

**DÖRT BOYUTLU ISING MODELİN $(24)_3^4$ VE $(24)_4^4$ ÖRGÜLERİNDE
CREUTZ CELLULAR AUTOMATON İLE İNCELENMESİ**

Turgay SEYDİOĞLU

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**OCAK 2007
ANKARA**

Turgay SEYDİOĞLU tarafından hazırlanan DÖRT BOYUTLU ISING MODELİN $(24)_3^4$ ve $(24)_4^4$ ÖRGÜLERİNDE CREUTZ CELLULAR AUTOMATON İLE İNCELENMESİ adlı bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.

Prof. Dr. Abdullah GÜNEN
Tez Yöneticisi

Bu çalışma, jürimiz tarafından oy birliği / oy çokluğu ile Fizik Anabilim Dalında Yüksek lisans tezi olarak kabul edilmiştir.

Başkan: : Prof. Dr. Mehmet ZENGİN (A.Ü.)

Üye : Prof. Dr. Abdullah GÜNEN (Danışman)

Üye : Prof. Dr. Mehmet ÇİVİ

Üye : Doç. Dr. Şemsettin ALTINDAL

Üye : Doç. Dr. Şeref OKUDUCU

Tarih : 26/01/2007

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 eksiksiz atıf yapıldığını bildiririm.

Turgay SEYDİOĞLU

**DÖRT BOYUTLU ISING MODELİN $(24)_3^4$ VE $(24)_4^4$ ÖRGÜLERİNDE
CREUTZ CELLULAR AUTOMATON İLE İNCELENMESİ
(Yüksek Lisans Tezi)**

Turgay SEYDİOĞLU

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
Ocak 2007**

ÖZET

Dört boyutlu Ising model $(24)_3^4$ ve $(24)_4^4$ sonlu örgüleri için Creutz “Cellular Automaton” ile simüle edildi. Simülasyonlar 720 000 zaman adımı üzerinden yapıldı. Kendiliğinden mıknatıslanma (düzen parametresi), manyetik alınganlık ve özısının kritik sıcaklıkları tespit edilerek statik kritik üsler bulundu ve daha sonra kritik üsler üç ve dört bitli demonlar için karşılaştırıldı.

Bilim Kodu : 202.1.147
Anahtar Kelimeler : Ising Model, Creutz Cellular Automaton, Kritik Üsler
Sayfa Adedi : 45
Tez Yöneticisi : Prof.Dr.Abdullah GÜNEN

**STUDY OF FOUR DIMENSIONAL ISING MODEL FOR $(24)_3^4$ AND $(24)_4^4$
FINITE LATTICES USING CREUTZ CELLULAR AUTOMATON
(M.Sc. Thesis)**

Turgay SEYDİOĞLU

**GAZI UNIVERSITY
INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY
January 2007**

ABSTRACT

The four-dimensional Ising model is simulated for $(24)_3^4$ and $(24)_4^4$ finite lattices on the Creutz cellular automaton. Simulations are carried out for 720 000 time step. After the obtaining critical temperature of order parameter, magnetic susceptibility and specific heat, the static critical exponents are obtained and then compared with static exponents for demons three and four binary bits.

Science Code : 202.1.147

Key Words : Ising Model, Creutz Cellular Automaton, Critical exponents

Page Number : 45

Adviser : Prof. Dr. Abdullah GÜNEN

TEŞEKKÜR

Bu çalışmayı yürütebilmem için değerli yardımlarını esirgemeyen tez yöneticim Sayın Prof. Dr. Abdullah GÜNEN'e teşekkür ederim. Ayrıca tüm çalışmalarım boyunca desteklerini esirgemeyen arkadaşlarım Arş. Gör. Ganimet MÜLAZIMOĞLU KIZILIRMAK, Ayşe DURAN ve eşim Yeliz SEYDİOĞLU' na teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖZET	iv
ABSTRACT	v
TEŞEKKÜR.....	vi
İÇİNDEKİLER	vii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ.....	ix
ŞEKİLLERİN LİSTESİ	x
1.GİRİŞ	1
2. TEORİ	6
2.1. Evrensel Davranış	6
2.2. Düzen Parametresi	6
2.3. Ising Model	7
2.3.1. Dört boyutlu Ising model.....	10
2.4. Kendiliğinden Mıknatıslanma M, Manyetik Alınganlık χ ve Özısı C'nin Sıcaklık Bağımlılıkları	11
3. ISING MODELİN SİMÜLASYONU İÇİN ALGORİTMALAR	14
3.1. Metropolis Algoritması	14
3.2. Swendsen-Wang Algoritması.....	15
3.3. Wolff Algoritması	16
3.4.Creutz' un Gezgin “ Demon” Algoritması.....	17
3.5. “Cellular Automaton” lar	18
3.5.1. Q2R “cellular automaton”ı	19
3.5.2. Creutz “cellular automaton”ı	19

Sayfa

3.5.3. Creutz cellular automatonda termodinamik niceliklerin hesabı	21
4. ARAŞTIRMA BULGULARI	23
4.1. Termodinamik Niceliklerin Sıcaklıkla Değişimi	23
4.1.1. Özısının sıcaklıkla değişimi.....	23
4.1.2. Kendiliğinden mıknatıslanmanın sıcaklıkla değişimi.....	25
4.1.3. Manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişimi.....	27
4.2. α , α' , β , β' , γ , γ' Statik Kritik Üslerin Hesabı.....	29
4.2.1. Özısı için α ve α' kritik üsleri	30
4.2.2. Kendiliğinden mıknatıslanma için β ve β' kritik üsleri	33
4.2.3. Manyetik alınganlık için γ ve γ' kritik üsleri.....	36
5. SONUÇ VE ÖNERİLER	40
KAYNAKLAR	42
ÖZGEÇMİŞ	45

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 4.1. $L=24$ örgüsü için demon değişimine bağlı olarak $T_c^C(L)$ özısı kritik sıcaklığının değişimi	25
Çizelge 4.2. $L=24$ örgüsü için demon değişimine bağlı olarak manyetik alınganlık kritik sıcaklığının değişimi.....	29
Çizelge 4.3. Üç ve dört bitli demonlar için 720 000 zaman adımlarında $T < T_c$ için özısı kritik üsleri	33
Çizelge 4.4. Üç ve dört bitli demonlar için 720 000 zaman adımlarında $T < T_c$ için düzen parametresi kritik üsleri.....	36
Çizelge 4.5. Üç ve dört bitli demonlar için 720 000 zaman adımlarında $T < T_c$ için manyetik alınganlık kritik üsler	39

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 4.1. Üç bitli demonlar kullanılarak elde edilen 720 000 zaman adımıında özısının sıcaklıkla değışimi.....	24
Şekil 4.2. Dört bitli demonlar kullanılarak elde edilen 720 000 zaman adımıında özısının sıcaklıkla değışimi.....	24
Şekil 4.3. Üç ve dört bitli demonlar kullanılarak elde edilen 720 000 zaman adımıında özısının sıcaklıkla değışimi.....	25
Şekil 4.4. Üç bitli demonlar kullanılarak elde edilen 720 000 zaman adımıında düzen parametresinin sıcaklıkla değışimi	26
Şekil 4.5. Dört bitli demonlar kullanılarak elde edilen 720 000 zaman adımıında düzen parametresinin sıcaklıkla değışimi	26
Şekil 4.6. Üç ve dört bitli demonlar kullanılarak elde edilen 720 000 zaman adımıında düzen parametresinin sıcaklıkla değışimi	27
Şekil 4.7. Üç bitli demonlar kullanılarak elde edilen 720 000 zaman adımıında manyetik alınganlığın sıcaklıkla değışimi	28
Şekil 4.8. Dört bitli demonlar kullanılarak elde edilen 720 000 zaman adımıında manyetik alınganlığın sıcaklıkla değışimi	28
Şekil 4.9. Üç ve dört bitli demonlar kullanılarak elde edilen 720 000 zaman adımıında manyetik alınganlığın sıcaklıkla değışimi	29
Şekil 4.10. $T < T_c$ için, üç bitli demonlar için 720 000 zaman adımı için $\text{Log } C - \text{Log } t$ 'a göre değışimi	31
Şekil 4.11. $T < T_c$ için, dört bitli demonlar için 720 000 zaman adımı için $\text{Log } C - \text{Log } t$ 'a göre değışimi	31
Şekil 4.12. $T < T_c$ için, üç bitli demonlar için 720 000 zaman adımı için $\text{Log}(C/ \text{Log}^{1/3}t) - \text{Log } t$ 'a göre değışimi.....	32
Şekil 4.13. $T < T_c$ için, dört bitli demonlar için 720 000 zaman adımı için $\text{Log}(C/ \text{Log}^{1/3}t) - \text{Log } t$ 'a göre değışimi.....	32

Şekil	Sayfa
Şekil 4.14. $T < T_c$ için, üç bitli demonlar için 720 000 zaman adımı için $\text{Log} M - \text{Log} t$ 'a göre değişimi	34
Şekil 4.15. $T < T_c$ için, dört bitli demonlar için 720 000 zaman adımı için $\text{Log} M - \text{Log} t$ 'a göre değişimi	34
Şekil 4.16. $T < T_c$ için, üç bitli demonlar için 720 000 zaman adımı için $\text{Log}(M/ \text{Log}^{1/3} t) - \text{Log} t$ 'a göre değişimi	35
Şekil 4.17. $T < T_c$ için, dört bitli demonlar için 720 000 zaman adımı için $\text{Log}(M/ \text{Log}^{1/3} t) - \text{Log} t$ 'a göre değişimi	35
Şekil 4.18. $T < T_c$ için, üç bitli demonlar için 720 000 zaman adımı için $\text{Log} \chi - \text{Log} t$ 'a göre değişimi	37
Şekil 4.19. $T < T_c$ için, dört bitli demonlar için 720 000 zaman adımı için $\text{Log} \chi - \text{Log} t$ 'a göre değişimi	37
Şekil 4.20. $T < T_c$ için, üç bitli demonlar için 720 000 zaman adımı için $\text{Log}(\chi/ \text{Log}^{1/3} t) - \text{Log} t$ 'a göre değişimi	38
Şekil 4.21. $T < T_c$ için, dört bitli demonlar için 720 000 zaman adımı için $\text{Log}(\chi/ \text{Log}^{1/3} t) - \text{Log} t$ 'a göre değişimi	38

1.GİRİŞ

Bir maddenin kararlı bir yapısının, sıcaklık değişimi sonucu belirli bir sıcaklıkta diğer bir yapıya ani dönüşümü faz geçişi olarak adlandırılır. Faz geçişine en iyi örnek günlük hayatta karşılaştığımız suyun faz değiştirmesidir. Ancak diğer maddelerin de faz değiştirmeleri oldukça önemlidir. Örneğin demir (Fe), kobalt (Co), nikel (Ni) gibi maddeler Curie sıcaklığı olarak bilinen kritik sıcaklığın (T_c) altında ferromanyetik özellik gösterirken, Curie sıcaklığının üstünde paramanyetik özellik gösterirler. Curie noktası, kaynama veya donma noktası gibi kritik bir sıcaklıktır yani maddenin ferromanyetik durumundan paramanyetik durumuna olan ani geçiş sıcaklığıdır. Faz geçişleri yoğun madde fiziğinin temel araştırma alanlarından biridir. Sıvıdan gaza, normal iletkenlikten süper iletkenliğe veya paramanyetiklikten ferromanyetikliğe geçişler faz geçişleri için en yaygın örneklerdir [1,2].

Maddeler manyetik özelliklerine göre Diyamanyetik, Paramanyetik ve Ferromanyetik olmak üzere üç grupta toplanır. Paramanyetik ve Ferromanyetik maddeler, sürekli manyetik dipol momentli atomlara sahipken, diyamanyetik maddeler sürekli manyetik dipol momente sahip değildirler [3]. Ising model [4] ferromanyetizmanın anlaşılması için iyi bir model oluşturmaktadır. Miknatıslanmanın kaynağı, tamamlanmamış atomik tabakalardaki elektronların spinidir. Elektronun spin hareketi etkin bir akım ilmeği ve dolayısı ile bir manyetik moment oluşturur. Bir elektronun spininden kaynaklanan iç manyetik momentinin değeri Bohr Magnetonu kadardır. Her bir elektronun spini, bir Bohr magnetonu kadar manyetik moment taşır. Yörünge açısal momentumlarından bir katkı gelmez. Herhangi bir maddenin manyetik dipol momentinin o maddenin hacmine oranı miknatıslanmayı vermektedir. Ferromanyetizma tek kalmış elektronun spininden kaynaklanır, yani son yörüngesinde elektron çiftlenimi olmayan atomlarda gözlenir. Ferromanyetik maddeler kalıcı (doğal) miknatısların yapımında kullanılmaktadır. Ferromanyetik maddeler zayıf bir dış manyetik alan içinde bile birbirine paralel olarak yönelmeye çalışan manyetik dipol momentlere sahiptirler. Birbirine paralel yönelmiş manyetik dipol momentler dış manyetik alan ortadan kaldırıldığında bile madde miknatıslanmış olarak kalacaktır. Ferromanyetik maddelerde ne kadar çok

spin aynı yöne yönelirse spin sisteminin etkileşme enerjisi de o kadar düşük olacaktır. Sıcaklık, mutlak sıfıra (0 K) ulaştığında sistem en düşük enerjiye sahip olur, spinlerin tümü aynı yönde olup maddenin mıknatıslanması en büyüktür ve bu sistem ferromanyetiktir. Sıcaklık arttıkça spinler rastgele yönelmeye başlar. Yani maddenin mıknatıslanması azalarak Curie sıcaklığı adı verilen kritik sıcaklıkta (T_c) sıfır olacaktır. Kritik sıcaklığın (T_c) altında ferromanyetik fazda bulunan madde, kritik sıcaklığın üstündeki sıcaklıklarda spinler rastgele yöneldiklerinden paramanyetik fazda bulunur. Bu düzensiz faz paramanyetik hal olarak bilinir. Paramanyetik maddede, manyetik momentler rasgele yönelmiştir. Ancak manyetik dipol moment vardır. Bu manyetik dipol momentler, bir dış manyetik alan içine konulduğunda alan yönünde yönelmeye zorlanır. Bu durumda madde mıknatıslanmış olur. Dış manyetik alan ortadan kaldırıldığında manyetik dipol momentler eski hallerini alırlar. Atomları sürekli manyetik dipol momente sahip olmayan maddelere ise diamanyetik maddeler denir. Diamanyetik maddeye bir dış manyetik alan uygulandığında bu alana zıt yönde zayıf bir manyetik dipol moment oluşur. Diamanyetik madde bu durumda mıknatıslanmış olur [3]. Faz geçişlerinde kritik sıcaklığın altında düzene olan eğilim daha fazla iken kritik sıcaklığın üstünde düzensizliğe olan eğilim daha fazladır [5].

