen parametreleri ve d) iç enerji

$A_3B$  bölgede alt örgülerden üçü sadece "0", biri sadece " $\pm 1$ ", AB bölgede alt örgülerden ikisi sadece "0", ikisi sadece " $\pm 1$ ",  $AB_3$  bölgede alt örgülerden biri sadece

“0”, üçü sadece “ $\pm 1$ ” değerli spinlerle doludur. Bu nedenle spinleri “-1” olmaya zorlayan pozitif değerli  $\ell$ 'nin spin düzenlenimleri üzerinde etkisi bulunmamaktadır.

#### Çift kutup-dört kutup ( $\ell$ ) etkileşimin faz sınırları üzerindeki etkisi

Buraya kadar çeşitli etkilerini incelediğimiz çift kutup-dört kutup etkileşiminin bir başka etkisinde fcc BEG modelin karışık dört kutuplu bölgesindeki;  $A_3B$ , AB ve  $AB_3$  düzenlenimlerinin ortaya çıktığı bölgelerde gözlenmektedir.  $\ell$ ' in 0.5 değeri için elde

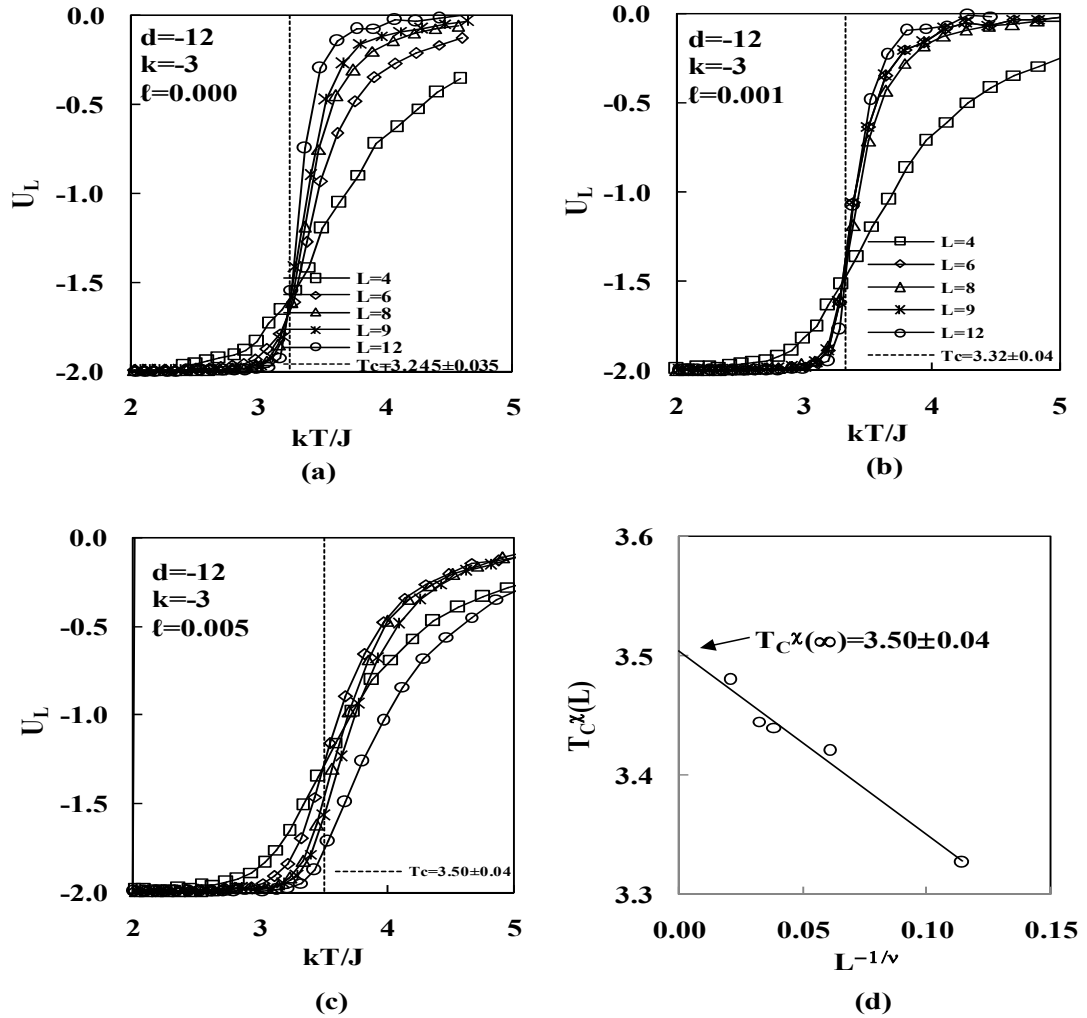


Şekil 4.37.  $\ell=0.5$  için fcc BEG modelin taban durum ( $k, d$ ) faz diyagramı

edilen ( $k, d$ ) faz diyagramında  $AB_3$  düzenleniminin ortadan kalktığı görüldü. Örnek olarak  $k=-3$  doğrusu üzerindeki  $d=-20$  noktası  $\ell=0$  için  $AB_3$  düzenlenimde iken  $\ell=0.5$  için AB düzenlenim bölgesinde kalmaktadır.

Çift kutup-dört kutup ( $\ell$ ) etkileşiminin sonlu örgü ölçeklemeleri üzerindeki etkisi

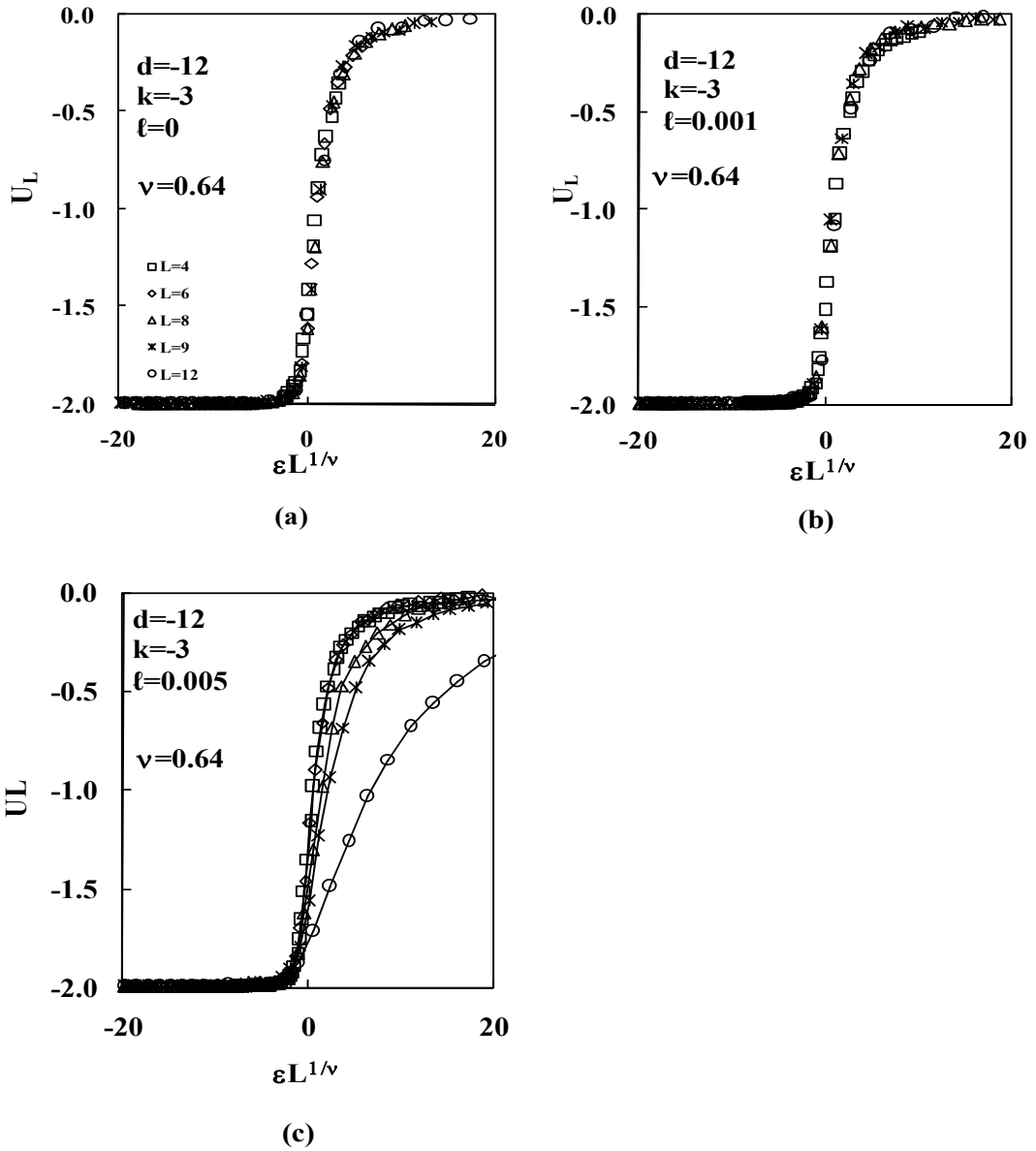
SQ bölgede  $k=-3$  değeri için AB taban durumlu bölgede  $d=-12$  ve  $AB_3$  taban durumlu bölgede  $d=-20$  parametreleri, çift kutup-dört kutup etkileşiminin sonlu örgü



Şekil 4.38. AB bölgedeki  $d=-12$ ,  $k=-3$  parametre seti için binder kümülanından sonsuz örgü kritik sıcaklığının tespiti; a)  $\ell=0$ , b)  $\ell=0,001$ , c)  $\ell=0,005$

