



**YEDİ BOYUTLU ISING MODELİNDE DÜZEN PARAMETRESİ
İHTİMALİYET DAĞILIMI İÇİN SONLU ÖRGÜ ÖLÇEKLEME
BAĞINTISI**

Semih DOĞRUEK

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANA BİLİM DALI**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

NİSAN 2020

Semih DOĞRUER tarafından hazırlanan “YEDİ BOYUTLU ISING MODELİNDE DÜZEN PARAMETRESİ İHTİMALİYET DAĞILIMI İÇİN SONLU ÖRGÜ ÖLÇEKLEME BAĞINTISI” adlı tez çalışması aşağıdaki jüri tarafından OY BİRLİĞİ ile Gazi Üniversitesi Fizik Ana Bilim Dalında YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak kabul edilmiştir.

Danışman: Prof. Dr. Ziya MERDAN

Fizik Ana Bilim Dalı, Gazi Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Yüksek Lisans Tezi olduğunu onaylıyorum.

.....

Başkan: Prof. Dr. Haluk KORALAY

Fizik Ana Bilim Dalı, Gazi Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Yüksek Lisans Tezi olduğunu onaylıyorum.

.....

Üye: Doç. Dr. Hülya ÖZTÜRK

Fizik Ana Bilim Dalı, Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Yüksek Lisans Tezi olduğunu onaylıyorum.

.....

Tez Savunma Tarihi: 30.04.2020

Jüri tarafından kabul edilen bu tezin Yüksek Lisans Tezi olması için gerekli şartları yerine getirdiğini onaylıyorum.

.....

Prof. Dr. Sena YAŞYERLİ

Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

ETİK BEYAN

Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Tez Yazım Kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmada;

- Tez içinde sunduğum verileri, bilgileri ve dokümanları akademik ve etik kurallar çerçevesinde elde ettiğimi,
- Tüm bilgi, belge, değerlendirme ve sonuçları bilimsel etik ve ahlak kurallarına uygun olarak sunduğumu,
- Tez çalışmada yararlandığım eserlerin tümüne uygun atıfta bulunarak kaynak gösterdiğimi,
- Kullanılan verilerde herhangi bir değişiklik yapmadığımı,
- Bu tezde sunduğum çalışmanın özgün olduğunu,

bildirir, aksi bir durumda aleyhime doğabilecek tüm hak kayıplarını kabullendiğimi beyan ederim.



Semih DOĞRUER

30.04.2020

YEDİ BOYUTLU ISING MODELİNDE DÜZEN PARAMETRESİ İHTİMALİYET DAĞILIMI İÇİN SONLU ÖRGÜ ÖLÇEKLEME BAĞINTISI

(Yüksek Lisans Tezi)

Semih DOĞRUER

GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Nisan 2020

ÖZET

Doğrusal boyutu $L=4, 6, 8$, olan yedi boyutlu ising modelin en yakın komşu etkileşmeli periyodik sınır şartlı örgülerde ve sonsuz örgü kritik sıcaklığı yakınında beş “bit”li demonlar kullanılarak Creutz “cellular automaton”ında simülasyonları yapılmıştır. Yedi boyutlu ising modelinde düzen parametresi olasılık dağılımları kritik sıcaklıkta hesaplanmıştır. Düzen parametresi olasılık dağılımı için sonlu örgü ölçekleme ilişkisi Creutz Cellular Automaton simülasyonları ile test edilmiş ve literatür ile uyumluluğu doğrulanmıştır. Analitik olasılık fonksiyonlarının sabitleri kritik noktada sayısal olarak oluşturulan olasılık fonksiyonuna fit edilerek elde edilmiştir. Büyük örgü değerlerinde analitik olasılık fonksiyonu evrensel bir biçime sahiptir.

Bilim Kodu : 20208
Anahtar : İsing model, Düzen parametresi olasılık dağılımı, Cellular automaton,
Kelimeler Sonlu örgü ölçekleme
Sayfa Adedi : 59
Danışman : Prof. Dr. Ziya MERDAN

THE FINITE-SIZE SCALING RELATION FOR THE ORDER-PARAMETER
PROBABILITY DISTRIBUTION OF THE SEVEN-DIMENSIONAL ISING MODEL
(M. Sc. Thesis)

Semih DOĞRUER

GAZİ UNIVERSITY
GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCES
April 2020

ABSTRACT

The seven dimensional ising model with nearest-neighbor pair interactions has been simulated on the Creutz cellular automaton by using five bit demons near the infinite-lattice critical temperature with the linear dimensions $L=4,6,8$. Moreover the order parameter probability distribution for seven dimensional ising model have been calculated at the critical temperature. The finite size scaling relation for the order parameter probability distribution has been tested and verified numerically by the Creutz Cellular Automaton simulation. The constants of the analytical function have been estimated by fitting to probability function obtained numerically at the finite size critical point. For the large finite size, the analytical function has been described the universal shape of order parameter probability distribution function.