Ising modeli, faz geçişi yapabilen sistemleri en iyi anlatan modeldir. Ising model spinler arası basit etkileşmeleri inceler. Ising modelin en basit hali, iki durumlu, bir tane düzen parametrelili bir sistem olan $spin \frac{1}{2}$ Ising modelidir [4]. Bu çalışmada Ising model denilince $spin \frac{1}{2}$ Ising model anlaşılmalıdır. $Spin \frac{1}{2}$ Ising modelinin bir boyutlu hali, E. Ising tarafından 1925'teki tezinde çözülmüştür. Faz geçişi gösteren sistemler için geliştirilen modellerin tam çözümleri, hem uzundur hem de çok az durumda başarılı olmuşlardır. Periyodik sınır koşulları altında sonsuz kare örgü için Ising modelin iki boyutta tam çözümü Onsager tarafından gerçekleştirilmiştir [6].

Sonlu kare örgüler için Ising modelin analitik çözümü mümkün olmadığından simülasyon tekniklerine başvurulmaktadır. Serbestlik derecesi büyük olan karmaşık sistemlerin laboratuvar ortamında incelenmesi teknik açıdan hem çok zor ve pahalı olmakta hem de çok zaman almaktadır. Bu nedenle simülasyon yöntemi, deneysel

alışmaların bilgisayar ortamında yapılabilmesini mümkün kılmaktadır. Simölasyon sonuçları teorik sonuçların yanı sıra deneysel sonuçlar ile de test edilir. Yani bilgisayar simölasyon alışmaları deneysel ve teorik alışmalar arasında bir köprü oluşturmaktadır. Simölasyon tekniğı ile sistemin termodinamik niceliklerinin özellikleri anlaşılabilir. Monte Carlo [7-9] ve Molekül Dinamiğı [10,11] istatistik sistemlerin sayısal simölasyonu, faz geişi ve kritik olay alışmalarında kullanılan en temel araçlardır.

Monte Carlo yöntemi şans karakterli olduğundan bu isimle anılır. Sistemin konfigürasyonlarını (spin konumlarını) örneklemede rasgele sayılar kullanılır. Monte Carlo yönteminin bir alternatifi Molekül Dinamiğı olarak bilinir. Moleküler Dinamik Simölasyon [12], çok paracıklı sistemlerin dinamik özelliklerini incelemede kullanılır. Simölasyon, sistemi oluşturan paracıkların, sabit toplam enerjide klasik hareket denklemlerini nümerik olarak çözmekten ibarettir. Zamana bağılı olarak atom veya moleküllerin konum, hız veya yönelimlerinin nasıl değıştiğı bulunur. Klasik bir dinamik sistem için Hamilton denklemlerinin sayısal integrasyonunu içermektedir. Molekül Dinamiğı özellikle katı ve sıvıların molekül yapıları, enerjileri ve hareketleri ile “bulk” (paracık sayısının sonsuz olduğu durum) özelliklerinin ayrıntılı bir şekilde araştırılmasına imkan sağlamaktadır. Bu yöntemde rasgele sayı üretici kullanılmamaktadır. Yöntem, sistemin istatistik yapısı büyük bir faz uzayının karmaşıklığından meydana gelmektedir.

Çok önemli ve çok kullanılan algoritmalardan biri, Markov yöntemi olarak bilinir ve ilk olarak 1953 yılında Metropolis ve arkadaşları tarafından oluşturulmuştur. [12,13]. Metropolis ve arkadaşlarının algoritması ile Molekül Dinamiğı arasına giren diğerk bir simölasyon yöntemi 1983’ de M. Creutz [14] tarafından geliştirilmiştir. Bu yöntem gezgin demon modeli olarak bilinmektedir. 1986’da M.Creutz Ising modelin deterministik bir “cellular automaton (CA)” kuralı ile simölasyonunu iki boyutlu uzayda gerçekleştirmiştir [15].

“Cellular automaton” ilk olarak Neuman ve Ulam tarafından “cellular space” adı ile biyolojik sistemlerin simölasyonu için önerilmiştir [16,17]. Cellular automaton

fiziksel sistemler için matematiksel bir modeldir. En basit durumda 0 veya 1 değerini alabilen bir hücre veya örgü noktaları satırından oluşur. Bu değerler sabit bir kurala göre kesikli zaman adımlarında yenilenir. “Cellular automaton” hücreleri herhangi bir boyutta düzenli bir örgü üzerinde sıralanabilir. Bu model için ilk temel teoriler 1983 yılında Wolfram tarafından verilmiştir. Fizik, Kimya ve Biyoloji’deki dinamik sistemler için pek çok uygulamaları vardır.

Ising modelin simülasyonu için de iki farklı “cellular automaton” algoritması vardır. Bu algoritmalarından ilki Q2R; Vichniac, Pome ve Herrmann [18,19] tarafından sunulmuştur. Diğeri ise Creutz tarafından ortaya atılmış olup Creutz “cellular automaton” adı ile anılmaktadır [15].

Q2R modelinde spinlerin etkileşme enerjileri, sistemin toplam enerjisine karşılık gelmektedir. Böylece toplam enerjinin korunduğu mikrokanonik bir küme oluşmakta, yani simülasyon süresince herhangi bir spin değişiminde iç enerjinin korunduğu konfigürasyonlar üretilmektedir. İç enerji simülasyon süresince sabit kaldığından özısı, iç enerjinin dalgalanmaları kullanılarak hesaplanamamaktadır. Bu problem, iç enerji dalgalanmalarının dikkate alındığı Creutz “cellular automaton” ile ortadan kalkmaktadır [15]. Creutz (CA) modeli, Monte Carlo modeline göre çok daha hızlı çalışmakta ve kaliteli rasgele sayı üreticine ihtiyaç duymamaktadır. Creutz (CA) algoritmasında herhangi bir spin değişimi sonucunda, Ising enerji ve kinetik enerji birlikte değişmekte, ancak toplam enerji sabit kalmaktadır. Bunun sonu olarak Creutz algoritması kullanılarak konfigürasyonlar üretilmektedir. Elde edilen bu konfigürasyonlar sayesinde termodinamik nicelikler hesaplanmaktadır.

Deneyisel veriler, klasik tahminler ve iki boyutlu Ising modelin tam çözümü uzay boyutunun kritik üsleri belirlenmekte önemli rol oynadığını göstermiştir. Bu nedenle yüksek boyutlarda Ising modelinin incelenmesi önem taşımaktadır. Sonsuz örgülerde Ising model teorik olarak çözülebilmesine rağmen sonlu örgülerde tam olarak çözülememiştir [20-22].

Bu çalışmada, dört boyutta Creutz “Cellular Automaton”un Ising modelle ilgili

kendiliğinden mıknatıslanma, manyetik alınganlık ve özısı gibi termodinamik niceliklerin faz geçiş bölgesindeki süreksizliklerini tanımlayan $\alpha, \alpha', \beta, \beta', \gamma, \gamma'$ statik kritik üslerini hesaplamak hedeflenmiştir. Yapılan bu çalışmada, dört boyutlu üç ve dört bitli $L=24$ örgüsünde hesaplamalar, 720 000 zaman adımı üzerinden yapılmış olup sonuçlar demon a ait bit sayıları arasında kıyaslanarak yorumlanmıştır.

2. TEORİ

2.1. Evrensel Davranış

Oksijen, Azot gibi gazların sıvı ve buhar yoğunluklarının gerçek değişimleri evrensel bir davranış özelliği gösterir. Sıcaklık ve yoğunluk normalize edildiğinde farklı gazlar için data değerleri birlikte var olma eğrisi üzerine düşer. Birlikte var olma eğrisi parabolik özellik taşır. $T \rightarrow T_c$ olduğu zaman sıvı ve buhar yoğunlukları farklı $\rho_{sıvı} - \rho_{buhar} \propto |t|^\beta$ kritik üste bağlı olarak sıfıra gider. Burada t boyutsuz birimlerde sıcaklığın kritik değerde sapmasını ölçen indirgenmiş sıcaklık, β ise kritik üs olup sıvının cinsinden bağımsızdır. Evrensellik farklı sistemlerin aynı kritik üslere sahip olması olarak adlandırılır. Ksenon (Xe) ve Kükürt Florür (SF₂) farklı kritik sıcaklıklara sahip oldukları halde kritik üs değerleri aynıdır [1]. Yani aynı evrensellik sınıfındaki tüm sistemler aynı kritik üslere sahiptirler [23,24].

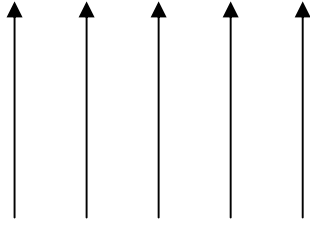
2.2. Düzen Parametresi

Düzen parametresi düşünülen sistemin sınıflandırılmasına bağlı tensörel bir niceliktir. Düzen parametresi faz geçişindeki parametrelerden biridir ve genellikle Ψ ile gösterilir. Tek bileşenli akışkanlar için $\psi = \rho$ (yoğunluk), akışkan karışımları için $\psi = \Delta X$ (mol kesirleri arasındaki fark), süper akışkanlar için kompleks düzlemde iki bileşenli vektördür. Ferromanyetizmada ise düzen parametresi manyetizasyondur ve M ile gösterilir. Manyetizasyon üç bileşenli bir vektör olarak düşünülebilir ($M=(M_x, M_y, M_z)$). Manyetizasyon herhangi bir yöne serbestçe yönelebilir. Düzen parametresinin bileşenlerinin sayısı n ile gösterilirse basit akışkanlar için $n=1$, süper akışkanlar için $n=2$ ve izotropik mıknatıslar için $n=3$ dür.

Klasik teori kritik üsler arasında n bağımlılığını açıklayamaz. n durumun farkına göre kritik üsler arasında hafif farklar vardır. Buna göre düzen parametresinin tensörel karakteri yada simetrisi oldukça önemlidir [25].

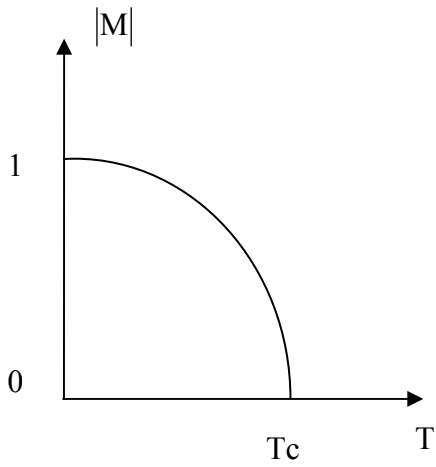
2.3. Ising Modeli

Ising model spinler arası etkileşimleri içeren ferromanyetik maddelerin gösterdiği termodinamik davranışların anlaşılmasını sağlayan bir modeldir. Ferromanyetik madde Ising model ile modellenmektedir. Ferromanyetik madde kendiliğinden mıknatıslanma oluşturacak şekilde düzenlenmiş spinler setidir (Şekil 2.1).



Şekil 2.1. Ferromanyetik metalin spin düzeni

Ferromanyetik metallerde (Fe, Ni, Co gibi) dış manyetik alanın yokluğunda bile kritik sıcaklık (T_c)'tan düşük sıcaklıklarda kendiliğinden mıknatıslanma oluşmaktadır. Kendiliğinden mıknatıslanma kritik sıcaklıkta sıfır olmaktadır (Şekil 2.2). Kritik sıcaklığa her iki yandan yaklaşıldığında ferromanyetik metalin özısı ve manyetik alınganlığı ıraksamaktadır.



Şekil 2.2. $H=0$ da kendiliğinden mıknatıslanma $|M|$ 'nin sıcaklıkla değişimi.

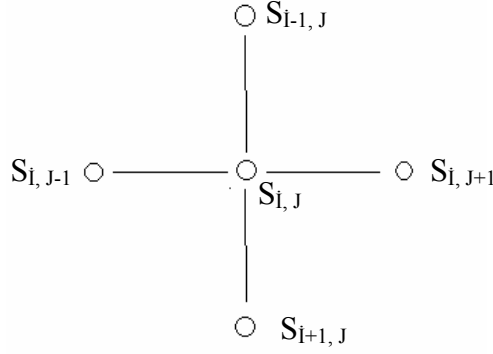
Karakteristik özelliklerini belirli bir sıcaklıkta tamamen kaybeden sistemlerin “ikinci dereceden faz geçişi” yaptığı düşünülür. Bu şekilde faz geçişi sonrasında sıfır, öncesinde ise sıfırdan farklı olan niceliklere “düzen parametresi” denir. Curie-Weiss olarak bilinen Eş. 2.1, “ $T=T_c$ ’ de manyetik alınganlık χ sonsuz olduğundan, dış manyetik alanın sıfır ($H=0$) olması durumunda bile sonlu bir manyetizasyon (M) değeri bulunabilir” şeklinde yorumlanabilir.

$$\chi = \frac{M}{H} = \frac{C}{T - T_c} \quad (2.1)$$

Ising modelde incelenen sistem, örgü konumları adı verilen N tane sabit noktadan oluşan n -boyutlu periyodik bir örgüdür. Örgünün geometrik yapısı iki boyutta kare veya üçgen, üç boyutta kübik veya hegzogonal ve dört boyutta ise basit hiperkübik olabilir. Örgünün her bir konumuna, $+1$ veya -1 değerlerinden birisini alabilen S_i ($i=1,2,...,N$) spin değişkeni takılmıştır. Sistemde bundan başka değişken yoktur. Eğer $S_i=+1$ ise i . konumun spin yukarı durumda olduğu ve $S_i=-1$ ise spin aşağı durumda olduğu söylenir. Verilen bir $\{S_i\}$ kümesi bütün sistemin konfigürasyonunu belirtmekte ve $\{S_i\}$ ile belirtilen konfigürasyonuna sahip olan bir sistemin enerjisi aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır.

$$E_I = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - H \sum_{i=1}^N S_i \quad (2.2)$$

Burada E_I Ising enerjisi, $\langle ij \rangle$ en yakın komşu spin çiftleri üzerinden toplamı göstermektedir. J_{ij} (en yakın komşu etkileşme sabiti) ve H dış manyetik alan sabit olarak verilmektedir. İki boyutta kare örgü için Şekil 2.3’ de görüldüğü gibi bir spin dört en yakın komşu spine sahiptir. $\langle ij \rangle$ üzerinden toplam $2N$ terim ihtiva etmektedir. J_{ij} etkileşme enerjisi ve H dış manyetik alan sabit olarak verilmektedir.