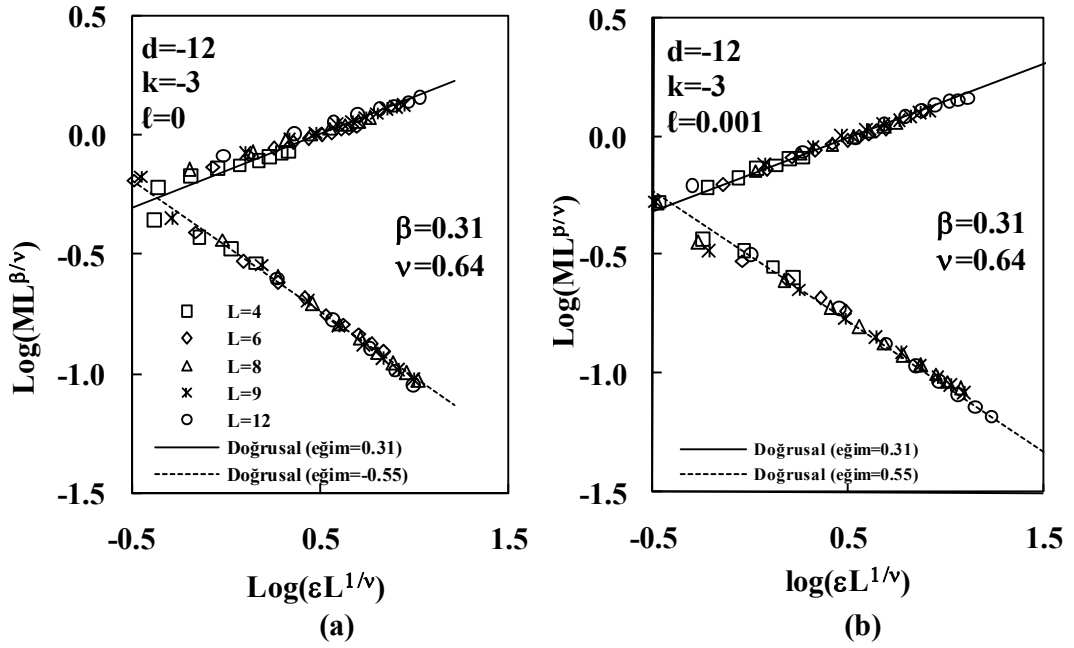
ölçeklemesi üzerindeki etkisini araştırmak amacıyla incelendi. Hesaplamalar  $\ell=0$ ; 0,001; 0,005 değerleri için  $L=4, 6, 8, 9$  ve  $12$  örgülerinde yapıldı.  $d=-12$ ,  $k=-3$  parametre setinin ait olduğu evrensellik sınıfını incelemek amacıyla termodinamik nicelikler üzerinde sonlu örgü ölçekleme analizi yapıldı. Binder kümülanının sıcaklıkla değişim grafiklerinden sonsuz örgü kritik sıcaklıkları;  $\ell=0,000$  için

$T_C(\infty)=3,245\pm 0,03$ ,  $\ell=0,001$  için  $T_C(\infty)=3,315\pm 0,06$  olarak tespit edildi. ( $d=-12$ ;  $k=-3$ ;  $\ell=0,005$ ) için binder kümülanının sıcaklıkla değişiminde bir kesim noktası bulunmadığı için sonsuz örgü kritik sıcaklığı, alınganlıkların pik verdiği kritik sıcaklık değerlerinin sonsuza ekstrapolasyonu ile,  $T_C(\infty)=3,5\pm 0,01$  olarak elde edildi (Şekil 4.38).



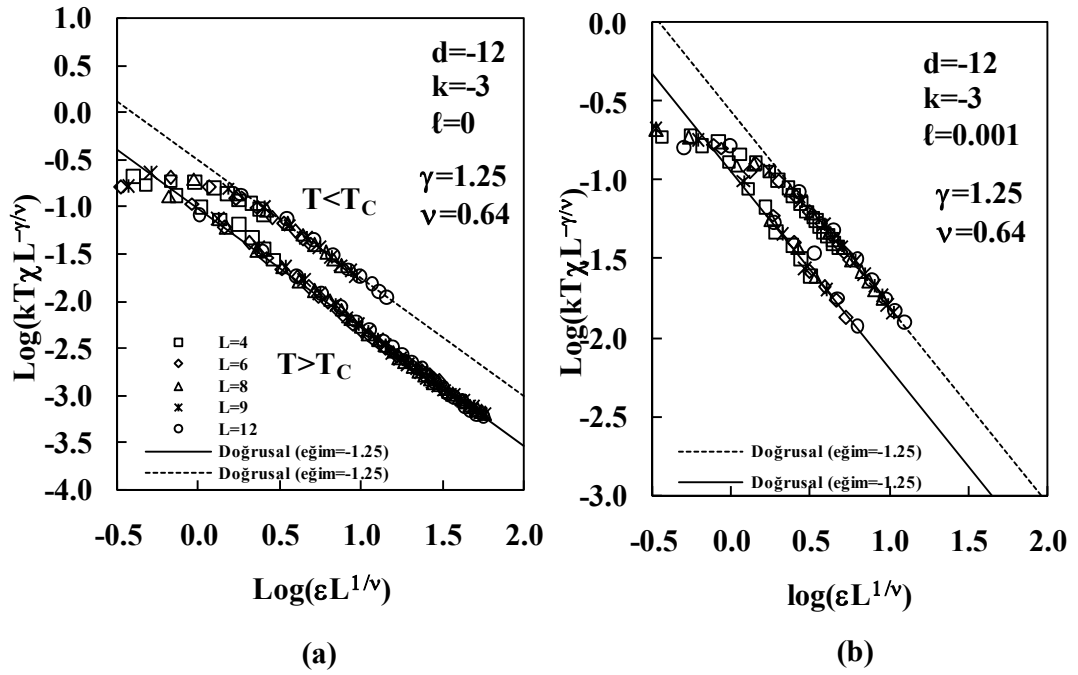
Şekil 4.39. AB bölgedeki  $d=-12$ ,  $k=-3$  parametre seti için binder kümülanının ölçeklemesi; a)  $\ell=0$ , b)  $\ell=0,001$ , c)  $\ell=0,005$

Elde edilen sonsuz örgü kritik sıcaklıklarını  $\nu=0,64$  kritik üssü kullanarak  $\ell=0,000$  ve  $\ell=0,001$  için yapılan binder kümülanı ölçeklemelerinde verilerin bir eğri etrafında toplandığı görüldü.  $\ell=0,005$  için ise veriler ölçeklenme göstermemektedir (Şekil 4.39).



Şekil 4.40. AB bölgedeki  $d=-12$ ,  $k=-3$  parametre seti için düzen parametresinin ölçeklemesi; a)  $\ell=0$ , b)  $\ell=0,001$

Düzen parametresinin  $\nu=0,64$  ve  $\beta=0,31$  kritik üsleri ile yapılan ölçeklemesinde kritiğin altında verilerin  $\ell=0$ ; 0,001; 0,005 değerleri için 0,31 eğimli birer doğruya uyduğu görülür. Kritiğin üstünde ise veriler  $\ell=0$ ; 0,001 değerleri için 0,55 eğimli birer doğruya uymaktadır (Şekil 4.40).

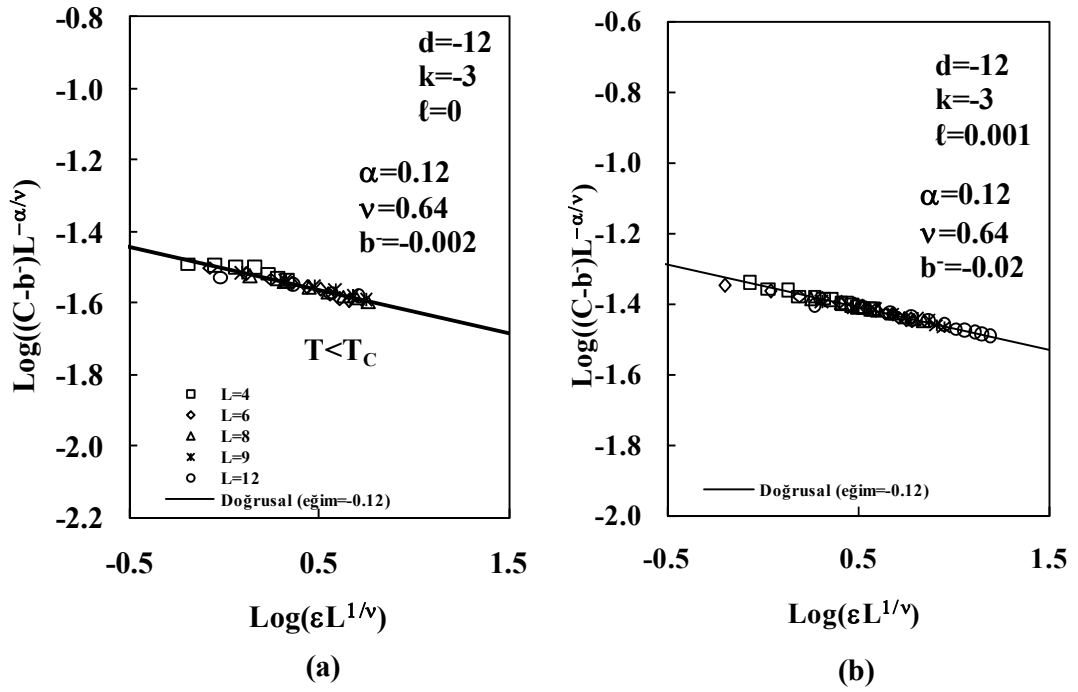


Şekil 4.41. AB bölgedeki  $d=-12$ ,  $k=-3$  parametre seti için alınganlığın ölçeklemesi; a)  $\ell=0$ , b)  $\ell=0,001$

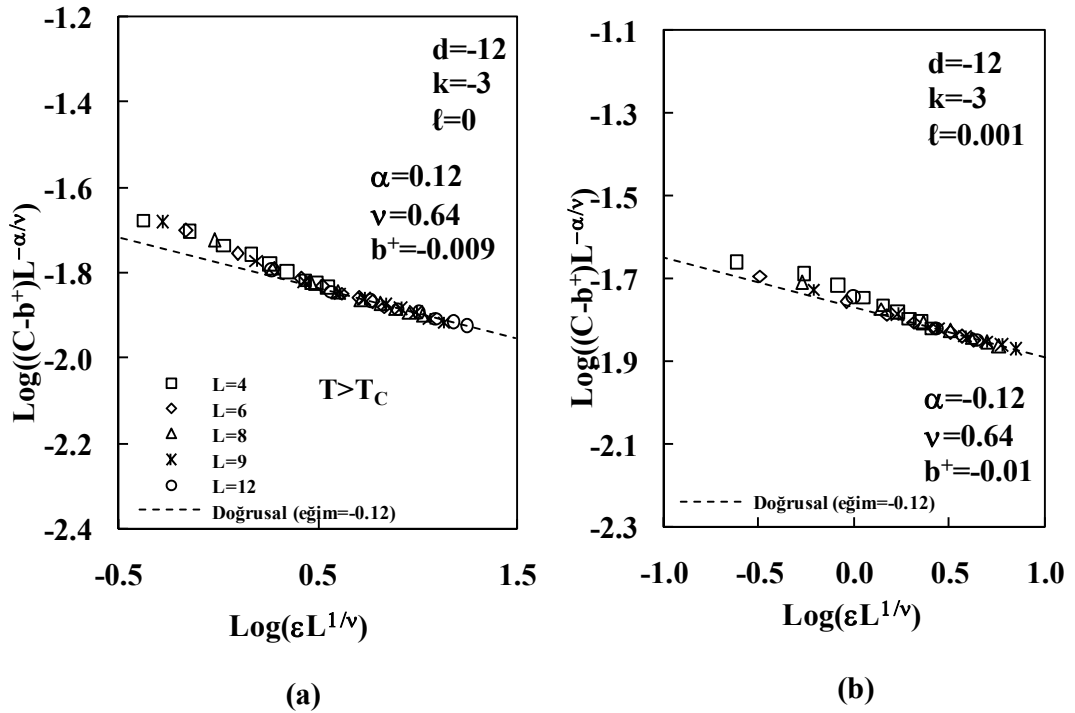
Alınganlığın  $\nu=0,64$ ,  $\gamma=1,25$  ile ölçeklenmesi  $\ell=0$  ve  $0,001$  değerleri için yapıldı.  $\ell=0$  ve  $0,001$  için veriler kritiğin her iki yanında da eğimi  $1,25$  olan birer doğruya uymaktadır (Şekil 4.41).

Özısı ise  $\nu=0,64$  ve  $\alpha=0,12$  kritik üsleri ile kritiğin altında  $b^-$ , kritiğin üstünde  $b^+$  düzeltme terimleri kullanılarak ölçeklendi. Kritiğin altında verilerin  $\ell=0$  ve  $0,001$  değerleri için  $0,12$  eğimli birer doğru üzerinde toplandığı görüldü (Şekil 4.42).

Kritiğin üstünde de benzer şekilde veriler,  $\ell=0$  ve  $0,001$  değerleri için,  $0,12$  eğimli birer doğru üzerinde toplanırken  $b^+$  düzeltme terimlerinde  $\ell$  ile arttığı görüldü (Şekil 4.43).

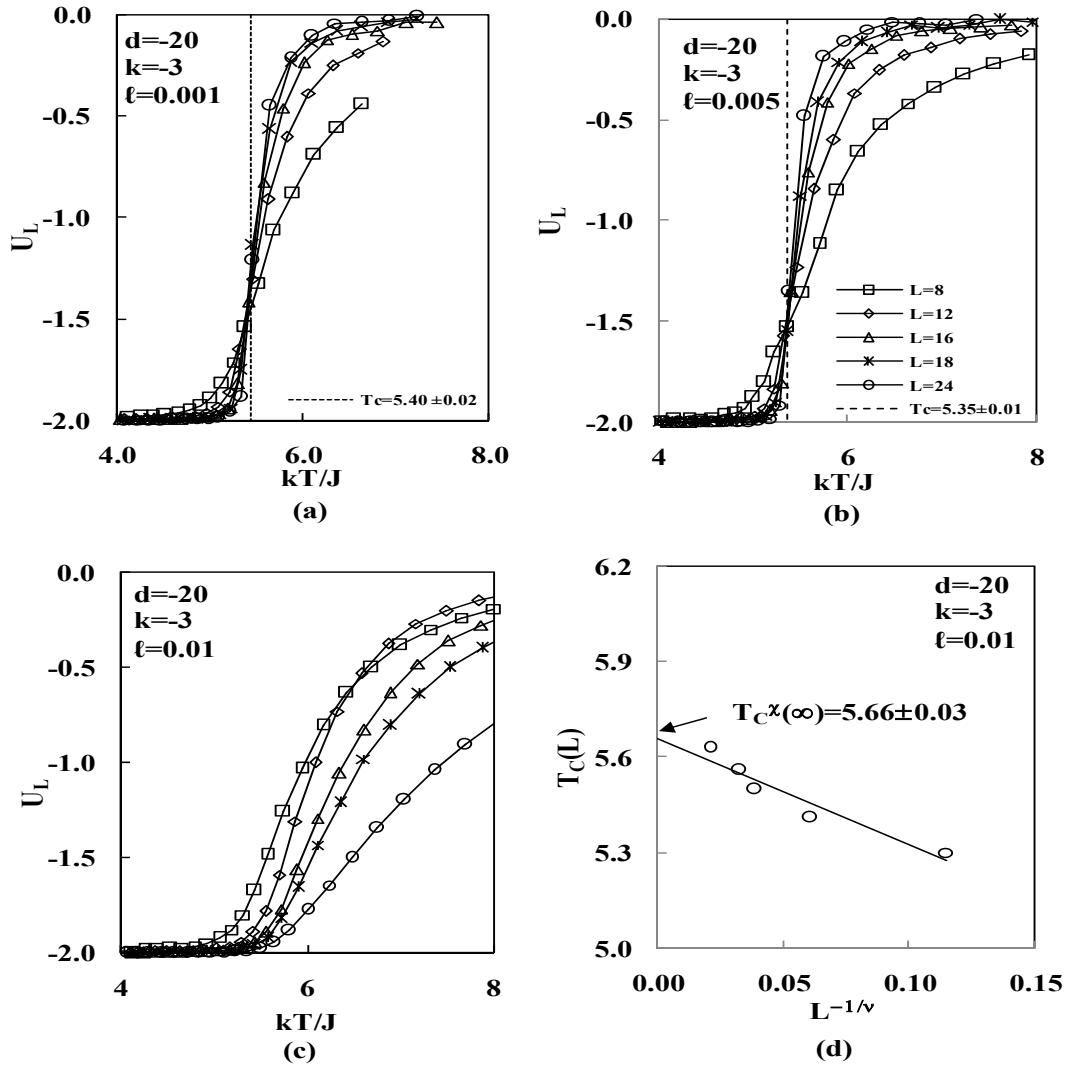


Şekil 4.42. AB bölgedeki  $d=-12$ ,  $k=-3$  parametre seti için özısının  $T < T_C$ ' de ölçeklenmesi; a)  $\ell=0$ , b)  $\ell=0,001$



Şekil 4.43. AB bölgedeki  $d=-12$ ,  $k=-3$  parametre seti için özısının  $T > T_C$ ' de ölçeklenmesi; a)  $\ell=0$ , b)  $\ell=0,001$

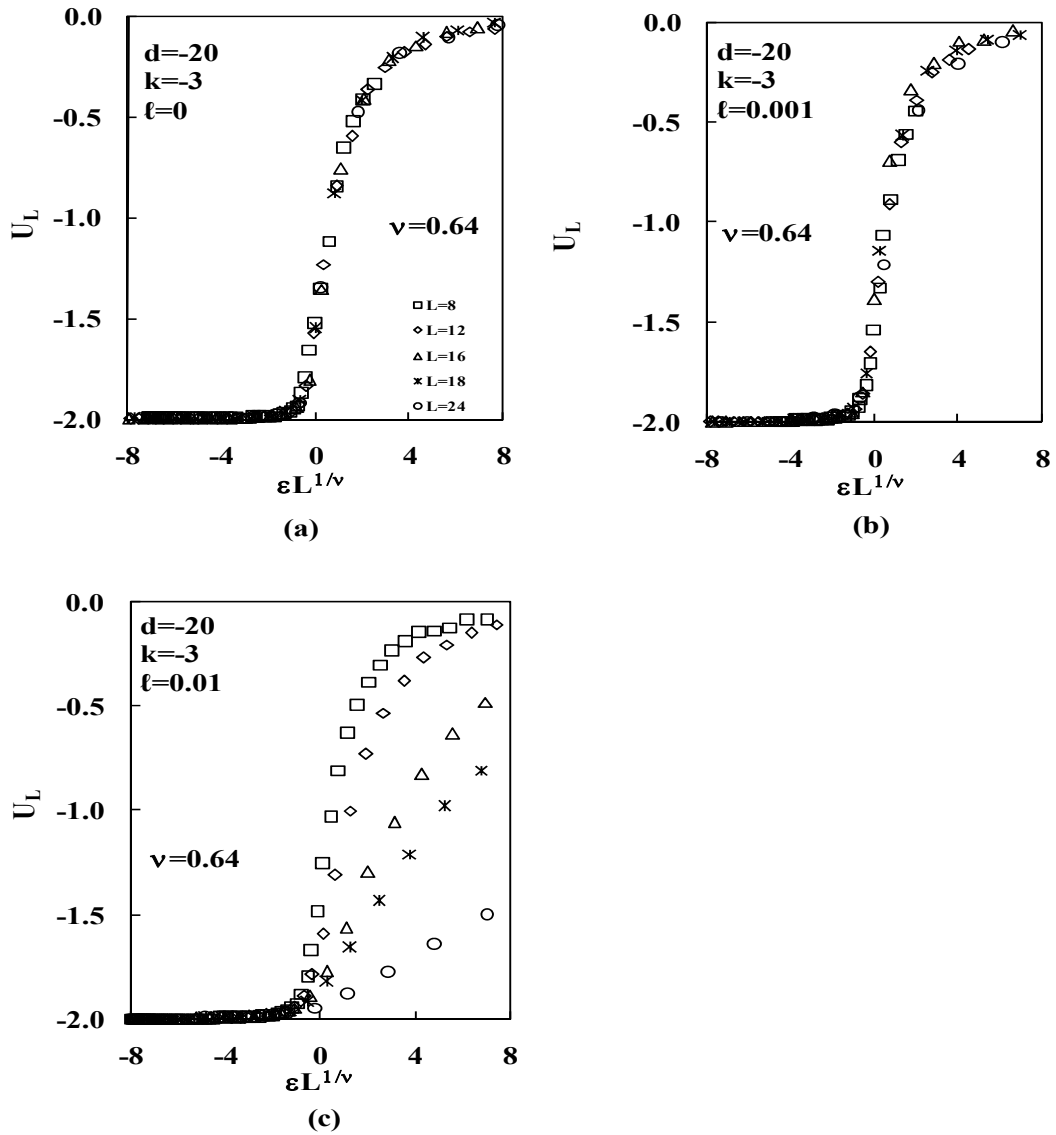
$d=-12$ ,  $k=-3$  parametre seti için yapılan sonlu örgü ölçekleme analizi sonucunda binder kümülantının  $\ell$ ' nin 0,000 ve 0,001 değerlerinde  $v=0,64$  için ölçeklendiğini,  $\ell=0,005$  değerinde ise ölçeklenmediğini gösterdi.  $\ell=0,000$  ve 0,001 değerlerinde kritiğin altında ve üstünde ve  $\ell=0,005$  değerinde ise kritiğin altında düzen parametreleri, alınganlık ve özısının  $\alpha=0,12$ ,  $\beta=0,31$ ,  $\gamma=1,25$  ve  $v=0,64$  kritik üsleri için ölçeklendiği görüldü. Fcc BEG model  $k=-3$ ,  $d=-12$  için  $\ell=0,005$  değerinde binder kümülantı ölçeklenmediğinden  $v$  tespit edilemedi. Bu nedenle modelin ( $k=-3$ ,  $d=-12$ ,  $\ell=0,005$ ) parametre setinde Ising evrensellik sınıfına dahil olmadığı görülmüştür.