Şekil 2.3. İki-boyutlu kare örgü için en yakın komşu spinler

İzotropik etkileşmelerin olduğu durumda $J_{ij}=J$ alınmakta ve $J>0$ olduğu durum ferromanyetizmaya, $J<0$ olduğu durum ise antiferromanyetizmaya karşılık gelmektedir. Ising modelde bütün termodinamik fonksiyonlar E_I enerjili mümkün konfigürasyonlar üzerinden hesaplanmaktadır. $\{S_i\}$ spin kümesi mikrokanoik topluluk kavramına uymaktadır, fakat analitik çalışmalarında kanonik topluluk kullanılmaktadır. E_I enerjili sistemin dağılım fonksiyonu aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır:

$$Z_I(H, T) = \sum_{S_i} \exp[-E(s_i)/kT] \quad (i=1,2,3,\dots) \quad (2.3)$$

Burada k Boltzmann sabiti olup $k = \frac{1}{\beta T}$ dir. Z_I kanonik topluluk için tanımlanan ağırlık fonksiyonu aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$Z_I(H, T) = \sum_{E_1} \sum_{E_2} \dots \sum_{E_N} e^{-\beta E_I(s_i)} \quad (2.4)$$

Burada her bir S_i spin değişkeni bağımsız olarak ± 1 değerleri alabildiğinden, yukarıdaki toplam 2^N terimden oluşmaktadır. Termodinamik nicelikler genel olarak spin başına serbest enerjiden elde edilmektedir. Serbest enerji aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır:

$$f(H, T) = -k T N^{-1} \log Z_I(H, T) \quad (2.5)$$

Bu serbest enerjiye bağılı olarak spin başına termodinamik nicelikler aşağıdaki şekilde tanımlanmaktadır:

$$U_1(H, T) = -kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{f}{kT} \right) \quad (2.6)$$

$$C_1(H, T) = \frac{\partial U_1}{\partial T} \quad (2.7)$$

$$M(H, T) = -\frac{\partial}{\partial H} \left(\frac{f}{kT} \right) \quad (2.8)$$

$$\chi(H, T) = \frac{\partial M}{\partial H} \quad (2.9)$$

Burada U_1 iç enerji, C_1 özısı, M düzen parametresi ve χ manyetik alınganlıktır. Dış manyetik alan $H=0$ olduğu durumda $M(0, T)$ kendiliğinden mıknatıslanma veya düzen parametresi olarak adlandırılır. Ferromanyetik bir sistemde $M(0, T)$ sıfırdan farklıdır. Bu çalışmada $J > 0$ hali yani ferromanyetizma ve dış manyetik alan H 'nin sıfır olduğu durum göz önüne alınmaktadır. Ising model faz geçişi yapabilen sistemleri temsil eden bir modeldir. Faz geçişi serbest enerji veya onun türevlerinde singülerlik (ıraksama) oluştuğunda ortaya çıkar. İkili alaşım, örgü gazı modelleri uygun parametrelerle Ising modele özdeş hale getirilebilir. Fiziksel sistemlerin yanı sıra birçok alandaki problem Ising modele benzetilebilir. Bu nedenle Ising modelin çözümü oldukça önem kazanmaktadır [1,26].

2.3.1. Dört boyutlu Ising model

Ising evrensellik sınıfı için üst kritik boyut dördtür ($d=4$). Dört boyutlu Ising modelinin kesin sonucu bilinmediğinden dolayı nümerik çalışmalar oldukça önemlidir. Monte Carlo simülasyonları dört boyutlu Ising modelinin kritik özelliklerini araştırmak için kullanılmaktadır. Renormalizasyon grup yaklaşımı, üst

kritik boyutun altında kritik olayın anlaşılmasında oldukça başarılı olmuştur. Üst kritik boyutun üstü için ortalama alan teorisi geçerlidir. Renormalizasyon grup teorisine göre; üst kritik boyutta ($d=4$) ortalama alan davranışına logaritmik düzeltmeler gereklidir. Kuvvet kanunu ıraksamaları için bu tahmin edilen logaritmik düzeltmeler, dört boyutlu Ising modelinin ilk seri açılım sonuçlarında ortalama alan değerlerinden kritik üstlerin belirli sapmalarını izah etmek için kullanılmıştır. Bu Monte Carlo sonuçları ortalama alan teorisi için logaritmik düzeltmeleri ve marjinal davranışın bazı kanıtlarını göstermektedir. Fakat modelin sonlu örgü ölçekleme analizinde sistematiklik yoktur ve sonlu sistemlerinin doğrudan Monte Carlo simülasyonlarıyla bu etkileri gözlemek ilginçlik arz etmektedir. Dört boyutlu Ising modeli gerçek manyetik sistemlere uygulanmamasına rağmen üst kritik boyutta logaritmik düzeltme olasılığının bir genel durum oluşturması beklenilmektedir. Üst kritik boyut üç olduğu zaman bu logaritmik düzeltmeler gerçekte deneysel olarak gözlenebilir. Üstelik dört boyutlu Ising modelinin sonuçları sonlu örgü ölçekleme teorisi için ilginçlik göstermektedir [23].

2.4. Kendiliğinden Mıknatıslanma M , Manyetik Alınganlık χ ve Özısı

C 'nin Sıcaklık Bağımlılıkları

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

$$t = \frac{T - T_c}{T_c} \quad (2.10)$$

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

Termodinamik niceliklerden kendiliğinden mıknatıslanma (düzen parametresi) M ,

dış manyetik alanın olmadığı durumda kritik sıcaklığın altında T 'nin azalan bir fonksiyonudur ve T_c 'de sıfırdır. T 'nin T_c 'ye çok yaklaştığı durumlar için M aşağıda verilen kuvvet kanununa uygun olarak değişmektedir.

$$M(0, T) \sim t^{\beta'} \quad t \rightarrow 0^+ \quad (2.11)$$

$$M(0, T) \sim (-t)^{\beta} \quad t \rightarrow 0^- \quad (2.12)$$

Burada β ve β' kendiliğinden mıknatıslanma kritik üsleri olarak adlandırılmakta ve onların değerleri dört boyutlu Ising model için $\beta = \beta' = 0.50$ [22] olarak verilmektedir.

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

$$k T \chi(0, T) \sim t^{-\gamma} \quad t \rightarrow 0^+ \quad (2.13)$$

$$k T \chi(0, T) \sim (-t)^{-\gamma'} \quad t \rightarrow 0^- \quad (2.14)$$

Burada $\gamma = \gamma'$ 'dir ve her iki haldeki orantı katsayıları birbirinden farklıdır. Manyetik alınganlık kritik üssü dört boyutlu Ising model için teorik olarak $\gamma = \gamma' = 0,99$ [22] değerleri ile verilmektedir.

Dış manyetik alanın yokluğunda özısı C , kritik sıcaklıkta singüler bir davranış göstermektedir. Bu durum α , α' kritik üsleri ile karakterize edilmektedir.

$$C(0, T) \sim t^{-\alpha} + b^+ \quad t \rightarrow 0^+ \quad (2.15)$$

$$C(0, T) \sim (-t)^{-\alpha'} + b^- \quad t \rightarrow 0^- \quad (2.16)$$

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

3. ISING MODELİN SİMÜLASYONU İÇİN ALGORİTMALAR

Birçok fiziksel problem Ising modeli ile incelenebilmektedir. Ferromanyetik maddeler bu model ile modellenmekte ve termodinamik özellikleri incelenmektedir. Faz geçişi gösteren sistemler için ortaya konulan modellerin analitik çözümleri zor ve çok az durumda başarılı olduğundan bu sistemleri ele almakta bilgisayar kullanılması oldukça doğaldır. Faz geçişi ve kritik olay çalışmalarında ilerlemenin büyük bir kısmı bilgisayar simülasyon sonuçları sayesinde.

Monte Carlo ve Molekül Dinamiği ilk simülasyon çalışmaları olarak bilinir. Bu çalışmalar zamanla geliştirilmiş ve birçok yeni simülasyon metodu ile algoritma ortaya çıkmıştır.

1. Metropolis Algoritması
2. Swendsen-Wang Algoritması
3. Wolff Algoritması
4. Creutz' un Gezin " Demon" Algoritması
5. "Cellular Automaton" lar

Bu çalışmada Ising Model Creutz "Cellular Automaton" algoritması ile incelenmiştir.

3.1. Metropolis Algoritması

Metropolis ve arkadaşları tarafından 1953 yılında geliştirilen bu algoritma markov yöntemi ile konfigürasyonlar üretir. Markov yöntemi sistemin var olan konfigürasyonundan yeni konfigürasyonlar üretir. Sistemin spin konumlarının α durumundan α' durumuna değişimi ile sistemin enerjisindeki değişim hesaplanır. Enerji değişimi pozitif ise yeni konfigürasyon $e^{-\beta(E_{\alpha'} - E_{\alpha})}$ İhtimali ile kabul edilir. Yani ;

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

Burada A normalizasyon sabitidir. $\sum_{\alpha'} P(\alpha \rightarrow \alpha') = 1$ Denklemini sağlamak için seçilir. Metropolis algoritmasının başarısının temel sebebi pratik uygulanmasının oldukça açık olmasıdır. Simülasyonda ilk olarak tek spin ters çevrimliye ulaşılır. Bu spin rastgele seçilir yada örnek spinlerden her biri ters çevrilebilir. Daha sonra eski ve yeni enerjiler karşılaştırılır. Bir spinin ters çevrilmesi üzerine enerji değişimi sadece komşu spin değerlerine bağlıdır. Bilgisayar yoluyla yeni konfigürasyon verilen olasılığa göre kabul yada reddedilir.

3.2. Swendsen-Wang Algoritması

Spin kümesi “cluster” algoritmalarından biri olan Swendsen-Wang algoritması 1987 yılında Swendsen ve Wang tarafından sunulmuştur. Spinlerin kendiliğinden ters çevrilmesi ve spin kümelerinin “cluster” şeklinin belirlenmesine sistemin kendisinin karar vermesi fikrine dayanan ilk başarılı çalışmadır [4,27]. Bu Ising modeline de uygulanabilen bir algoritmadır. Öncelikle en yakın komşu 1 ve m hücresi seçilir. Bu 1 ve m hücreleri arasındaki katkıların çıkarıldığı eskisine eşit yeni bir hamiltonyen tanımlanır. Daha sonra s_i ve s_m spinlerinin aynı ya da zıt yönde olmalarına göre bu hamiltonyene uyan üleşim (partition) fonksiyonu hesaplanır. Swendsen ve Wang spin temsilinden bağ temsiline geçen ve tekrar geri dönen bir algoritma teklif etmişlerdir. Bu algoritma şöyledir:

1. Bir spin konumu alınır. Aynı yönde olanlar birleştirilerek bir bağlantılar ağı oluşturulur.
2. Bu bağlantılar $1 - e^{4\beta J}$ ihtimali ile korunur veya $e^{4\beta J}$ ihtimali ile silinir . bu basamak büyük spin kümelerini iki yada daha fazla küçük spin kümesine böler.

3. Temel birimler olarak yeni daha küçük spin kümelerinin yönelimleri ele alınır ve eşit olasılıkla rasgele olarak aşağı veya yukarı yönlendirilir.
4. Son olarak yeniden yönlendirilmiş spin kümelerinden başlangıçtaki spin örgüsü yeniden oluşturulur.

Bütün bu işlemler sistem için bir Monte Carlo yineleme basamağı olarak kabul edilir. Benzer iki spin arasındaki bağın silinmesinde mümkün olması ve herhangi bir durum tek basamakta başka birinden elde edildiğinden, bu işlemin girilebilirlik kriterini desteklediği anlaşılmaktadır.

3.3. Wolff Algoritması

Spin kümesi algoritmalarından diğeri olan Wolff algoritması 1989 yılında Wolff tarafından tanımlanmıştır. Swendsen-Wang algoritmasının mantığına benzer bir algoritmadır ve kritik yavaşlama problemini tamamen ortadan kaldırmaktadır. Bu algoritma bir Ising sistemi için tanımlanmıştır. Wolff algoritmasının yineleme basamağı bir spin kümesinde bulunan spinlerin yön değiştirmesi işlemini içerir. Bu algoritma şöyledir:

1. Örgü üzerinde rasgele bir i hücresi seçilir.
2. Bütün komşu j hücreleri ziyaret edilir ve $P_{ekle}(S_i S_j) \equiv 1 - e^{\min(0, 4\beta J S_i S_j)}$ ihtimaliyle j örgüsü i 'yi içeren spin kümesine eklenir. Ferromanyetik bir model için eğer spinler zıt yönde iseler P_{ekle} sıfır ve spinler aynı yönde iseler $1 - e^{-4\beta J}$ dır.
3. i 'li spin kümesi ile birleşen yeni hücrelerin her biri j indisine eşit alınarak ikinci basamak tekrarlanır.
4. Daha fazla yeni hücre ekleninceye kadar üçüncü basamak tekrarlanır.

5. Spin kümesindeki bütün hücelere ait spinler yön değıştirir ve işlem tamamlanır.

Wolff algoritması Swendsen-Wang algoritması ile oldukça benzerdir. Spin kümesine yeni bir spin bağlanma ihtimali Swendsen-Wang algoritmasında bir bağı yakalama ihtimali ile aynıdır. İki algoritmada da spin kümesinin artışı aynı ortalama üzerindedir. Fakat Swendsen-Wang algoritmasında bütün spin kümelerinde her basamakta bir spin yön değıştirir. Wolff yönteminde ise o sadece başlama spinini içeren spin kümesidir. Bu daha büyük spin kümelerinin bu işlemde daha sık böyle yön değıştirdiklerini göstermektedir. Bu büyük spin kümelerinde algoritmayı daha etkin yapar.

3.4. Creutz' un Gezgin “ Demon” Algoritması

1983 yılında M. Creutz tarafından geliştirilen simülasyon yöntemi Metropolis ve arkadaşlarının algoritması ile molekül dinamiğı arasına girmiştir [14]. Öncelikle “demon” (spine eşlenik momentum) denilen bir serbestlik derecesi tanımlanmaktadır. Bu yeni değışken molekül dinamiğindeki eşlenik momentumun benzeridir. Molekül dinamiğindeki eşlenik momentum kinetik enerjinin hesaplanmasında kullanılmasına benzer şekilde “demon” da kinetik enerji taşır. Sistemin toplam enerjisi korunacak şekilde gezgin “demon” rasgele olarak spinleri ziyaret eder. Demon bir hücreye ulaştığı zaman uygun bir spinin ters çevirmek için girişimde bulunur. Eğer spinin enerjisi düşükse “demon” spine enerji aktarır ve spinin ters çevrilmesine yetecek kadar enerji aktarılmışsa spin ters çevrilir. Aksi takdirde başka uygun bir hücredeki spinin ters çevirmek için hareket eder. Demon, enerjisini üstel olarak aktarır. Büyük sistemlerde demonun enerjisi toplam enerjinin sadece küçük bir kısmını gösterir. Demon'un spinleri rasgele ziyaret etmesinden dolayı bu algoritmaya Creutz'un gezgin “demon” algoritması denir. Bu algoritmada tek bir gezgin “demon” kullanılabileceğı gibi birden fazla gezgin “demon” da kullanılabilir.