Şekil 4.44.  $AB_3$  bölgedeki  $d=-20$ ,  $k=-3$  parametre seti için binder kümülantından sonsuz örgü kritik sıcaklığının tespiti; a)  $\ell=0$ , b)  $\ell=0,001$ , c)  $\ell=0,01$

$d=-20$ ,  $k=-3$  parametre setinin ait olduğu evrensellik sınıfını incelemek amacıyla termodinamik nicelikler üzerinde sonlu örgü ölçekleme analizi yapıldı. Binder kümülantının sıcaklıkla değişim grafiklerinden sonsuz örgü kritik sıcaklıkları;  $\ell=0,000$  için  $T_C(\infty)=5,35\pm 0,01$ ,  $\ell=0,001$  için  $T_C(\infty)=5,40\pm 0,02$  olarak tespit edildi.

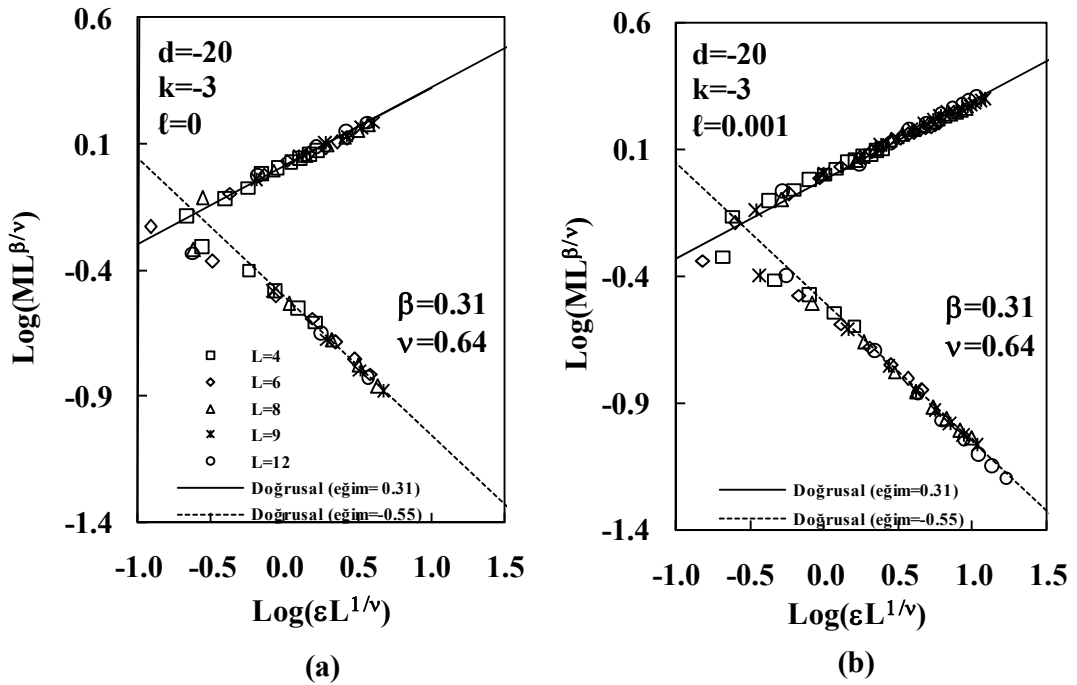
$\ell=0,01$  için binder kümülantının sıcaklıkla değişiminde bir kesim noktası bulunmadığı için sonsuz örgü kritik sıcaklığı, özısının pik verdiği kritik sıcaklık değerlerinin sonsuza ekstrapolasyonu ile,  $T_C(\infty)=5,66\pm 0,03$  olarak elde edildi (Şekil 4.44).



Şekil 4.45.  $AB_3$  bölgedeki  $d=-20$ ,  $k=-3$  parametre seti için binder kümülantının ölçeklemesi; a)  $\ell=0$ , b)  $\ell=0,001$ , c)  $\ell=0,01$

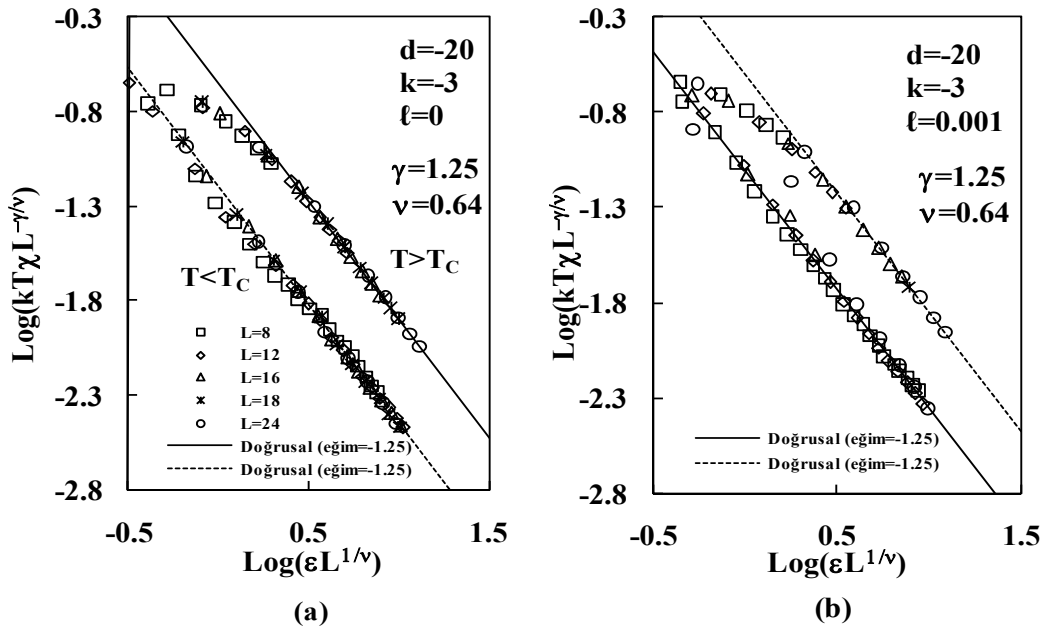
Binder kümülanlarının  $\ell=0$  ve  $\ell=0,001$  değerlerinde  $\nu=0,64$  ile iyi ölçüklendiği görülmektedir.  $\ell=0,01$  değerinde ise binder kümülanı verilerinin bir eğri etrafında toplanmadığı dolayısıyla ölçülenmediği görülmektedir (Şekil 4.45).

$\nu=0,64$  ve  $\beta=0,31$  için  $d=-20$ ,  $k=-3$ ' de düzen parametresi verilerinin kritik sıcaklığın altında sonlu örgü ölçeklemesine bakıldığında  $\ell=0$  ve  $\ell=0,001$  için eğimi 0,31 olan birer doğruya uyduğu görülmektedir. Kritik sıcaklığın üstünde ise  $\ell=0$  ve  $\ell=0,001$ ' de veriler eğimi 0,55 olan birer doğruya uymaktadır (Şekil 4.46).