3.5. “Cellular Automaton” lar

1983 yılında ilk temel teorisi Wolfram tarafından verilen “Cellular automaton” lar ilk olarak Neuman ve Ulam tarafından “cellular space” adı ile biyolojik sistemlerin simülasyonu için önerilmiştir [15,16,28]. Kinetik enerji terimi içeren dinamik Ising modeli ve diğer örgü spin sistemleri basit bir “cellular automaton” problemi olarak ele alınmaktadır. Daha genel olarak makroskobik seviyede her hücre birçok molekül ihtiva eden bir bölgeyi temsil edebilir ve onun değeri birkaç farklı mümkün fazlardan birini temsil edebilir. “CA” bu şekliyle doğrusal olmayan kimyasal sistemler için kesikli modeller olarak kullanılmıştır. “CA” larda uzay ve zaman kesikli değerlere sahiptir. Sonsuza kadar genişletilebilen düzenli hücreler örgüsünden oluşur. Örgünün her bir hücresinde kesikli değerler alabilen değişkenler yer almaktadır. Bir “CA” bu hücre değişkenlerinin değerleri ile belirlenmektedir. Genel olarak basit bir “cellular automaton” 0 veya 1 değerli hücre veya sitelerin bir satırından oluşur. Bu değerler kesikli her zaman adımı sırasında yenilenir. “Cellular automaton” un kesikli zaman adımlarındaki gelişimi sırasında bir hücre değişkeni bölgesel bir kurala uyarak bir önceki zaman adımında kendisi ve kendisine komşu hücrelerdeki değişkenlerin değerlerine bağlı olarak yeni değerini alır. Bir hücrenin komşusu ifadesi ile kendisi ve kendisine en yakın komşu hücreler kastedilmektedir. Hücrenin herhangi bir zaman adımındaki değişkenlerinin değerleri özdeş bir kural yardımıyla eş zamanlı olarak elde edilmektedir. Bir boyutlu “CA” larda bir hücrenin bir sonraki zaman adımında alacağı değeri belirleyen bölgesel kural, en yakın üç hücre değerinin fonksiyonu olarak tanımlanmaktadır. i. konumdaki bir hücrenin değeri a_i ile verilirse bu hücrenin yeni değerini veren kural

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

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

i. Sistemin yapısına uygun düzenli bir örgü (örneğin iki boyutta kare, üçgen, üç

boyutta küp, daha yüksek boyutlarda soyut küp) seçilir.

ii. Örgüyü oluşturan hücrelerin sahip olabileceği hallere karşılık gelen değişken veya değişkenler belirlenir.

iii. Hücrelerin birbiriyle etkileşme şeklini ve gelişimini sağlayan bir bölgesel kural tanımlanır.

Fiziksel sistemlerin yanı sıra biyoloji, kimya ve sosyal bilimlerdeki bir çok problem bir “cellular automato” olarak incelenebilmektedir. Biyolojide DNA’nın kopyasını yapan fonksiyonun bulunması, kalbin hızlı ya da yavaş çarpması, “filamentous” organizmalarının büyütülmesi “CA” ile modellenmiştir. Kimyada ise uzaysal diffüzyon ile çiftlenmiş reaksiyonların bir ağını içeren lineer olmayan kimyasal sistemler “CA” olarak modellenmiştir [28].

3.5.1. Q2R “cellular automaton”ı

Q2R algoritmasında rasgele bir konfigürasyonla hesaba başlanır. Spin-spin etkileşme enerjisi (Ising enerji veya iç enerji) sistemin toplam enerjisine karşılık gelmektedir. Örgünün her bir hücresi +1 ve -1 değerini alabilen bir spin ile işgal edilir. Her zaman basamağında, eğer değişecek spin aynı sayıda paralel ve paralel olmayan komşu spine sahipse işaretini değiştirir. Böylece ters dönen spin sistemin enerjisini değiştirmez. Simülasyonun bu tipi sabit enerjili mikrokronik kümeye uyar. Sabit sıcaklıklı kanonik kümeye uymaz. Bir kerede bütün spinler yenilenmez. Örgü iki alt örgüye bölünür. Önce bir yarısı daha sonra diğer yarısı yenilenir. Hiçbir manyetik alan dikkate alınmaz. İç enerji bütün simülasyon süresince sabit kaldığından özısı enerji dalgalanmaları kullanılarak hesaplanamamaktadır [11,17-19].

3.5.2. Creutz “cellular automaton”ı

1986 yılında M. Creutz tarafından geliştirilen simülasyon yöntemi Metropolis ve arkadaşlarının algoritması ile molekül dinamiği arasına girmiştir. [10] Bu algoritma

$2 \leq d \leq 8$ boyutlu uzaylardaki Ising modellerinin simülasyonlarında başarılı olmuştur [20,29]. Bu tez çalışmasında Creutz “cellular automaton”ında dört boyutlu Ising modelin simülasyonu yapılmaktadır. Her bir hücreye dört ikili “bit” karşılık getirilmektedir. Hücre değişkenlerinin alacağı değerler o değişkenin bir önceki zaman adımındaki kendi değerleri ile en yakın komşu değerlerinden elde edilmektedir. Altı ikili “bit”ten ilki B_i Ising spinidir. 0 veya 1 değerini alabilir. $S_i = 2B_i - 1$ olmak üzere sistemin Ising spin enerjisi H_I aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır.

$$H_I = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad (3.3)$$

Burada $\langle ij \rangle$ en yakın komşu hücre çiftleri üzerinden toplamı göstermektedir.

Kalan beş “bit” ten dördü “demon” veya spine eşlik eden momentuma karşılık gelmektedir. D_1, D_2, D_3 ve D_4 ile gösterilen bu bitler “0” veya “1” değerini alabilir. Buna göre (0,15) aralığındaki tamsayıları oluşturmaktadırlar. Yerleşik “demon”a ait kinetik enerji bu tamsayı değerlerinin dört katını almaktadır. Sistemin toplam enerjisi

$$H = H_K + H_I \quad (3.4)$$

korunur. H_K örgünün kinetik enerjisidir. Verilen bir toplam enerji için sistemin sıcaklığı T , kinetik enerjinin ortalama değerinden elde edilir.

$$\langle E_D \rangle = \sum_{n=0}^{15} n e^{-4n\beta} / \sum_{n=0}^{15} e^{-4n\beta} \quad (3.5)$$

Altıncı “bit” “cellular automaton” un zamanla dama tahtası düzeninde gelişimini sağlamaktadır. Her bir zaman adımında dama tahtasının siyah hücrelerine kural uygulanıp rengi beyaza çevrilir. Beyaz hücrelere ise kural uygulanmaksızın sadece rengi siyaha çevrilir. Bir hücrenin yenilenmesi için spini ters çevrilir. Sistemin iç enerji değişimi hesaplanır. Toplam enerji H korunmak üzere, eğer sistemin iç enerjisindeki değişim bu hücreye ait momentum değişkenine verilebilecek veya

ondan alınabilecek kadarsa, o zaman bu spinin yönünde değişiklik yapılır. Aksi halde spinin yönü ve momentumu değiştirilmez. Başlangıçta bütün spinler aşağı veya yukarı yönde alınırlar. İlk kinetik enerji örgüye rasgele verilir. Toplam enerjide sınırlama devam ettiği müddetçe rastgele hareket, konfigürasyon uzayı boyunca devam eder. Demon enerjisinin hesabı yapılırken bit sayısı göz önünde bulundurulur. Çünkü demon enerjisinin alacağı enerji değerleri bit sayısına bağlı olarak değişmektedir. İki bitten oluşan demon (0'dan 3'e kadar) dört enerji seviyesine, üç bitten oluşan demon (0'dan 7'e kadar) sekiz enerji seviyesine, dört bitten oluşan demon (0'dan 15'e kadar) on altı enerji seviyesine sahiptir. Demon enerjisi bu tam sayı değerlerinin dört katıdır. İki, üç ve dört boyutlu uzayda bir spin ters çevrildiğinde Ising enerjisinde meydana gelen değişim (ΔH_I), iki boyutlu uzayda 8, 4, 0, -4, -8 değerlerini, üç boyutlu uzayda 12, 8, 4, 0, -4, -8, -12 değerlerini, dört boyutlu uzayda 16, 12, 8, 4, 0, -4, -8, -12, -16 değerlerini almaktadır.

3.5.3. Creutz cellular automatonda termodinamik niceliklerin hesabı

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

Sistemde E_i kinetik enerjili konfigürasyona raslama ihtimali Boltzmann ağırlıklı üstel bir dağılıma uymaktadır.

$$P(E_i) \rightarrow \exp(-4\beta E_i) \quad (3.6)$$

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

$$\langle E_D \rangle = \sum_{n=0}^{15} n e^{-4n\beta} / \sum_{n=0}^{15} e^{-4n\beta} \quad (3.7)$$

Eş. 3.7 ile verilen kinetik enerjinin beklenen değeri ile sistemin sıcaklığı belirlenebilmektedir. Yukarıdaki ifade kullanılarak $T=1/\beta$ eşitliğinden sıcaklık değerleri belirlenir ve elde edilen bu sıcaklık değerine karşılık kendiliğinden mıknatıslanma M aşağıda verilen ifade yardımıyla hesaplanır.

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

Bu eşitlikteki $N=L_x L_y L_z$ ve 4 bitli örgüdeki hücre sayısına ve $\langle \rangle$ zaman üzerinden ortalamaya karşılık gelmektedir.

Elde edilen sıcaklık değerine karşılık manyetik alınganlık χ aşağıda verilen ifadeler yardımıyla hesaplanır:

$$H_i = -\frac{1}{2N} \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad (3.9)$$

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} = L^4 (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) / kT \quad (3.10)$$

Bu çalışmada dış manyetik alanın sıfır olduğu durum göz önüne alınmaktadır. Bu yüzden Eş. 3.9, manyetik alınganlık için dış manyetik alanın varlığında elde edilen ifadenin $H \rightarrow 0$ limitine karşılık gelmektedir.

Özısı (C) aşağıda verilen ifade yardımıyla hesaplanır.

$$\frac{C}{k} = \frac{\partial H_i}{\partial T} = L^4 \frac{\langle H_i^2 \rangle - \langle H_i \rangle^2}{(kT)^2} \quad (3.11)$$

Bu çalışmada bütün büyüklüklerin beklenen değerleri yedi ayrı setin basit aritmetik ortalamaları alınarak hesaplanmaktadır.

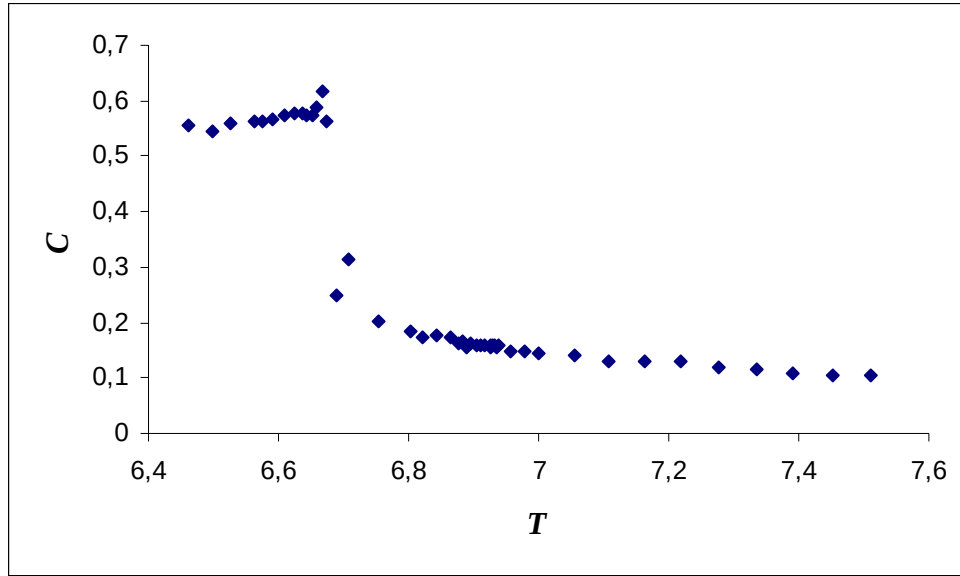
4. ARAŞTIRMA BULGULARI

4.1. Termodinamik Niceliklerin Sıcaklıkla Değişimi

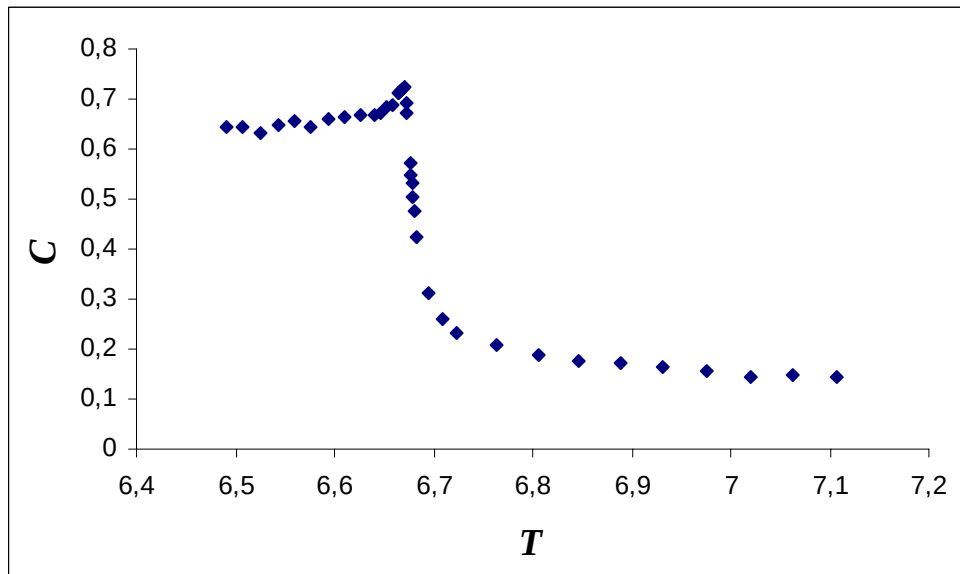
Doğrusal boyutu $L=24$ olan sonlu örgü için dört boyutlu basit hiperkübik örgülü Ising model, üç ve dört bitli demonlar kullanılarak 720 000 zaman adımında yedi bağımsız set oluşturularak Creutz cellular automaton ile simüle edildi. Simülasyon sonucunda termodinamik niceliklerden; sıcaklık, özısı, düzen parametresi (kendiliğinden mıknatıslanma) ve manyetik alınganlık değerleri hesaplandı. Çalıştırılan bu yedi setten elde edilen termodinamik niceliklerin ortalaması alındı. Bu ortalama değerler ile; özısı, kendiliğinden mıknatıslanma ve manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişim eğrileri çizildi. Özısı ve manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişim eğrilerinden, $T_c^C(L)$ ve $T_c^\chi(L)$ değerleri elde edildi ve elde edilen sonuçlar tartışıldı. Bu çalışmada; T sıcaklığı J/k_B biriminde, C özısı k_B biriminde, M kendiliğinden mıknatıslanması ve χ manyetik alınganlığı birimsizdir. Ayrıca t indirgenmiş sıcaklığı da birimsizdir.

4.1.1. Özısının sıcaklıkla değişimi

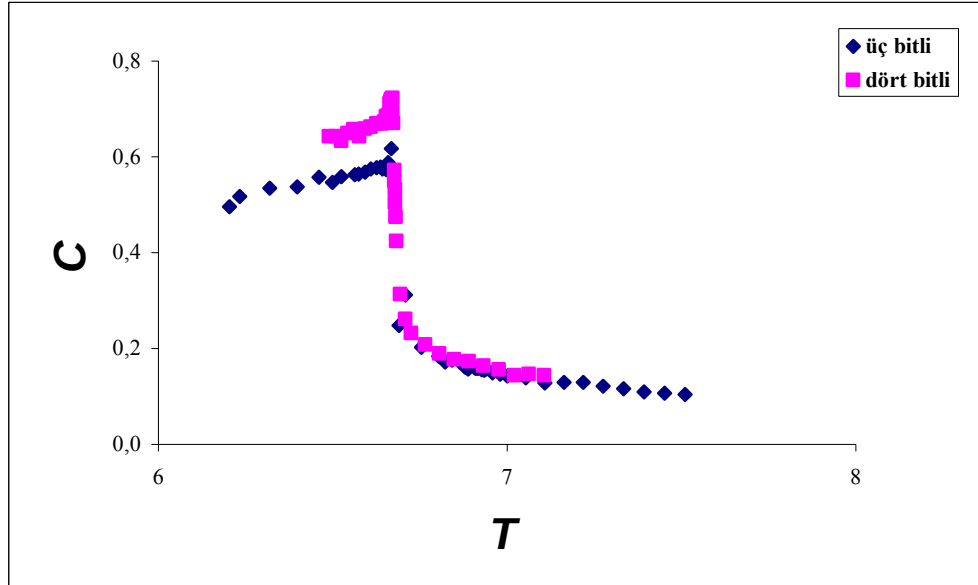
Simülasyon süresince iç enerji dalgalanmalarından yararlanarak, C özısının değeri bulundu. Sonsuz örgülerde T_c ’ de süreksizlik sergileyen özısı, belli bir sıcaklıkta maksimum bir değer aldı [30]. Özısının bu maksimum değerini aldığı T_c sıcaklığı, simülasyon sonucunda elde edilen verilerin ortalaması alınarak özısının sıcaklıkla değişim eğrilerinden bulundu. Dört boyutlu $L=24$ doğrusal boyutlu basit hiperkübik örgüye sahip Ising model için; üç bitli ve dört bitli demonlar kullanılarak elde edilen 720 000 zaman adımındaki özısının sıcaklıkla değişim eğrileri Şekil 4.1, Şekil 4.2 ve Şekil 4.3’ de verilmektedir. Ayrıca bu eğrilerden elde edilen T_c değerleri Çizelge 4.1’ de verilmektedir.



Şekil 4.1. Üç bitli demonlar kullanılarak elde edilen 720 000 zaman adımında özısının sıcaklıkla değişimi



Şekil 4.2. Dört bitli demonlar kullanılarak elde edilen 720 000 zaman adımında özısının sıcaklıkla değişimi



Şekil 4.3. Üç ve dört bitli demonlar kullanılarak elde edilen 720 000 zaman adımında özısının sıcaklıkla değişimi

Çizelge 4.1. $L=24$ örgüsü için demon değişimine bağlı olarak $T_c^C(L)$ özısı kritik sıcaklığının değişimi

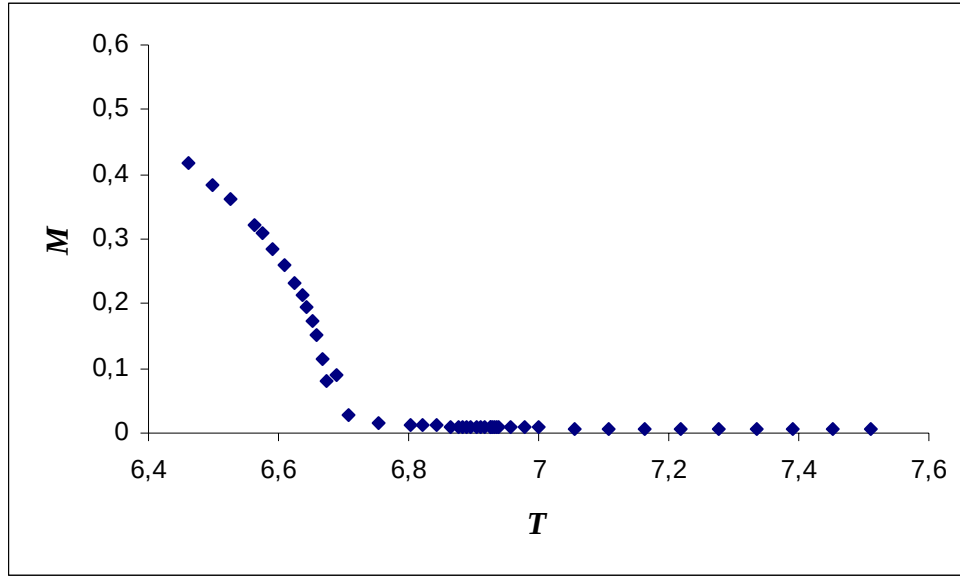
Demon	$T_c^C(L)$
Üç bitli	$6,6681 \pm 0,00035$
Dört bitli	$6,6707 \pm 0,00045$

Çizelge 4.1 incelendiğinde, demona ait bit sayısı değiştikçe sonlu örgü T_c değerlerinin literatürdeki $T_c=6,680$ Monte Carlo sonucu ve $T_c=6,6802$ seriye açılım sonucu değerlerine yaklaştığı görülmektedir[31]. Bu durum, demona ait bit sayısı değiştikçe gerçek kritik sıcaklık değerine daha yakın sonuçlar elde edileceğini göstermektedir.

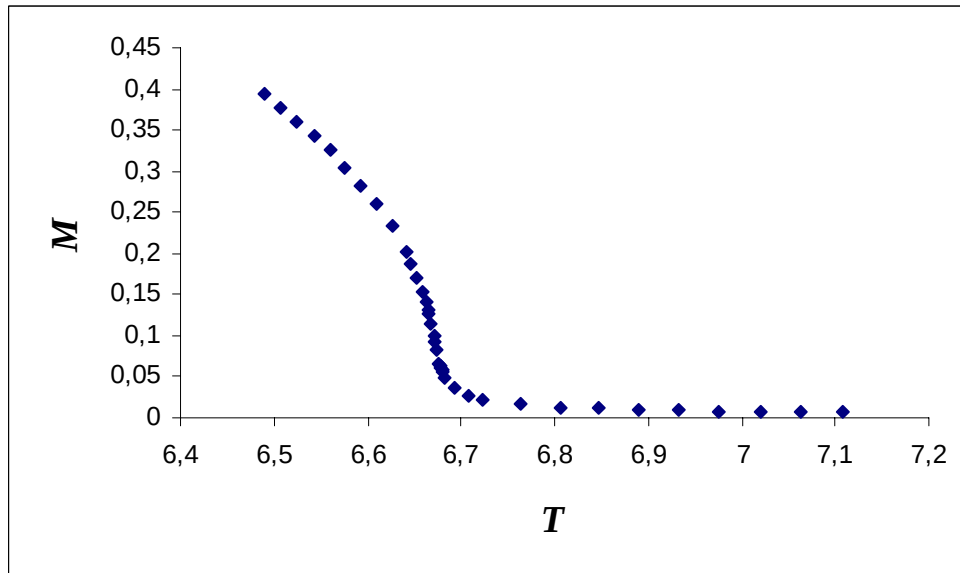
4.1.2. Kendiliğinden mıknatıslanmanın sıcaklıkla değişimi

$L=24$ doğrusal boyutlu sonlu örgü için dört boyutlu basit hiperkübik örgülü Ising model için düzen parametresi (mıknatıslanma, M) nin, üç bitli ve dört bitli demonlar

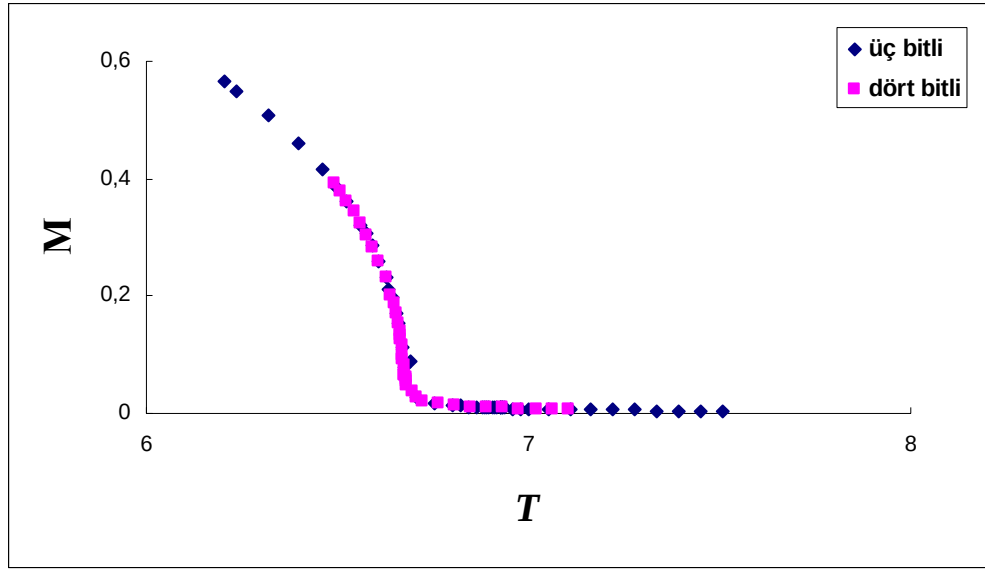
kullanılarak elde edilen 720 000 zaman adımındaki sıcaklıkla değişim eğrileri Şekil 4.4, Şekil 4.5 ve Şekil 4.6’ da verilmektedir.



Şekil 4.4. Üç bitli demonlar kullanılarak elde edilen 720 000 zaman adımında düzen parametresinin sıcaklıkla değişimi



Şekil 4.5. Dört bitli demonlar kullanılarak elde edilen 720 000 zaman adımında düzen parametresinin sıcaklıkla değişimi

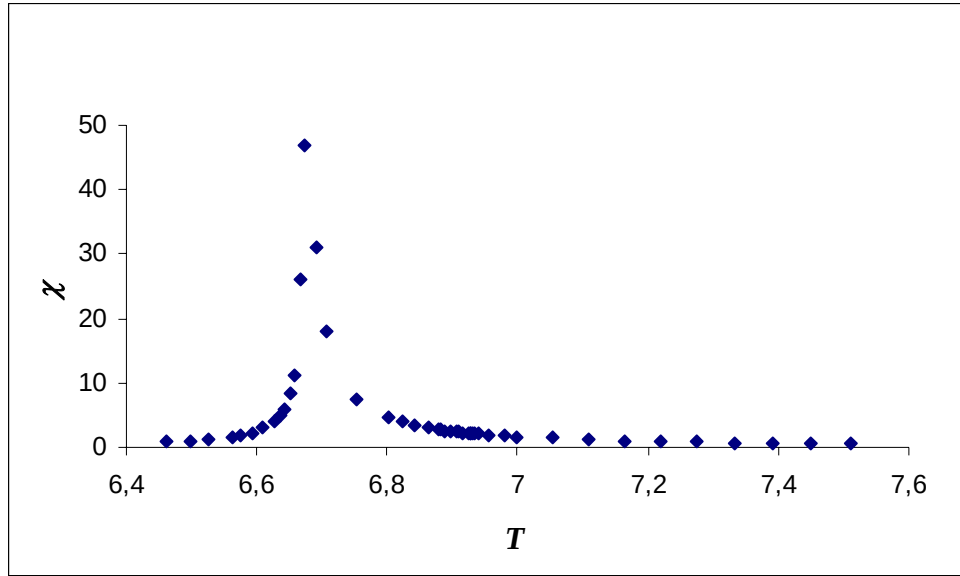


Şekil 4.6. Üç ve dört bitli demonlar kullanılarak elde edilen 720 000 zaman adımında kendiliğinden manyetizasyonun sıcaklıkla değişimi

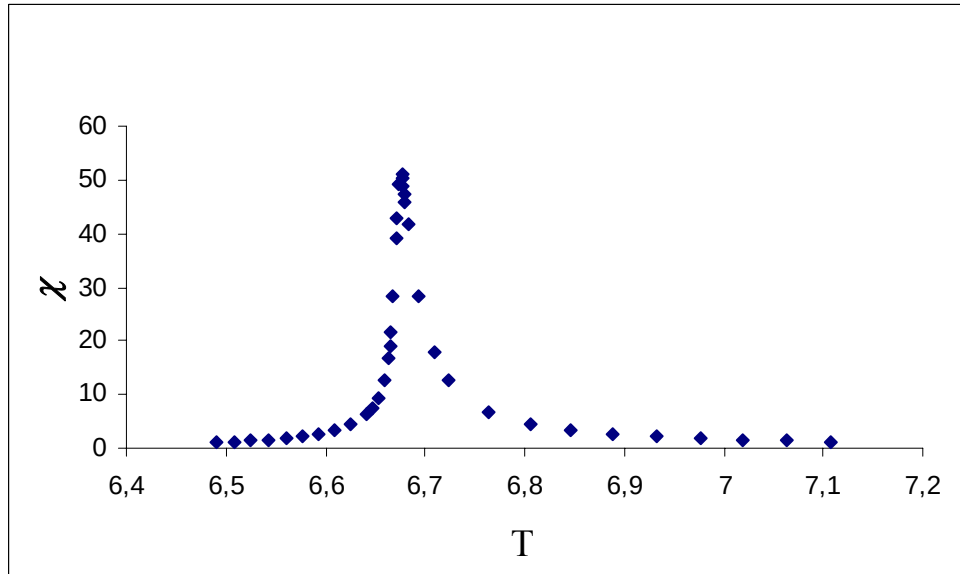
Sonsuz örgü kritik sıcaklık değerinde sıfır olan mıknatıslanmanın değeri, sonlu örgülerde belli bir sıcaklık değerinden itibaren sıfıra yaklaşmaktadır [30].