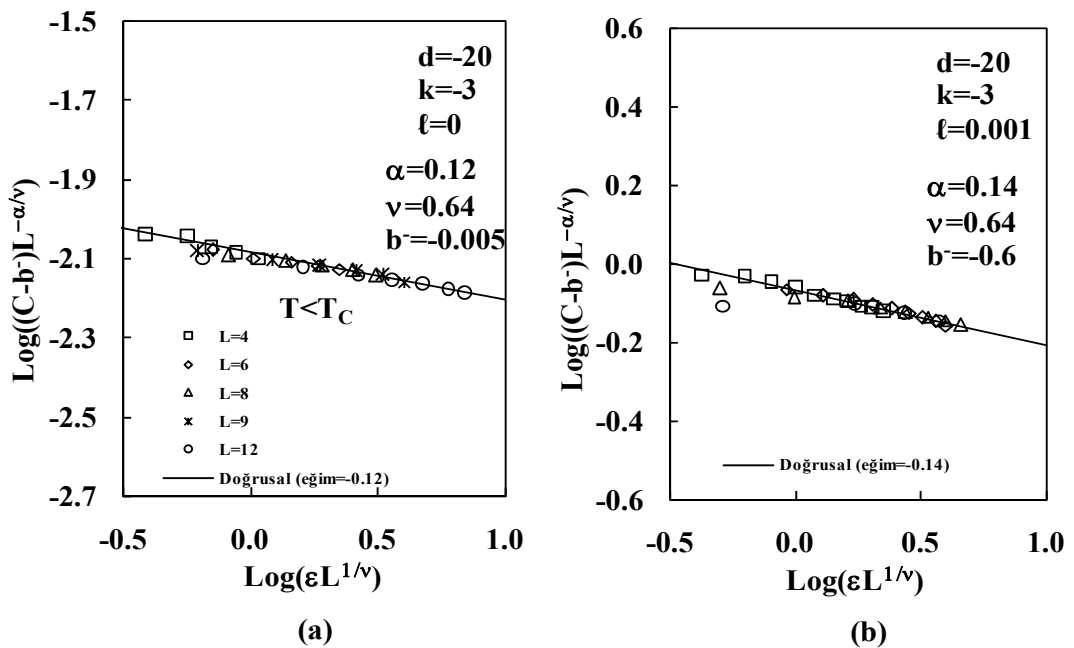


Şekil 4.46. AB<sub>3</sub> bölgedeki  $d=-20$ ,  $k=-3$  parametre seti için düzen parametresinin ölçeklemesi; a)  $\ell=0$ , b)  $\ell=0,001$

Şekil 4.47' de  $\nu=0,64$  ve  $\nu=1,25$  için manyetik alınganlık ölçeklemesi görülmektedir. Kritiğin altında ve üstünde manyetik alınganlık verileri, incelenen  $\ell=0$  ve 0,001 değerleri için eğimi -1,25 olan birer doğruya uymaktadır.



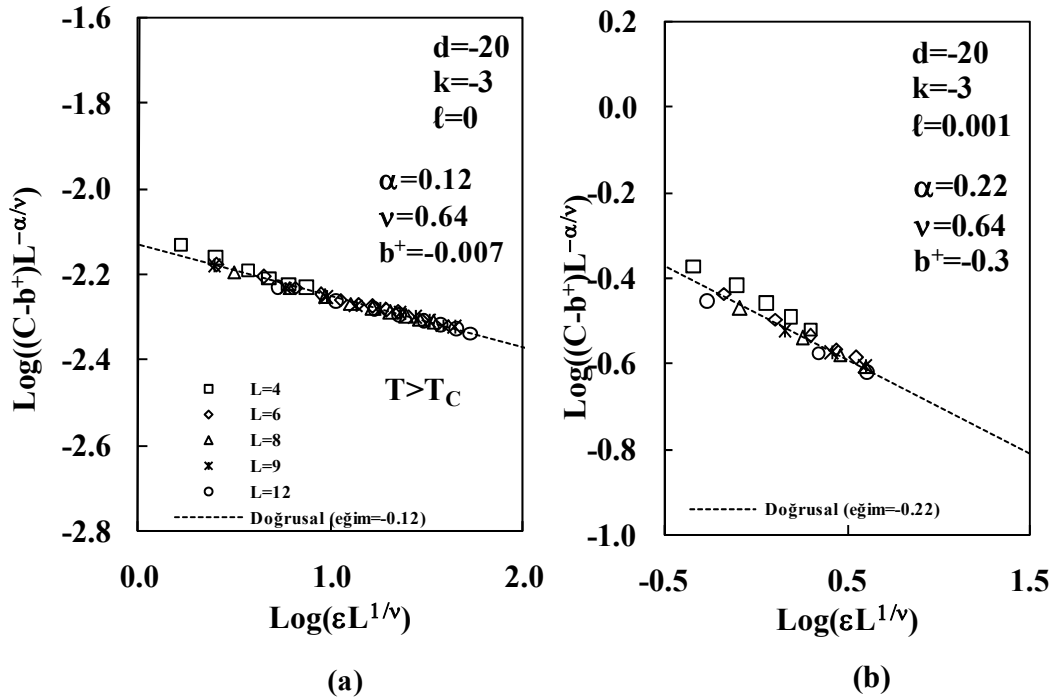
Şekil 4.47.  $AB_3$  bölgedeki  $d=20$ ,  $k=3$  parametre seti için alınganlığın ölçeklemesi; a)  $\ell=0$ , b)  $\ell=0,001$



Şekil 4.48.  $AB_3$  bölgedeki  $d=20$ ,  $k=3$  parametre seti için özısının  $T < T_C$ ' de ölçeklemesi; a)  $\ell=0$ , b)  $\ell=0,001$

Özısının sonlu örgü ölçeklemesine bakıldığında kritiğin altında verilerin  $\ell=0$  değerinde  $\alpha=0,12$ ,  $\nu=0,64$  kritik üsleri için eğimi  $-0,12$ ,  $\ell=0,001$  için  $\alpha=0,14$ ;  $\nu=0,64$  kritik üsleri için eğimi  $-0,14$  olan birer doğruya uyduğu görülmektedir (Şekil 4.48).

Kritiğin üstünde özısının ölçeklemesinde  $\ell=0$  için  $\nu=0,64$  ve  $\alpha=0,12$  kritik üsleri ile ölçeklenen verilerin eğimi  $-0,12$  olan birer doğruya uydukları görülmektedir.  $\ell=0,001$  değeri için özısı verileri  $\alpha=0,22$  ve  $\nu=0,64$  kritik üsleri için eğimi  $-0,22$  olan bir doğruya uymaktadır (Şekil 4.49).



Şekil 4.49.  $AB_3$  bölgedeki  $d=-20$ ,  $k=-3$  parametre seti için özısının  $T > T_C$ ' de ölçeklemesi; a)  $\ell=0$ , b)  $\ell=0,001$

$d=-20$ ,  $k=-3$  parametre seti için yapılan sonlu örgü ölçekleme analizi sonucunda binder kümülantının  $\ell$ ' nin 0,000 ve 0,001 değerlerinde  $\nu=0,64$  kritik üssü için ölçeklendiğini,  $\ell=0,01$  değerinde ise ölçeklenmediğini gösterdi.  $\ell=0,000$  ve 0,001 değerlerinde kritiğin altında ve üstünde düzen parametreleri ve alınganlığın  $\beta=0,31$ ;  $\gamma=1,25$  ve  $\nu=0,64$  kritik üsleri için ölçeklendiği görüldü. Özısı  $\ell=0,000$  değeri için kritiğin altında ve üstünde  $\alpha=0,12$  ile ölçeklenmektedir.  $\ell=0,001$ ' de kritiğin altında  $\alpha=0,14$  ile ölçeklenirken kritiğin üstünde veriler  $\alpha=0,22$  için eğimi  $-0,22$  olan bir

dođru üzerinde toplanmaktadır.  $\alpha'$  nın aldığı 0,22 ve 0,25 deđerleri evrensel kritik üs deđerinden farklıdır. Bu sonuçlar  $\ell'$  nin 0,001 gibi küçük bir deđerinin bile evrensel davranışı ortadan kaldırdığını göstermektedir.

## 5. SONUÇLAR

Bu tez çalışmasında fcc Blume – Emery - Griffiths modelin faz uzayı üzerinde çift kutup – dört kutup etkileşiminin etkisi incelendi. Modelin simülasyonu Creutz algoritmasını temel alan ısıtma algoritması kullanılarak Creutz cellular automaton ile yapıldı. Hesaplamalar kenar uzunluğu  $L=4, 6, 8, 9$  ve  $12$  olan yüz merkezli kübik (fcc) örgü üzerinde yapıldı. fcc BEG modelin  $-12 \leq d \leq 12$  ve  $-3 \leq k \leq 0$  aralığında; ferromanyetik, karışık dört kutuplu ve dört kutuplu taban duruma sahip bölgeler olduğu görüldü. Düzen parametreleri,  $(M, Q)$ , manyetik alınganlık  $(\chi)$ , iç enerji  $(H_I)$ , özısı  $(C)$  ve karışık dört kutuplu bölgede alt örgü momentleri  $(m_a, q_a)$ 'nin sıcaklıkla değişimi incelenerek modelin sergilediği; faz geçiş türleri, faz geçiş değerleri ve faz geçiş sıcaklıkları tespit edildi. Model ferromanyetik bölgesinin, sergilediği faz geçiş türlerine göre, alt bölgelere ayrıldığı görüldü. Karışık dört kutuplu bölgede, Cu-Au tipi ikili alaşımlara özgü,  $A_3B$ ,  $AB$  ve  $AB_3$  düzenlenimlerinin ortaya çıktığı üç alt bölge tespit edildi. Çift kutup – dört kutup etkileşimin, faz geçişleri, çoklu kritik noktalar ve faz diyagramları üzerindeki etkisi araştırıldı. Karışık dört kutuplu bölgede modelin evrenselliği çift kutup – dört kutup etkileşimin varlığında incelendi. Sonuçlar çift kutup – dört kutup etkileşimin faz geçişleri, çoklu kritik noktalar, faz diyagramları ve modelin evrensel davranışı üzerinde etkili olduğu görüldü.