4.1.3. Manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişimi

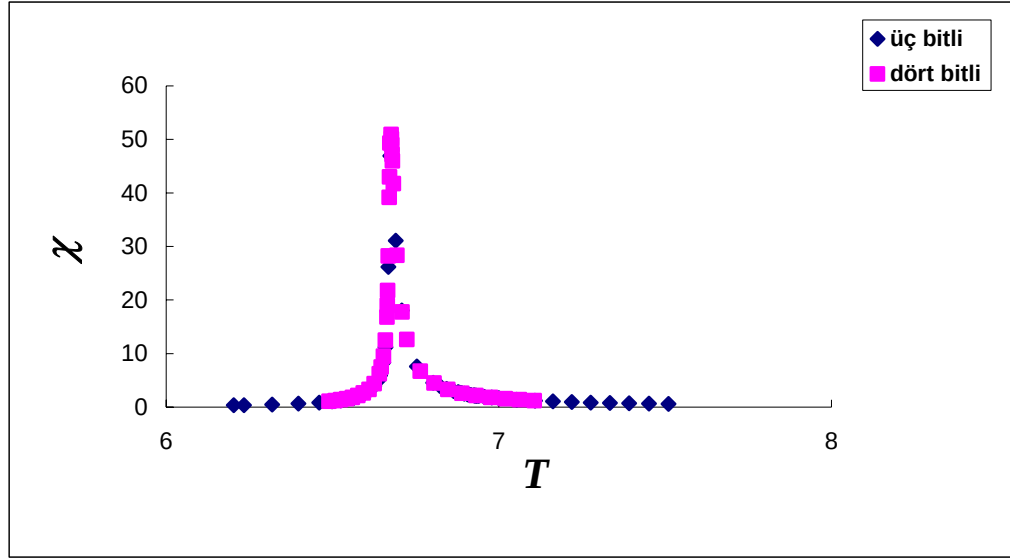
Doğrusal boyutu $L=24$ olan sonlu örgü için, dört boyutlu basit hiperkübik örgülü Ising model için üç bitli ve dört bitli demonlar kullanılarak elde edilen 720 000 zaman adımındaki χ manyetik alınganlığının değerleri bulundu. Sonsuz örgüde T_c de süreksizlik sergileyen manyetik alınganlık, sonlu örgüler için bir maksimuma sahip oldu [30]. $T_c^*(24)$ manyetik alınganlığın maksimum olduğu sıcaklık değerlerinde her zaman adımı için yedi ayrı set oluşturularak, simülasyon sonucunda elde edilen verilerin ortalaması alınarak manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişim eğrileri bulundu. Manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişim eğrileri Şekil 4.7, Şekil 4.8 ve Şekil 4.9’ da verilmektedir. Bu eğrilerden elde edilen T_c sıcaklık değerleri de Çizelge 4.2’ de verilmektedir.



Şekil 4.7. Üç bitli demonlar kullanılarak elde edilen 720 000 zaman adımında manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişimi



Şekil 4.8. Dört bitli demonlar kullanılarak elde edilen 720 000 zaman adımında manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişimi



Şekil 4.9. Üç ve dört bitli demonlar kullanılarak elde edilen 720 000 zaman adımında manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişimi

Çizelge 4.2. $L=24$ örgüsü için demon değişimine bağlı olarak manyetik alınganlık kritik sıcaklığının değişimi

Demon	$T_c^z(L)$
Üç bitli	$6,6736 \pm 0,00049$
Dört bitli	$6,6766 \pm 0,00050$

Çizelge 4.2 incelendiğinde, demona ait bit sayısı değiştikçe sonlu örgü T_c değerlerinin literatürdeki $T_c=6,680$ Monte Carlo sonucu ve $T_c=6,6802$ seriye açılım sonucu değerlerine yaklaştığı [31] görülmektedir. Bu durum, demona ait bit sayısı değiştikçe gerçek kritik sıcaklık değerine daha yakın sonuçlar elde edileceğini göstermektedir.

4.2. α , α' , β , β' , γ , γ' Statik Kritik Üslerinin Hesabı

Dört boyutlu Ising model için Şekil 4.1, Şekil 4.2 ve Şekil 4.3 ile Şekil 4.7, Şekil 4.8 ve Şekil 4.9' da görüldüğü gibi, manyetik alınganlığın maksimumları özısınıninkilere göre daha sivri ve daha yüksek olduğundan $T_c^z(L)$ değerleri, elde edilen $T_c^C(L)$

değerlerinden daha hassas olacaktır. Bu nedenle; kritik sıcaklık değeri olarak manyetik alınganlıkların kritik sıcaklık değerleri statik kritik üslerin bulunmasında kullanıldı.

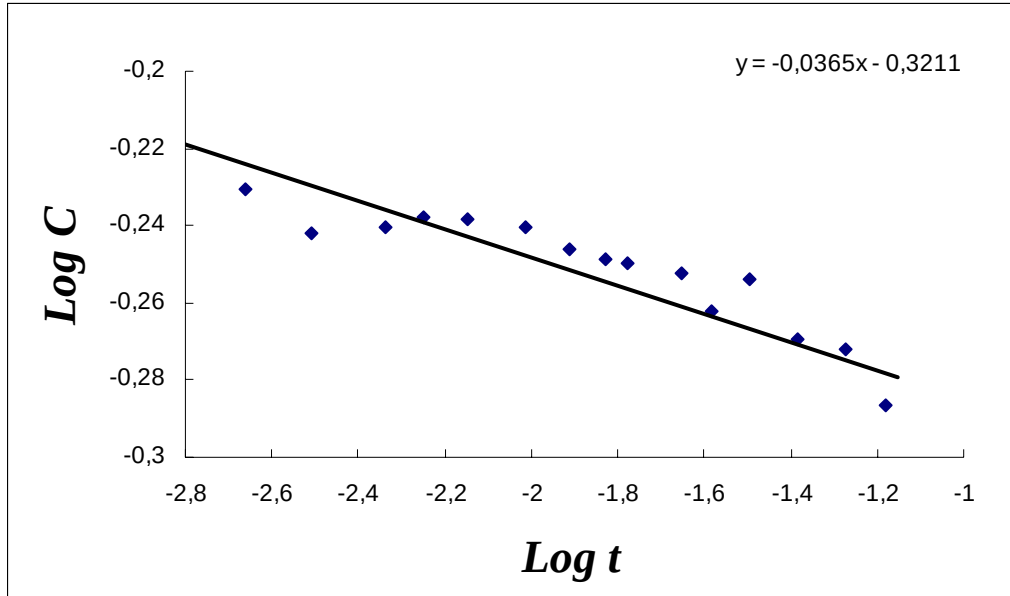
4.2.1. Özısı için α ve α' kritik üsleri

Özısının kritik üssü üç farklı şekilde hesaplanabilmektedir [15]. Bu çalışmada; α ve α' , renormalizasyon grup teorisine göre sonsuz örgünün özısının sıcaklığa bağlı ifadesini veren basit kuvvet yasası Eş. 4.1 ve düzeltmeli kuvvet yasası Eş. 4.2 ile fit edilerek hesaplandı.

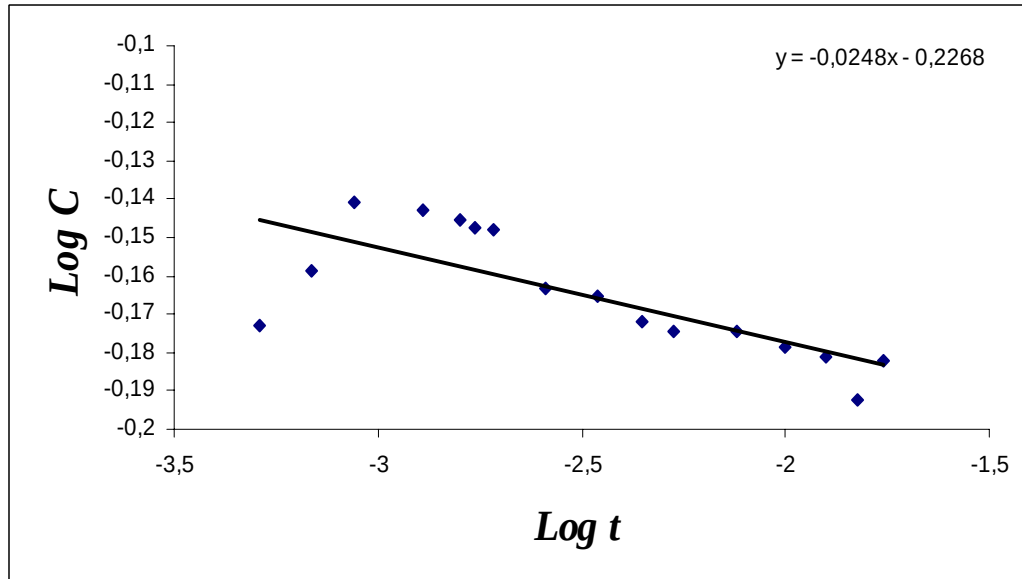
$$C \propto t^{-\alpha'} \quad T < T_c \quad (4.1)$$

$$C \propto t^{\alpha} \left| \text{Log}^{1/3} t \right| \quad T < T_c \quad (4.2)$$

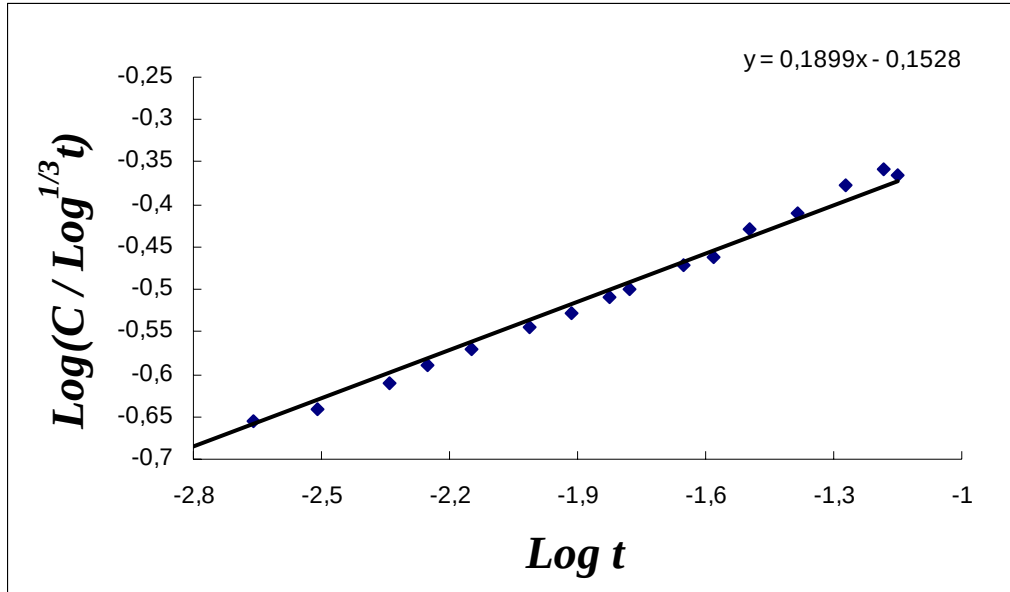
Özısının kritik üssü α' ve α , üç bitli demonlar kullanılarak $T < T_c$ için ($t \geq 0,001$ ve $6,2033 \leq T \leq 6,6681$ aralığında) ve dört bitli demonlar kullanılarak ($t \geq 0,0005$ ve $6,4900 \leq T \leq 6,6731$ aralığında) 720 000 zaman adımlarında yedi ayrı sette simüle edilerek elde edilen C ile t verilerinin kullanımı ile basit kuvvet yasası ve düzeltmeli kuvvet yasası ile fit edilerek elde edildi.



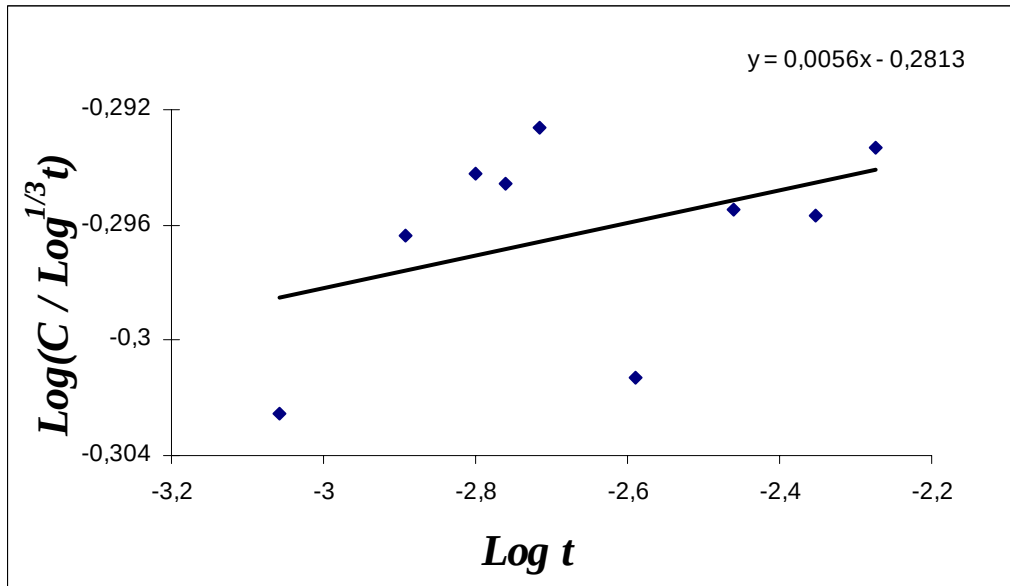
Şekil 4.10. $T < T_c$ için, üç bitli demonlar için 720 000 zaman adımı için $\text{Log } C - \text{Log } t$ 'ye göre değişimi



Şekil 4.11. $T < T_c$ için, dört bitli demonlar için 720 000 zaman adımı için $\text{Log } C - \text{Log } t$ 'ye göre değişimi



Şekil 4.12. $T < T_c$ için, üç bitli demonlar için 720 000 zaman adımı için $\text{Log}(C / \text{Log}^{1/3} t) - \text{Log } t$ 'ye göre değişimi



Şekil 4.13. $T < T_c$ için, dört bitli demonlar için 720 000 zaman adımı için $\text{Log}(C / \text{Log}^{1/3} t) - \text{Log } t$ 'ye göre değişimi

Şekil 4.10, Şekil 4.11 ve Şekil 4.12, Şekil 4.13 fit eğrilerinden yararlanarak α ve α' özısı için statik kritik üs değerleri hesaplandı. Bu değerler Çizelge 4.3' de verilmektedir.

Çizelge 4.3. Üç ve dört bitli demonlar için 720 000 zaman adımlarında $T < T_c$ için özısı için kritik üsler

Demon	α	α'
Üç bitli	0,1899	0,0365
Dört bitli	0,0056	0,0248

α ve α' değerleri, renormalizasyon grup tahmini ($\alpha = 0$) ve literatürdeki diğer ($\alpha = 0,04$; $\alpha' = 0,10$ [22]) teorik değerler ile uyum içindedir. Bu durum; demonla ait bit sayısının arttırılmasıyla, gerçek kritik üs değerine daha yakın sonuçlar elde edileceğini göstermektedir.

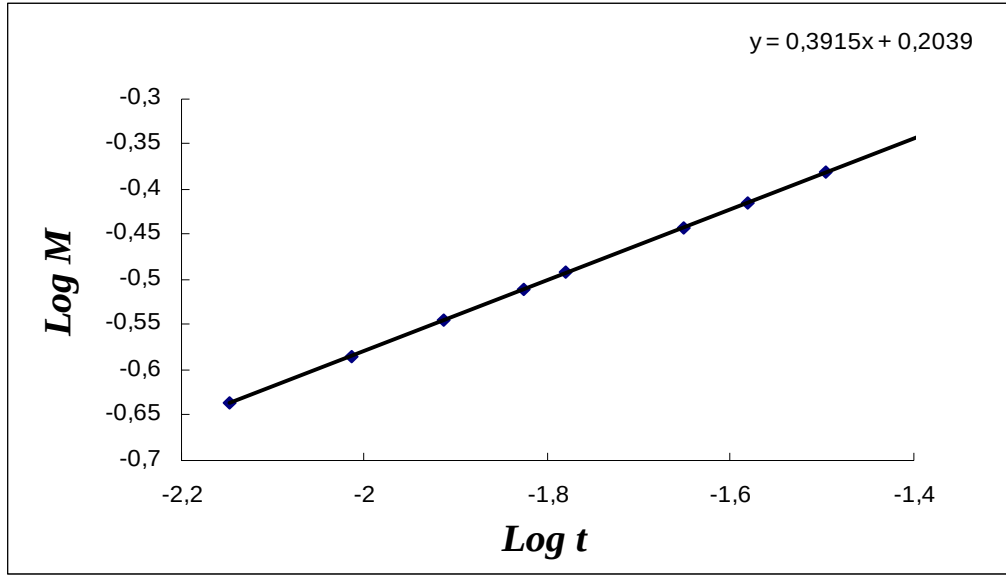
4.2.2. Kendiliğinden mıknatıslanma için β ve β' kritik üsleri

Kendiliğinden mıknatıslanma kritik üssü üç farklı şekilde hesaplanabilmektedir [15]. Bu çalışmada; β , β' , renormalizasyon grup teorisine göre sonsuz örgünün düzen parametresinin sıcaklığa bağlı ifadesini veren basit kuvvet yasası Eş. 4.3 ve düzeltmeli kuvvet yasası Eş. 4.4 ile fit edilerek hesaplandı.

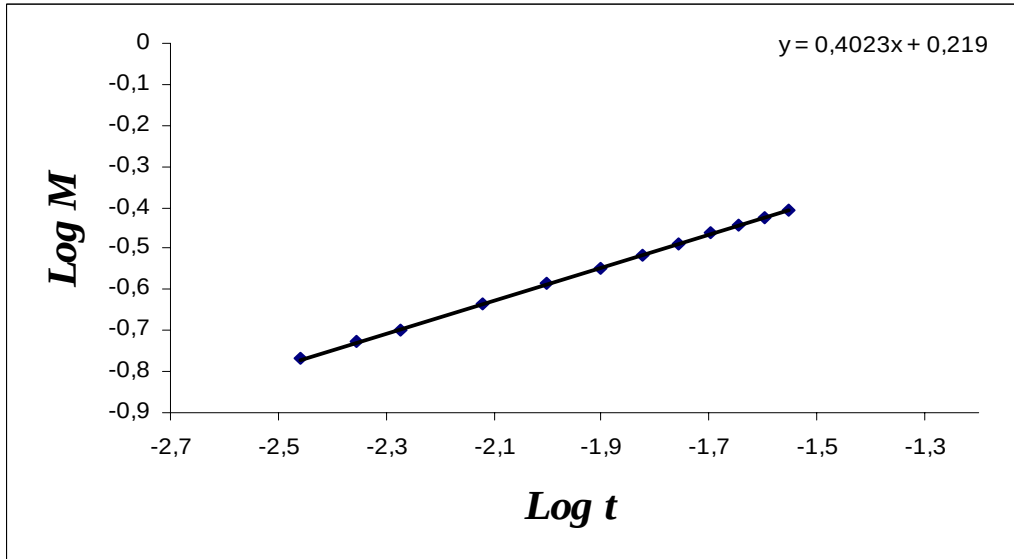
$$M \propto t^{\beta'} \quad T < T_c \quad (4.3)$$

$$M \propto t^{\beta} |\text{Log}^{1/3} t| \quad T < T_c \quad (4.4)$$

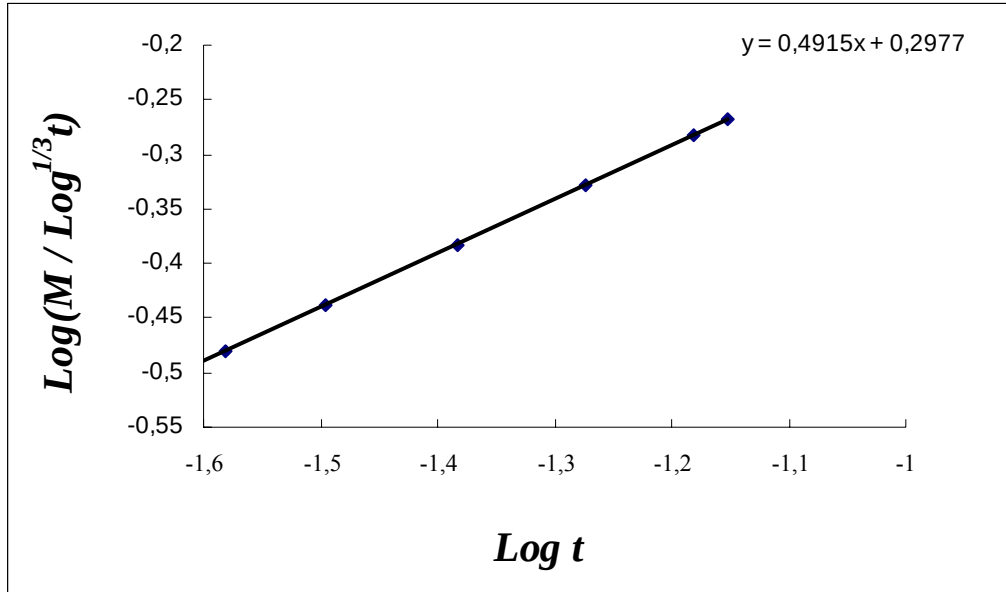
Kendiliğinden mıknatıslanma kritik üssü β ve β' , üç bitli demonlar kullanılarak $T < T_c$ için ($t \geq 0,001$ ve $6,2033 \leq T \leq 6,6681$ aralığında) ve dört bitli demonlar kullanılarak ($t \geq 0,0005$ ve $6,4900 \leq T \leq 6,6731$ aralığında) 720 000 zaman adımlarında yedi ayrı sette simüle edilerek elde edilen M ile t verilerinin kullanımı ile basit kuvvet yasası ve düzeltmeli kuvvet yasası ile fit edilerek elde edildi.



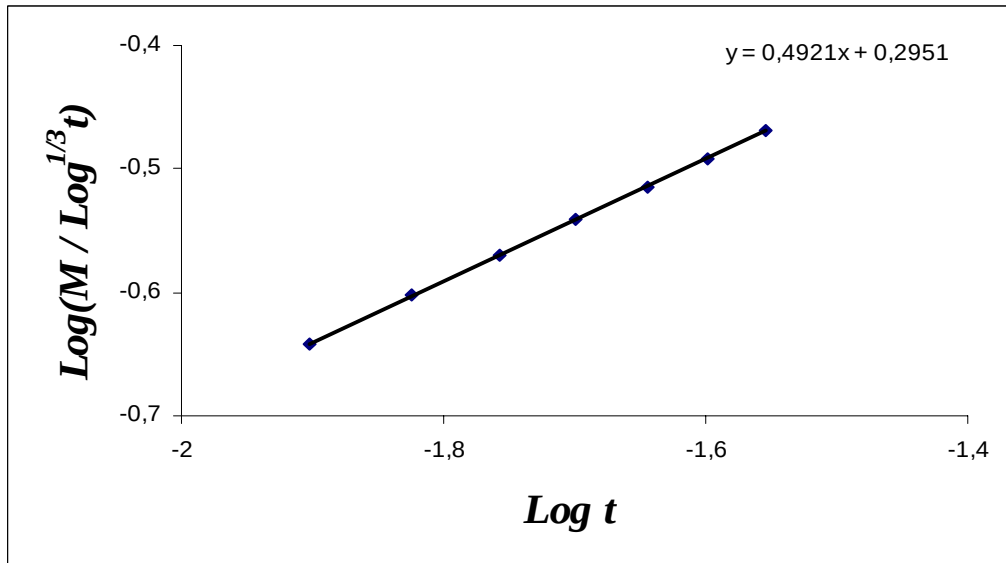
Şekil 4.14. $T < T_c$ için, üç bitli demonlar için 720 000 zaman adımı için $\text{Log } M - \text{Log } t$ 'ye göre değişimi



Şekil 4.15. $T < T_c$ için, dört bitli demonlar için 720 000 zaman adımı için $\text{Log } M - \text{Log } t$ 'ye göre değişimi



Şekil 4.16. $T < T_c$ için, üç bitli demonlar için 720 000 zaman adımı için $\text{Log}(M / \text{Log}^{1/3}t) - \text{Log } t$ 'ye göre değişimi



Şekil 4.17. $T < T_c$ için, dört bitli demonlar için 720 000 zaman adımı için $\text{Log}(M / \text{Log}^{1/3}t) - \text{Log } t$ 'ye göre değişimi

Şekil 4.14, Şekil 4.15 ve Şekil 4.16, Şekil 4.17 fit eğrilerinden yararlanarak β , β' kendiliğinden mıknatıslanma statik kritik üs değerleri hesaplandı. Bu değerler Çizelge 4.4' de verilmektedir.

Çizelge 4.4. Üç ve dört bitli demonlar için 720 000 zaman adımlarında $T < T_c$ için düzen parametresi kritik üsleri

Demon	β	β'
Üç bitli	0,4915	0,3915
Dört bitli	0,4921	0,4023

Simülasyonda, demona ait bit sayısının arttırılmasıyla elde edilen β , β' değerleri, renormalizasyon grup tahmini ($\beta = 0,5$) ve literatürdeki diğer ($\beta = 0,47$; $\beta' = 0,37$ [22]) teorik değerler ile uyum içindedir. Üç ve dört bitli demonlar için logaritmik fit ile elde edilen β değerlerinin, gerçek kritik üs değerine logaritmik olmayan fit ile elde edilen β' değerlerinden daha yakın olduğu görülmektedir. Demona ait bit sayısının arttırılmasıyla kritik üslerin gerçek kritik üs değerlerine yaklaşıldığı gözlenmektedir.

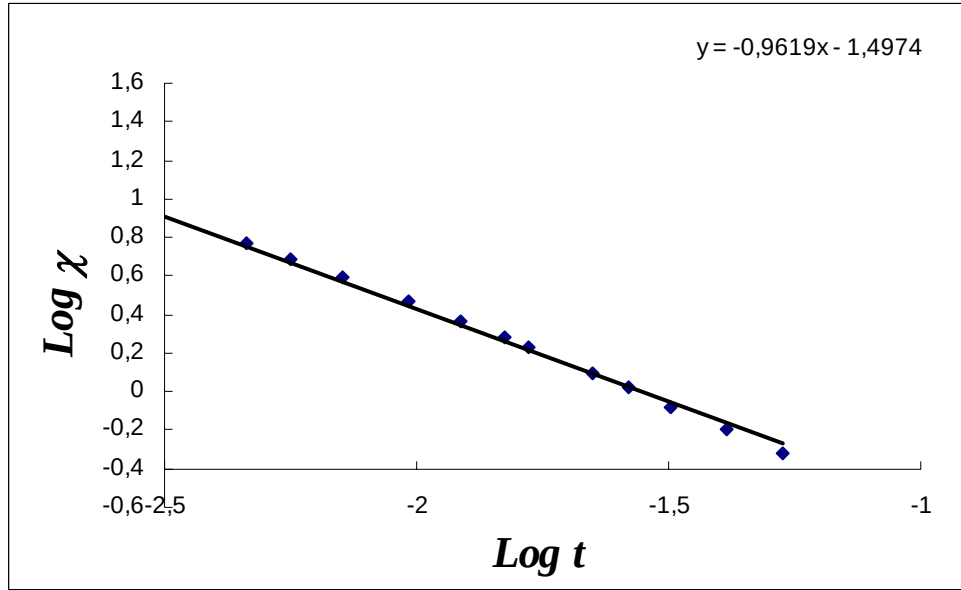
4.2.3. Manyetik alınganlık için γ ve γ' kritik üsleri

Manyetik alınganlık kritik üsleri, üç farklı şekilde hesaplanabilmektedir [15]. Bu çalışmada; γ ve γ' , renormalizasyon grup tahminine göre sonsuz örgünün manyetik alınganlığının sıcaklığa bağlı ifadesini veren basit kuvvet yasası, Eş. 4.5 ve düzeltmeli kuvvet yasası, Eş. 4.6, ile hesaplandı.

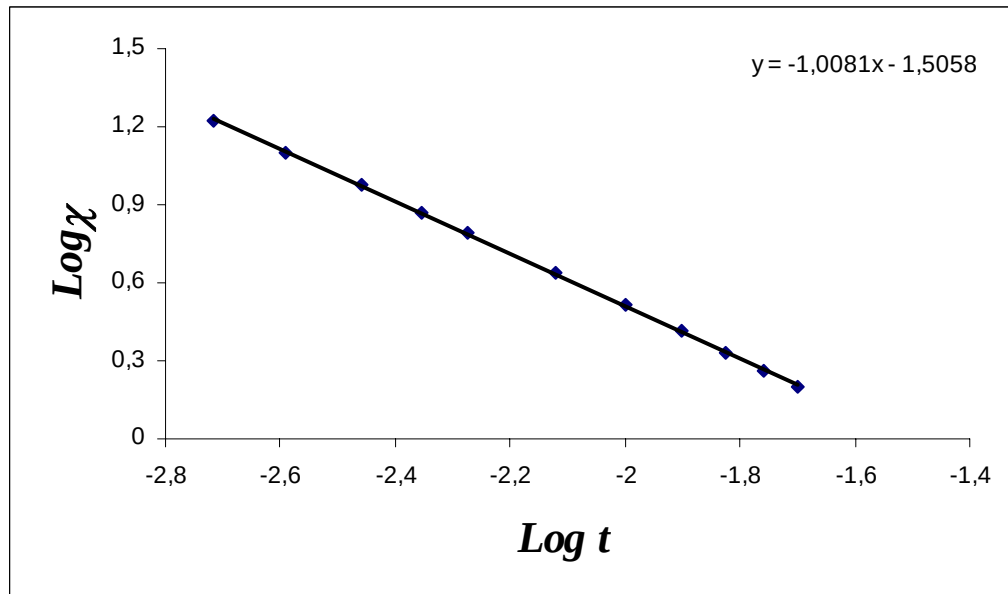
$$\chi \propto t^{-\gamma'} \quad T < T_c \quad (4.5)$$

$$\chi \propto t^{-\gamma} \left| \text{Log}^{1/3} t \right| \quad T < T_c \quad (4.6)$$

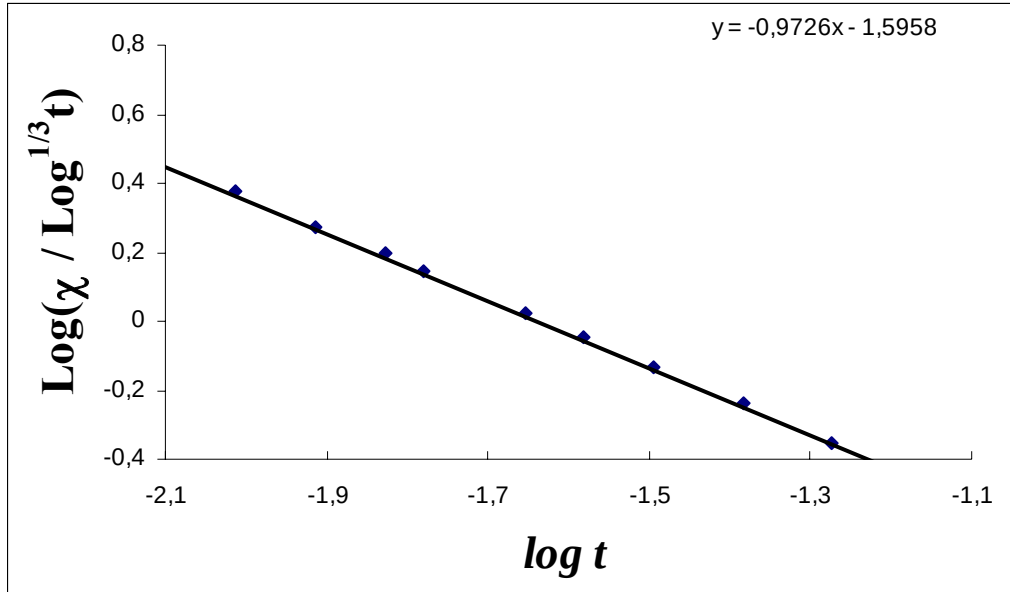
Manyetik alınganlık kritik üslerinden γ' , üç bitli demonlar kullanılarak $T < T_c$ için ($t \geq 0,001$ ve $6,2033 \leq T \leq 6,6681$ aralığında) ve dört bitli demonlar kullanılarak ($t \geq 0,0005$ ve $6,4900 \leq T \leq 6,6731$ aralığında) 720 000 zaman adımlarında yedi ayrı sette simüle edilerek elde edilen χ ile t verilerinin kullanımı ile basit kuvvet yasası ve düzeltmeli kuvvet yasası ile fit edilerek elde edildi.