Ferromanyetik bölgede, yüz merkezli kübik örgü üzerinde Blume-Emery-Griffiths (BEG) modelin sahip olduğu fazlar, faz geçiş türleri ve özel noktaların tespit edilmesi amacıyla,  $-1 \leq k < 0$  ve  $0 \leq d \leq 12$  aralığında,  $L=9$  kenar uzunluklu örgü için inceleme yapıldı. Sonuçlar;  $a-F$  ikinci derece,  $a-f-f$ ,  $a-F-a$ ,  $a-f-a-f$ ,  $a-f-f-a-f$  ardışık, tekrarlayan ve çoklu faz geçişleri,  $a-F$  birinci derece faz geçişleri sergileyen ve faz geçişi olmayan bölgeler olduğunu gösterdi. Ardışık, tekrarlayan ve çoklu faz geçişlerinin varlığı faz diyagramları üzerinde çoklu kritik noktalarının ortaya çıkmasına neden olmaktadır.  $d=0; 0,5; 1$  ve  $2$  parametre değerleri için elde edilen  $(kT_C/zJ, k)$  faz diyagramı,  $d=0.5$  kritik eğrisi üzerinde kritik son nokta,  $d=1$  ve  $2$  üzerinde ise üçlü kritik noktaya sahiptir. RG teorisi [3, 4, 5] ve MFA sonuçları [31] BEG modelin  $k=-0,5$ ' te kritik son noktaya sahip olduğunu tahmin etmiştir. Fakat

CVM [9], MCRG teorisi [32], TPCA [33] ve CA [30, 105]  $k=-0.5$ ' te kritik son nokta yerine üçlü kritik nokta elde tespit etmiştir. CA ile  $k=0; -0,25; -0,5; -0,75$  ve  $-0,9$  parametre değerleri için elde edilen  $(kT_C/zJ, d)$  faz diyagramı,  $k=0; -0,25$  ve  $-0,75$  kritik eğrisi üzerinde üçlü kritik nokta,  $-0,75$  değerinde ikili kritik nokta ve  $d=-0,9$ ' da kritik son noktaya sahiptir Bu sonuç BEG modelin faz uzayında kritik son noktanın var olduğunu, fakat bu noktanın RG teorisi ve MFA sonuçlarının belirttiği gibi  $k=-0,5$ ' te değil  $k=-0,9$ ' da ortaya çıktığını göstermiştir.

Karışık dört kutuplu bölgede yapılan incelemeler modelin, Cu-Au ikili alaşımlarında görülen,  $A_3B$ , AB ve  $AB_3$  düzenlenimleri tespit edilmiştir. Model, mutlak sıfırda,  $(k=-3, -8 < d < 0)$  ve  $(d=-4, -1,5 < k \leq -1,3)$  aralıklarında  $A_3B(P)$ ,  $(k=-3, -16 < d < -8)$  aralığında  $AB(f)$  ve  $(k=-3, -24 < d < -16)$  aralığında  $AB_3(f)$  fazındadır.  $k=-3$  değeri için  $(kT_C/zJ, d)$  ve  $d=-4$  değeri  $(kT_C/zJ, k)$  için elde edilen faz diyagramlarında bu üç bölge görülmektedir.  $k=-3$  değeri için elde edilen  $(kT_C/zJ, d)$  faz diyagramı, CVM [9] ile elde edilen diyagram ile uyumludur. Fakat CVM  $(kT_C/zJ, d)$  faz diyagramında kritik son nokta tespit ederken CA aynı parametre setinde  $(d=-6,8; kT_C/zJ=0,105 \pm 0,039)$  ikili kritik nokta elde etmiştir.

Çalışmaya adını veren “çift kutup-dört kutup etkileşiminin fcc BEG modelin faz uzayı üzerindeki etkisi” ni araştırmak amacıyla, çeşitli  $\ell$  değerleri için hesaplamalar yapılmıştır. İncelemeler sonucunda çift kutup-dört kutup etkileşiminin faz geçişleri üzerinde etkili olduğu görülmüştür. Örnek olarak çoklu faz geçişleri ardışık faz geçişlerine dönüşmektedir. Bu da çift kutup-dört kutup etkileşiminin fcc BEG modelin sahip olduğu; çoklu kritik noktalar ve faz diyagramları üzerinde etkili olması sonucunu doğurmuştur. Fcc BEG modelin karışık dört kutuplu bölgesinde de çift kutup-dört kutup etkileşiminin etkisine bakılmıştır.  $AB_3$  faz durumlarının ortaya çıktığı bölgede  $\ell$ ' nin faz geçiş derecesini değiştirdiği görüldü. Dahası  $\ell=0.5$  için elde edilen  $(k, d)$  taban durum faz diyagramında  $AB_3$  bölgenin ortadan kalktığı görülmüştür. Ayrıca AB ve  $AB_3$  faz durumlarının ortaya çıktığı kısımlarda yapılan sonlu örgü ölçekleme analizi sonucunda  $\ell$ ' nin belli bir değerinden itibaren modelin evrensel davranışını ortadan kaldırdığı görülmüştür.

## KAYNAKLAR

1. Onsager, L., "Crystal Statistics I.A Two dimensional model with an Order-Disorder Transition", **Phys. Rev.**, 65:117-149 (1944).
2. Blume, M., Emery, V.J., Griffiths, R.B., "Ising Model for the  $\lambda$  transition and phase separation in He<sup>3</sup>-He<sup>4</sup> mixtures", **Phys. Rev. A** 4: 1071-1077 (1971).
3. Sivardière J., Lajzerowicz J., " Spin-1 Lattice Gas model. I. Condensation and solidification of a simple fluid", **Phys. Rev. A** 11: 2079-2089 (1975).
4. Sivardière J., Lajzerowicz J., "Spin-1 Lattice Gas model. I. Condensation and phase separation in a binary fluid", **Phys. Rev. A** 11: 2090-2100 (1975).
5. Sivardière J., Lajzerowicz J., "Spin-1 lattice-gas model. III. Tricritical points in binary and ternary fluids", **Phys. Rev. A** 11: 2101-2110 (1975).
6. Newman K.E., Dow J.D., "Zinc-blende-diamond order-disorder transition in metastable crystalline (GaAs)<sub>1-x</sub>Ge<sub>2x</sub> alloys", **Phys. Rev. B** 27: 7495-7508 (1983).
7. Shick, M., Shih, W.H., " Spin-1 model of a microemulsion", **Phys. Rev. B** 34: 1797-1801 (1986).
8. Kundrotas, P., J., Lapinskas S., Rosengren, A., "Model of adsorbate-induced missing-row reconstructions of the (100) surface of fcc metals", **Phys. Rev. B** 56: 6486-6489 (1997).
9. Lapinskas, S., Rosengren, A., " Blume-Emery-Griffiths model on three-dimensional lattices: Consequences for the antiferromagnetic Potts model", **Phys. Rev. B** 49: 15190-15196 (1994).
10. Wu, F.Y., "On the Horiguchi's Solution of the Blume-Emery-Griffiths Model", **Phys. Lett.A** 116: 245-247(1986).
11. Rosengren, A., Häggkvist, R., " Rigorous solution of a two-dimensional Blume-Emery-Griffiths model", **Phys.Rev.Lett.** 63: 660-663(1989).
12. Akhayan, A.Z., and Ananikian N.S., "Global Bethe lattice consideration of the spin-1 Ising model", **J.Phys.A: Math.Gen.** 29: 721-731(1996).
13. Wolfram, S., "Statistical Mechanics of Cellular Automata", **Reviews of Modern Physics.** 55: 601(1983).
14. Wolfram, S., "Universality and Complexity in Cellular Automata", **Physica D** 10: 1(1984).

15. Vichniac, G.Y., "Simulating Physics with Cellular Automata", **Physica D** 10: 96-116(1984).
16. Pomeau, Y., "Invariant in Cellular Automata", **J. Phys.A: Math. Gen.** 17: L415(1984).
17. Herrmann, H.J., "Fast Algorithm for The Simulation of Ising Model", **J. of Stat. Phys.** 45: 145(1986).
18. Herrmann, H.J., Carmesin, H.O. and Stauffer D., "Periods and Clusters in Ising Cellular Automata", **J. Phys. A:Math. Gen.**, 20: 4939(1987).
19. Creutz, M., "Deterministic Ising Dynamics", **Annals of Physics** 167: 62(1986).
20. Kutlu, B., "Critical Behavior of the Two-dimensional Ising Model with Next-Nearest Neighbor Antiferromagnetic Interaction on the Creutz Cellular Automaton", **Physica A** 234: 807-818, (1996).
21. Kutlu, B., "Critical Exponents of the Two-Dimensional Ising Model with Next-Nearest-Neighbor and Four-Spin Interactions on the Creutz Cellular Automaton", **Physica A**, 243:199-212 (1997).
22. Aktekin N., "The simulation of the Ising Model on Creutz Cellular Automaton", Annual Reviews of Computational Physics VII, ed. D. Stauffer (World Scientific, Singapore), pp. 1-23., (2000).
23. Kutlu, B., Kasap, M., Turan, S., "The Simulation of the Two-Dimensional Ising Model in Presence of an External Magnetic Field on the Creutz Cellular Automaton", **Int. J. Mod. Phys C**, 11:561-572 (2000).
24. Kutlu B., "The Simulation of the 2D Ferromagnetic Blume-Capel Model on a Cellular Automaton, **Int. J.of Mod.Phys. C** 12: 1401-1413(2001).
25. Kutlu, B., "The Simulation of 2D Spin-1 IsingModel with the bilinear and positive Biquadratic Interaction on a Cellular Automaton", **Int. J. of Mod. Phys. C**, 10:1305-1320 (2003).
26. Solak, A., Kutlu, B., "The Critical Behavior of the 2D Ising Model with the Bilinear and Positive Biquadratic nearest neighbor interactions on a Cellular Automaton", **Int. J. Mod. Phys. C**,15:1425-1438 (2004).
27. B.Kutlu, A. Özkan, N. Seferoğlu, A. Solak and B. Binal, "The Tricritical Behavior of the 3D Blume-Capel Model on a Cellular Automaton", **Int. J. Mod. Phys.C** 16: 933-950 (2005).

28. A. Özkan, N. Seferoğlu and B. Kutlu, “ Critical Exponents of the Three Dimensional Blume-Capel Model on a Cellular Automaton”, **Physica A** 362: 327-337 (2006).
29. N.Seferoğlu and A.Özkan and B.Kutlu, “ Finite Size Effect for the First-Order Phase Transition of the Three Dimensional Blume-Capel Model on a Cellular Automaton”, **Chinese Phys.Lett.** 23: 2526-2529 (2006).
30. Seferoğlu, N., Kutlu, B., “Reentrant Phase Transition of the Blume-Emery-Griffiths Model for a Simple Cubic Lattice on a CellularAutomaton”, **Physica A** 374: 165-172 (2007).
31. Hoston, W, Berker, A.N., “Multicritical Phase Diagrams of the Blume-Emery-Griffiths Model with Repulsive Biquadratic Coupling”, **Phys.Rev.Lett.** 67: 1027-1030 (1991).
32. Netz, R.R., “New Phases and Multiple re-entrance of the Blume-Emery-Griffiths model with Repulsive Biquadratic Coupling: Monte Carlo Renormalization Group Theory”, **Europhys. Lett.** 17: 373-377(1992).
33. O.R.Baran, R.R.Levitskii, “Reentrant Phase Transitions in the Blume-Emery-Griffiths Model on a simple Cubic Lattice: The Two-Particle Cluster Approximation”, **Phys.Rev.B** 65: 172407 (2002).
34. Netz, R.R., Berker, A.N., “Renormalization-Group Theory of an Internal Critical-End-Point Structure: The Blume-Emery-Griffiths Model with Biquadratic Repulsion”, **Phys.Rev.B** 47: 15019-15022 (1993).
35. Phani, M.K., Lebowitz, J.L., Kalos, M.H. and Tsai, C.C., “ Monte Carlo Study of an Ordering Alloy on an fcc Lattice”, **Phys. Rev. Lett.** 42: 577 (1979).
36. Binder, K., “ Ordering of the Face-Centered-Cubic Lattice with Nearest-Neighbor Interaction”, **Phys. Rev. Lett.** 45: 811-814 (1980).
37. Sanchez, J.M., Lin, C.H., “ Modeling of magnetic and chemical ordering in binary alloys”, **Phys. Rev. B** 30: 1448-1453 (1984).
38. Styer, D., F., Phani, M.K., Lebowitz, J.L., “ Multiatom interactions in the fcc Ising binary alloy: Low-temperature behavior and Monte Carlo simulations” **Phys. Rev. B** 34: 3361-3370 (1985).
39. Wei,S., H., Mbaye, A., A., Ferreira, L., G., Zunger, A., “ First-principles calculations of the phase diagrams of noble metals: Cu-Au, Cu-Ag andA g-Au”, **Phys. Rev. B** 36: 4163-4185 (1987).

40. Xi, Z., Chakraborty, B., Jacobsen, K. W., Norskov, J., K., “ An effective-medium theory approach to ordering in Cu-Au alloys”, **J. Phys: Cond. Matt.** 4: 7191 (1992).
41. Bozzolo, G., Good, B., Ferrante, J., “ Cu-Au Alloy Using Monte Carlo Simulations and the BFS Method for Alloy”, **NASA Technical Memorandum 107168**, 1 (1996).
42. Stemmer, A., Hüller, A., “ Monte Carlo simulation of type-1 fcc Ising antiferromagnets”, **Phys. Rev. B** 58: 887-889 (1997).
43. Beath, A., D., Ryan, D., H., “ fcc antiferromagnetic Ising model in a uniform external field solved by mean-field theory”, **Phys. Rev. B** 72: 014455-014462 (2005).
44. Collins J.B., Rikvold P.A., Gawlinski E.T., “Finite-size scaling analysis of the S=1 Ising model on the triangular lattice”, **Phys.Rev.B** 38: 6741-6750 (1987)
45. Dublenych Y.I., “Exact ground-state diagrams for the generalized Blume-Emery-Griffiths model”, **Phys.Rev. B** 71: 012411-012414 (2005).
46. Yeomans, J.M., “Statistical Mechanics of Phase Transition”, **Clarendon Pres**, Oxford: 45-47 (1992).
47. Huang, K., “ Statistical Mechanics”, **John Wiley and Sons, Inc.**: 341-398 (1987).
48. Challa, M.s.s., Landau, D.P., Binder, K., “Finite Size effects at temperature driven first order transitions”, **Phys. Rev. B** 34: 1841-1852(1984).
49. Binder, K., Landau,D.P., “ Finite-size scaling at first order phase transitions”, **Phys. Rev. B** 30: 1477-1485(1984).
50. Chen, S., Ferrenberg, A.M., and Landau, D.P., “ Randomness-Induced Second Order Transition in the Two-Dimensional Eight-State Potts Model: A Monte Carlo Study”, **Phys. Rev.Lett.** 69: 1213-1215(1992).
51. Lee, J., Kosterlitz, M.J., “ Finite-size scaling and Monte carlo simulations of first-order phase transitions”, **Phys. Rev. B** 43: 3265-3277(1991).
52. Privman, V., Fisher, M.E., “ Finite-size Effects at First-Order Transitions”, **J. Stat. Phys.** 33: 385-417(1983).
53. Cardy, J.L., Nightingale, M.P., “ Finite-size analysis of first-order phase transitions: Discrete and continuous symetries”, **Phys. Rev. B** 27: 4256-4260 (1983).

54. Wolfram, S., "Statistical Mechanics of Cellular Automata", **Reviews of Modern Physics**, 55: 601 (1983).
55. Fisher, M.E. and Barber, M.N., "Scaling Theory for Finite-Size Effects in the Critical Region", **Phys. Rev. Lett.**, 28: 1516-1519 (1972).
56. Lenz, W., **Z. Physik** 21: 613 (1920).
57. Ising, E., "Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus", **Z. Physik** 31: 253-258, (1925).
58. Heisenberg, W., "Theory of ferromagnetism", **Z. Physik** 49, 619 (1928).
59. Peierls, R., "On Ising's Model of Ferromagnetism", Proc. Camb. **Phil. Soc.** 32: 477-481 (1936).
60. Lee, T.D., Yang, C.N., "Statistical Theory of Equations of State and Phase ... II. Lattice Gas and Ising Model", **Phys. Rev.** 87, 410 (1952).
61. Gu B., Newman K., Fedders P.A., "Role of correlations in  $(\text{GaSb})_{1-x}\text{Ge}_{2x}$  alloys" **Phys. Rev. B** 35: 9135-9148 (1987).
62. Tanaka M., Kawabe T., " Spin-One Ising Model Including Biquadratic Interaction with Positive Coupling Constant", **J. Phys. Soc. Japan** 54: 2194-2203 (1985).
63. Gu B., Ni J., Zhu J., "Structure of the alloy  $(\text{GaAs})_{1-x}\text{Ge}_{2x}$  and its electronic properties" , **Phys. Rev. B.**, 45: 4071-4076; Stauffer, D., **Phys. Rep.** 54: 1(1979).
64. Davidovich M., Koiller B., Osório R., Robbins M.O., "Electronic theory of ordering in  $(\text{GaAs})_{1-x}\text{Ge}_{2x}$  alloys", **Phys. Rev. B**, 38: 10524-10532 (1988).
65. Davis L. C., Holloway H., "Properties of  $(\text{GaAs})_{1-x}\text{Ge}_{2x}$  and  $(\text{GaSb})_{1-x}\text{Ge}_{2x}$ : Consequences of a stochastic growth process", **Phys. Rev. B**, 35: 2767-2780 (1986); Holloway H., Davis L. C., **Solid State Commun.** 64: 121 (1987).
66. Keskin M., Arı M., Meijer P.H.E., "Stable, metastable and unstable solutions of a spin-1 Ising system obtained by the molecular-field approximation and the path probability method", **Physica A** 157:1000-1017 (1988).
67. Temirci C., Kökçe A., Keskin M., "Equilibrium properties of a spin-1 Ising system with bilinear, biquadratic and odd interactions", **Physica A** 231:673-686 (1996).
68. Blume M.B., "Theory of the First-Order Magnetic Phase Change in  $\text{UO}_2$ ", **Phys.Rev.B** 141: 517-524 (1966).

69. Capel H.W., "On the possibility of first-order phase transitions in Ising system of triplet ions with zero-field splitting", **Physica(Utrecht)** 32: 966 (1966).
70. Yelon W.B., Cox D.E., Kortman P.J., Daniels W.B., "Neutron-diffraction study of  $\text{ND}_4\text{Cl}$  in the tricritical region", **Phys. Rev. B** 9: 4843-4856 (1974).
71. Wortis M., **Phys.Lett.A** 47: 445 (1974).
72. Safran S.A., "Phase Diagrams for Staged Intercalation Compounds", **Phys.Rev.Lett.**44: 937-940 (1980).
73. Siqueira A.F., Fittipaldi I.P., "New effective-field theory for the Blume-Capel model", **Physica A** 138: 592-611 (1986).
74. Tucker J.W., "The tri-critical point in the Blume-Emery-Griffiths model", **J.Phys: Cond. Matt.** 1: 485-489 (1989).
75. Du A., Liu H.J., Yü Y.Q., **Phys.Stat.Sol.B** 241: 175 (2004).
76. Du A., Yü Y.Q., Liu H.J., "Expanded Bethe-Peierls approximation for the Blume-Capel model", **Physica A** 320: 387-397 (2003).
77. Saul D.M., Wortis M., Stauffer D., "Tricritical behavior of the Blume-Capel model", **Phys. Rev.B** 9: 4964-4680 (1974).
78. Brankov J.G., Przystawa J., Pravecki E., **J.Phys.C** 5: 3384 (1972).
79. Grollau S., Kierlik G., Rosinberg M.L., Tarjus G., "Thermodynamically self-consistent theory for the Blume-Capel model", **Phys.Rev.E** 63: 041111-041123 (2001).
80. Grollau S. "Phase diagram of the spin3/2 Blume-Capel model in three dimensions", **Phys.Rev.E** 65: 056130-056135 (2002).
81. Falicov A., Berker A.N., "Tricritical and Critical-end Point Phenomena under Random Bonds", **Phys.Rev.Lett.** 76: 4380(1996).
82. Mahan G.D., Girvin S.M., "Blume-Capel model for plane-triangular and fcc lattices", **Phys.Rev.B** 17: 4411-4415 (1978).
83. Buzano C., Pelizzola A., "New topologies in the phase diagram of the semi-infinite Blume-Capel model", **Physica A** 216: 158-168 (1995).
84. Ng.W.M., Barry J.H., "Cluster-variation method applied in the pair approximation to the  $S=1$  Ising ferromagnet having additional single-ion-type uniaxial anisotropy", **Phys.Rev.B** 17: 36753683 (1978).