Şekil 4.18. $T < T_c$ için, üç bitli demonlar için 720 000 zaman adımı için $\text{Log } \chi - \text{Log } t$ 'ye göre değişimi

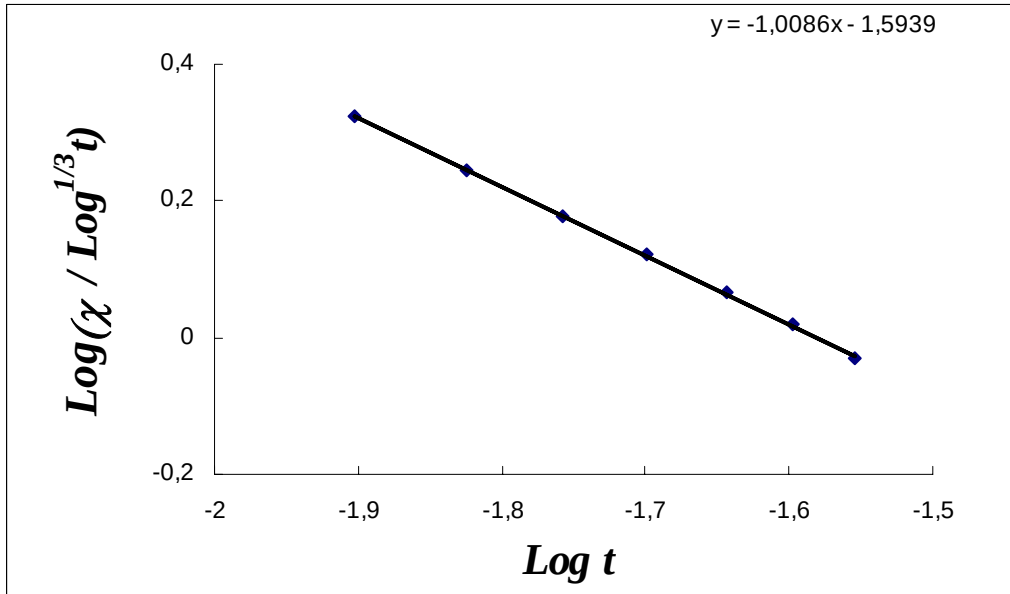


Şekil 4.19. $T < T_c$ için, dört bitli demonlar için 720 000 zaman adımı için $\text{Log } \chi - \text{Log } t$ 'ye göre değişimi



Şekil 4.20. $T < T_c$ için, üç bitli demonlar için 720 000 zaman adımı için

$\text{Log}(\chi / |\text{Log}^{1/3}t|) - \text{Log } t$ 'ye göre değişimi



Şekil 4.21 $T < T_c$ için, dört bitli demonlar için 720 000 zaman adımı için

$\text{Log}(\chi / |\text{Log}^{1/3}t|) - \text{Log } t$ 'ye göre değişimi

Şekil 4.18, Şekil 4.19 ve Şekil 4.20, Şekil 4.21 fit eğrilerinden yararlanarak γ, γ' manyetik alınganlık statik kritik üs değerleri hesaplandı. Bu değerler, Çizelge 4.5' de verilmektedir.

Çizelge 4.5. Üç ve dört bitli demonlar için 720 000 zaman adımlarında $T < T_c$ için manyetik alınganlık kritik üsleri

Demon	γ	γ'
Üç bitli	0,9726	0,9619
Dört bitli	1,0086	1,0081

Elde edilen γ ve γ' değerleri, renormalizasyon grup tahmini ($\gamma = 1$) değerleri ve literatürdeki diğer teorik ($\gamma = 0,99$; $\gamma' = 1,09$ [22]) değerleri ile uyum içindedir. Üç ve dört bitli demonlar için logaritmik fit ile elde edilen γ değerlerinin, gerçek kritik üs değerine logaritmik olmayan fit ile elde edilen γ' değerlerinden daha yakın olduğu görülmektedir. Demona ait bit sayısının arttırılmasıyla kritik üslerin gerçek kritik üs değerlerine da yaklaştığı görülmektedir.

5. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu çalışmada, dört boyutlu Ising modelinin doğrusal boyutu $L=24$ olan periyodik sınır şartlı basit hiperkübik örgülerde ve sonsuz örgü kritik sıcaklığı yakınında üç ve dört bitli demonlar kullanarak Creutz "cellular automaton"da simülasyonu yapıldı. Simülasyonlar, 720 000 zaman adımlarında yedi ayrı set oluşturularak yapıldı. Simülasyon sonucunda termodinamik niceliklerden; sıcaklık, özısı, düzen parametresi (kendiliğinden mıknatıslanma) ve manyetik alınganlık değerleri hesaplandı. Çalıştırılan bu yedi setten elde edilen termodinamik niceliklerin ortalaması alındı. Bu ortalama değerler ile; özısı, kendiliğinden mıknatıslanma ve manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişim eğrileri çizildi.

Mıknatıslanmanın sıcaklıkla değişim eğrisinden; sonsuz örgü kritik sıcaklık değerinde sıfır olan mıknatıslanmanın, sonlu örgülerde belli bir sıcaklık değerinden itibaren sıfıra yaklaştığı görülmektedir. Bu durum, mıknatıslanmanın kritik noktadaki davranışını ortaya koymaktadır. Özısı ve manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişim eğrileri, kritik noktada beklenen davranışlarını göstermiştir. Özısı ve manyetik alınganlık; sonsuz örgülerde T_c noktasında bir süreksizliğe sahipken, sonlu örgülerde bu T_c noktasında maksimum bir değere sahiptirler [30]. Özısı ve manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişim eğrilerinden, $T_c^C(L)$ ve $T_c^X(L)$ değerleri elde edildi. Elde edilen bu kritik sıcaklık değerleri Çizelge 4.1 ve Çizelge 4.2' de verilmektedir. Çizelge 4.1 ve Çizelge 4.2 incelendiğinde, demona ait bit sayısı arttıkça sonlu örgü T_c değerlerinin literatürdeki $T_c=6,680$, Monte Carlo ve $T_c=6,6802$ seriye açılım sonucu değerlerine yaklaştığı görülmektedir [31]. Bu durum, demona ait bit sayısının artırılmasıyla gerçek kritik sıcaklık değerine daha yakın sonuçlar elde edileceğini göstermektedir.

Kritik sıcaklık değerleri olarak manyetik alınganlık kritik sıcaklık değerlerinden elde edilen indirgenmiş sıcaklık (t) verileri kullanılarak; özısı, düzen parametresi ve manyetik alınganlık, kuvvet yasası ve düzeltmeli kuvvet yasası ile fit edildi. Özısıya ait α , α' , düzen parametresine ait β , β' ve manyetik alınganlığa ait γ , γ' statik

kritik üsleri elde edildi. Bu değerler, Çizelge 4.3, Çizelge 4.4 ve Çizelge 4.5' de verilmektedir. Statik kritik üslerin elde edilen bu değerleri renormalizasyon grup teorisi ($\alpha = 0$; $\beta = 0,5$; $\gamma = 1$) ve literatürdeki diğer ($\alpha = 0,04$; $\alpha' = 0,10$; $\beta = 0,47$; $\beta' = 0,37$; $\gamma = 0,99$; $\gamma' = 1,09$ [22]) teorik değerler ile uyum halindedir. Üç ve dört bitli demonlar için logaritmik fit ile elde edilen α , β , γ değerlerinin, gerçek kritik üs değerine logaritmik olmayan fit ile elde edilen α' , β' , γ' değerlerinden daha yakın olduğu görülmektedir. Demona ait bit sayısının arttırılmasıyla kritik üslerin gerçek kritik üs değerlerine yaklaştığı görülmektedir. Bu durum, demona ait bit sayısının önemini ortaya koymaktadır. Zaman sayısının daha fazla arttırılması ile daha net sonuçlar elde edilebilir.

KAYNAKLAR

1. Mülazımoğlu, G., “Dört boyutlu Ising modelin $(6)_4$ örgüsünde Creutz cellular automaton ile incelenmesi”, Yüksek Lisans Tezi , **Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü**, Ankara, 1 (2003).
2. Yeomans, J. M., “Statistical mechanics of phase transitions”, **Clarendon Press**, Oxford, 16-36 (1992).
3. Serway, A. R., “Physics for scientist engineers & with modern physics”, **Sanders College Pupliching**, 852-860 (1992).
4. Huang, K., “Statiscal mechanics”, 2nd ed., John Wiley and Sons, **Newyork**, 1-52 (1987).
5. Binney, J. J., Dawrick, N. J., Fisher, A. J. and Newman, M. E. J., “The theory of critical phenomena”, **Clarendon Press**, Oxford, 26-27 (1992).
6. Onsager L., “Crystal statistics. I. A. two dimensional model with on order disorder transition”, **Phys.Rew.**, 65:117-149 (1944).
7. Pearson, R. B., Richardson, J. L. and Toussaint, D., “A fast processor for Monte Carlo simulation”, **J. Comput.Phys.**, 51:241-246 (1983).
8. Frenkel, D., ”Molecular Dynamics simulation of statical mechanical system”, **Proceedings of The International School of Physics**. Ed: G Ciccotti and W.G Hover, **Nort Holland** ,151-180 (1986).
9. Spohn, H., “Molecular Dynamics simulation of statistical mechanical systems”, **Proceedings of The International School of Physics**, Ed: G. Ciccotti and W. G Hover, **Nort Holland**, 304-352 (1986).
10. Creutz, M., “Deterministic Ising dynamics”, **Ann Phys.**, 62:167-169 (1986).
11. Hermann, H. J., “Fast algorithm for the simulation of Ising model” **J.stat. Phys.**, 45:145-151 (1986).
12. Binney, J. J., Dowrick,N. J., Fisher, A. J., and Newman, M. E. J.,” the theory of critical phenomena”, **Clarendon Pres**, Oxford, 7-13 (1992).
13. Metropolis, N., Rosenbuth, A. W., Rosenbluth M. N., Teller E., “Eguation of state calculations by fast computing machines”, **J. Chem. Phys.**,21: 1087-1092 (1953).
14. Creutz, M., “Microcanonical Monte Carlo simulation”, **Phys.Rew.Lett.**, 50:1411-1414 (1983).

15. Wolfram, S., "Theory and applications of cellular automaton ", **Word Scientific**, Singapore, 265-278 (1986).
16. Wolfram, S., "Universality and complexity in cellular automata", **Physica D**, 10: 1-35 (1984).
17. Vichniac, G., "Simulating Physics with cellular automata", **Physica D** , 10:96-116 (1984).
18. Pomeau, Y., "Invariant in cellular automata", **J. Phys. A**, 17: 415-418 (1984).
19. Zabolitzky, J. G., Hermann, H. J., "Multitasking case study on the Cray-2: The Q2R cellular automaton", **J. Comput. Phys.**, 76:426-428 (1988).
20. Kutlu, B., Aktekin, N., "Critical slowing down in Ising model for Creutz algorithm", **Physica A**, 208:423-432 (1994).
21. Aktekin, N., "Simulation of the two-dimensional Ising model on the Creutz cellular automaton", **Physica A**, 219: 436-446 (1995).
22. Aktekin, N., "Simulation of the four dimensional Ising model on the cellular automaton", **Physica A**, 232:397-407 (1996).
23. Merdan, Z., "Alti boyutlu Ising modelin Creutz cellular automaton ile incelenmesi", Doktora Tezi, **Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü**, Ankara, 49-51 (2003).
24. Kalay, M., "Beş boyutlu Ising modelin "Creutz cellular automaton"ında incelenmesi", Doktora Tezi, **Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü**, Ankara, 64-101 (2001).
25. Hohne, F. J. W., "Lecture notes in Physics", Critical Phenomeno, **Springer-Verlog**, 86-89 (1983)
26. Kutlu, B., "İki boyutlu Ising modelin Creutz cellular automaton ile incelenmesi", Doktora Tezi, **Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü**, Ankara, 1-12 (1995).
27. Dres, C., "Microcanonical simulations with a large number of demons" **J. Phys. A.**, 28:751-764 (1995).
28. Wolfram, S., "Statistical mechanics of cellular automata", **Rev. Mod. Phys.**, 55:601-644 (1983).
29. Aktekin, N., "Dinamical critical exponent of the three-dimensional Ising model on the Creutz cellular automaton", **3rd Gen. Conf. Of the Balk. Phys. Un.**, Romania (Cluj-Napoca).

30. Privman, V ., “Finite size scaling and numerical simulation of statistical systems”, **World Scientific Publishing**, London, 117, 183 (1990).
31. Aktekin, N., Günen, A., Sağlam, Z., “A finite-size scaling study of the four-dimensional Ising model on the Creutz cellular automaton”, **J. Modern. Phys. C**, 10: 875-881 (1999).

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı, adı : SEYDİOĞLU, Turgay
Uyruğu : T.C.
Doğum tarihi ve yeri : 17.05.1972 Kastamonu
Medeni hali : Evli
Telefon : 0 (366) 241 72 09
e-mail : tseydioglu@hotmail.com

Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet tarihi
Lisans	Ankara Üniversitesi/ Fen Fakültesi / Fizik Mühendisliği Bölümü	1997
Lise	Abdurrahmanpaşa Lisesi/ Kastamonu	1989

Yabancı Dil

İngilizce

Hobiler

Futbol, Tenis, Bilgisayar teknolojileri