85. Deserno M., "Tricriticality and the Blume-Capel model: A Monte Carlo study within the microcanonical ensemble", **Phys.Rev.E** 56: 5204(1997).
86. Wilson W.G., Vause C.A., "Multilattice microcanonical simulation of the three-dimensional three-state Potts model", **Phys Rev.B** 36: 587(1987).
87. Puha I., Diep H.T., "Random-bond and random-anisotropy effects in the phase diagram of the Blume-Capel model", **J.Magn.Mater.** 224: 85-92 (2001).
88. Ota S.B., Ota S., "Microcanonical Monte Carlo simulations of the first order transition in two-dimensional Potts model", *J.Phys:Cond.Matt.*12: 2233-2243 (2000).
89. Ota S., Ota S.B., "Negative specific heat and finite-size effects at the first-order transition", **Phys.Lett.A** 285: 247250 (2001).
90. Kimel J.D., Rikvold P.A. and Wang Y.L., "Phase diagram for the antiferromagnetic Blume-Capel model near tricriticality", **Phys. Rev. B** 45: 7237-7243 (1992).
91. Koza, Z., Jasuukiewicz, C., Pekalski, A., "Transfer-matrix methods in the Blume-Emery-Griffiths Model", **Physica A** 164: 191(1990).
92. Berker, A.N., Wortis, M., "Blume-Emery-Griffiths-Potts model in two dimensions: Phase diagram and critical properties from a position-space renormalization group", **Phys.Rev.B** 14 4946-4963 (1974).
93. Takahashi, K., Tanaka, M., **J.Phys.Soc.Japan** 46: 1428(1979); Takahashi,K., Tanaka, M., **J.Phys.Soc.Japan** 46: 1423(1980).
94. Albayrak, E., Keskin, M., "Phase diagram of the Blume-Emery-Griffiths model on the simple cubic lattice calculated by the linear chain approximation", **J.Magn.Magn.Mater.** 213: 201-212(2000).
95. Keskin, M., Ekiz, C., Yalçın, O., "Stable, metastable and unstable solutions of the Blume-Emery-Griffiths model", **Physica A** 267: 392-405(1999).
96. Jain, A.K. and Landau, D.P., "Monte Carlo study of the fcc Blume-Capel model", **Phys. Rev. B** 22: 445-452 (1980).
97. Hoston, W., and Berker, N., "Dimensionality effects on the multicritical phase diagrams of the Blume-Emery-Griffiths model with repulsive biquadratic coupling: Mean-field and Renormalization-group studies", **J. Appl.Phys.** 70: 6101-6103 (1991).

98. Ekiz, C. and Keskin, M., “Multicritical phase diagrams of the Blume-Emery-Griffiths model with repulsive biquadratic coupling including metastable phases”, **Phys.Rev.B** 66: 054105-054115(2002).
99. Keskin, M., Erdinç, A., “Multicritical phase diagrams of the Blume–Emery–Griffiths model with repulsive biquadratic coupling including metastable phases: the pair approximation and the path probability method with pair distribution”, **J.Magn.Magn.Mater.** 283: 392-408(2004).
100. Tucker, J.W., Balcerzak, T., Gzik, M., Sukiennicks, A., “Phase diagram of the spin-1 magnetic bilayer by cluster variational theory: Exact results for a BEG model on a Bethe lattice with five-fold coordination”, **I.Magn.Magn.Mater.** 187: 381(1998).
101. Kasono, K., Ono, I., “ Re-entrant phase transitions in the Blume-Emery-Griffiths model”, **Z.Phys. B: Condens. Matter** 88: 205 (1992).
102. Wang, Y.L., Wentworth, C., “Phase diagrams of three-dimensional Blume-Emery-Griffiths model”, **J.Appl.Phys.** 61: 4411-4412(1987).
103. Tanaka, M., Kawabe, T., “ Spin-1 Ising Model Including Biquadratic Interaction with Positive Coupling Constant”, **J.Phys.Soc.Japan** 54: 2194(1985).
104. Rikvold, P.A., German, B.M., In. Annual Reviews of Comput. Phys.I, ed. Stauffer, D., (World Scientific, Singapore, 1994), 149-191.
105. Özkan, A., Kutlu, B., “Phase Diagrams of the FCC Blume-Emery Griffiths Model on a Cellular Automaton”, Int. Journal of Mod. Phys. C (2007)(baskıda).
106. Jordan, R., G., Jiang, Y., Hoyland, M., A., Begley, A., M., “ Investigation of the electronic structure in Cu-Au I using x-ray-photoelectron spectroscopy”, **Phys. Rev. B**43, 12173(1990).
107. Barbier, L., Goapper, S., Salanon, B., “X-Ray Observation of a Chemical Order Driven Morphological Transition on the Surface of an A<sub>3</sub>B Type Alloy”, **Phys. Rev. Lett.**78, 3003(1996).
108. Shinohara, T., Saitoh, S., Wagatsuma, F., Yamaguchi, “ Nuclear magnetic resonans studies on Cu<sub>3</sub>Au, CuAu and CuAu<sub>3</sub> alloys”, **Philosophical Magazine A**79, 437(1999).
109. Wolfram, S., “Statistical Mechanics of Cellular Automaton”, **Rev. Mod. Phys.**, 55:601-642(1983).

110. Wolfram, S., "Theory and Applications of Cellular Automaton", **World Scientific**(1986).
111. Gardner, M., "The Fantastic Combinations of John Conway's New Solitaire Game life", **Scientific American**, 223(4), 120-123 (1970).
112. Pomeau, Y., "invariant in Cellular Automata", **J.Phys. A:Math. Gert.**, 17:L415-L418 (1984).
113. Binder, K., Hermann, D.W., "Theoretical Foundations of the Monte Carlo Method and Its Applications in Statistical Physics, Monte Carlo Simulation in Statistical Physics", Third Edition, 4-7 (1997).
114. Mouritsen, O., G., "Computer Studies of Phase Transitions and Critical Phenomena", **Springer**, Berlin, 22-26 (1984).
115. Privman, V., "Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems", **World Scientific**, Singapore, 225-260 (1990).

## ÖZGEÇMİŞ

### Kişisel Bilgiler

Soyadı, Adı : ÖZKAN, Aycan

Uyruğu : T.C.

Doğum tarihi ve yeri: 04 Aralık 1974 Ankara

Medeni hali : Bekar

Telefon : 0(312) 2126030

Faks :

e-mail : [aycan@gazi.edu.tr](mailto:aycan@gazi.edu.tr)

### Eğitim

| Derece        | Eğitim Birimi                         | Mezuniyet tarihi |
|---------------|---------------------------------------|------------------|
| Doktora       | Gazi Üniversitesi/Fizik Bölümü        | 2007             |
| Yüksek Lisans | Gazi Üniversitesi/Fizik Bölümü        | 2000             |
| Lisans        | Ankara Üniversitesi/Fizik Müh. Bölümü | 1997             |

### Yabancı Dil

İngilizce

### Yayınlar

1. B Kutlu, A Özkan, N Seferoğlu, A Solak, B Binal, “The Tricritical Behavior of the 3D Blume-Capel Model on a Cellular Automaton”, Int. Journal of Mod. Phys. C, Vol.16(6) (2005) 933.
2. A Özkan, N Seferoğlu, B Kutlu, “Critical exponents of the three dimensional Blume-,capel model on a cellular Automaton”, Physica A, 362 (2006) 327.
3. N Seferoğlu, A Özkan, B Kutlu, “Finite Size Effect for the First-Order Phase transition of the Three-Dimensional Blume-Capel Model on a cellular Automaton”, Chin. Phys. Lett., 23(9) (2006) 2526.
4. A Özkan, B Kutlu, “Phase Diagrams of the FCC Blume-Emery Griffiths Model on a Cellular Automaton”, Int. Journal of Mod. Phys. C,(2007) Kabul edildi.

### Sunumlar

1. 8. İstatistik Fizik Günleri, “İki Boyutlu Ising Model için Şekil Etkisinin Creutz Cellular Automaton ile incelenmesi.”, İTÜ2000,.(Kısa konuşma)
2. 11.Yoğun Madde Fiziği Toplantısı, “Boyutlu Blume-Capel Modelde Soğutma Hızının Etkisi”,*B. Kutlu, A. Özkan, N. Seferoğlu, Gazi Ü.2004.(Poster)*
3. 22. TFD Fizik Kongresi,“Üç Boyutlu Dipolar-Quadropolar Etkileşmeli Spin-1 Ising Modelin Cellular Automaton ile İncelenmesi”, Bodrum,2004.(Kısa konuşma)
4. 13. Yoğun Madde Fiziği Toplantısı, “Spin-1 Ising Blume Emery Griffiths Modelde Re-entrant Faz Geçişinin Yüz Merkezli Kübik (FCC) Örgü Üzerinde Cellular Automaton ile İncelenmesi”, ODTÜ, 2006 (Poster)

### Proje

1. Spin-1 Ising (BEG) Modelin Cellular Automaton ile Simülasyonu (TBAG-2109 (101T139)).
2.  $(III-V)_{1-x}IV_{2x}$  tipi yarı kararlı alaşımların yapısal faz geçişinin cellular automaton ile incelenmesi (BAP:05/2003-07).

### Staj

TAEK, ANAEM, SARAY

Malzeme Bölümü

1996