Science Code : 20208
Keywords : Ising model, Order parameter probability distribution, Cellular automaton, Finite-size scaling
Page Number : 59
Supervisor : Prof. Dr. Ziya MERDAN

TEŞEKKÜR

Bu çalışmanın oluşmasında her konuda yardımını esirgemeyen, her zaman destek olan saygıdeğer büyüğüm danışman hocam sayın Prof. Dr. Ziya MERDAN'a, tez çalışmamın en iyi şekilde noksansız olması için uğraşan değerli hocam Prof. Dr. M. Kemal ÖZTÜRK'e,

Ayrıca değerli dostum Hasan Celal DERVİŞOĞLU ve aldığım her kararda daima yanımda olup, maddi ve manevi desteklerini hiçbir zaman benden esirgemeyen canımdan çok sevdiğim bir bütünün parçası olduğum aile mensuplarım Babam Ali, Annem Ülker, Abim Tolga, Yengem Mevlüde, Abim Berat, Kardeşim Samet, Yeğenim Alper, Yeğenim Ömer DOĞRUER'e çok teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET	iv
ABSTRACT.....	v
TEŞEKKÜR.....	vi
İÇİNDEKİLER	vii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ.....	ix
ŞEKİLLERİN LİSTESİ	x
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	xii
1. GİRİŞ.....	1
2. TEORİ	5
2.1. Faz Geçişleri	5
2.2. Statik Kritik Olay ve Statik Kritik Üsler	5
2.3. $d>4$ için Sonlu Örgü Ölçekleme	6
2.4. Spin-1/2 Ising Model	12
2.5. Creutz'un Gezgin Demon Algoritması.....	13
2.6. "Cellular Automaton"lar	14
2.7. Creutz "Cellular Automaton"	15
2.8. Demon Enerjisinin Hesaplanması	17
2.9. Hiperkübik Örgüler.....	18
3. ARAŞTIRMA VE VERİLER	23
3.1. Serbest Enerjideki Sonlu Örgü Ölçekleme	23
3.2. Düzen Parametresi İhtimaliyet Dağılımı	24
3.3. Düzen Parametresi İhtimaliyet Dağılımı Fonksiyonları	25
3.4. Düzen Parametresi İhtimaliyet Dağılımında Kullanılan Sonlu Örgü Ölçekleme Bağıntısı	29

Sayfa

3.5. Düzen Parametresi Olasılık Dağılımının Sonlu Örgü Ölçekleme Fonksiyonu ile Kritik Noktadaki Analitik İfadesi	30
3.6. Monte Carlo çalışmalarıda Birinci ve İkinci Dereceden Faz Dönüşümlerinin Sonlu Örgü Etkileri.....	33
4. SONUÇ.....	37
KAYNAKLAR	55
ÖZGEÇMİŞ	59

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 2.1. Beş bitli demon'un enerji düzeyleri:	17
Çizelge 2.2. Boyutlara göre koordinasyon sayıları.....	22
Çizelge 4.1. L=4,6,8 için elde edilen parametre değerleri;.....	53
Çizelge 4.2. Fit analizi için literatür değerleri;	53
Çizelge 4.3. d=7 boyutta L=4,6,8 örgüleri için Düzen Parametresindeki değişime karşılık $-\frac{\beta}{\vartheta}$ kritik üst değerleri	53

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.1. Düzen sistemlerinde çeşitli spin dizilisleri: (a) ferromıknatıslar, (b) antiferromıknatıslar, (c) ferrimıknatıslar	13
Şekil 2.2. 2 boyutlu örgü.....	19
Şekil 2.3. 3 boyutlu örgü.....	19
Şekil 2.4. 4 boyutlu hiperkübik örgü.	20
Şekil 2.5. 5 boyutlu hiperkübik örgü	20
Şekil 2.6. 6 boyutlu hiperkübik örgü	21
Şekil 2.7. 7 boyutlu hiperkübik örgü	21
Şekil 3.1. Düzen parametresinin olasılık dağılımının PL (M) şematik değişimi.....	28
Şekil 3.2. (a) Sonlu $L \times L$ Ising ferromagnetinin manyetizasyonu $\langle s \rangle$ ve sonsuz Ising ferromanyetik grafiğinin manyetik alanla karşılaştırması. Noktalı çizgiler Monte Carlo simülasyonunda kısa sürede oluşan dallanmayı gösterir. $\pm M_{sp}$ sonsuz sistemin doğal manyetizasyonu, $\pm M_L$ $t = 0$ da sonlu sistemin manyetizasyonun en olası değerini gösterir. (b) iki bölge için manyetizasyonun olasılık dağılım değerlerine karşılık gelen grafiği gösterir	34
Şekil 4.1. $L=4$ örgüsü için $T \ll T_c$ de düzen parametresinin ihtimaliyet dağılımının değişimi	37
Şekil 4.2. $L=4$ $T < T_c$ örgüsü için düzen parametresinin ihtimaliyet dağılımının değişimi	38
Şekil 4.3. $L=4$ $T = T_c$ örgüsü için düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının değişimi	38
Şekil 4.4. $L=4$ $T > T_c$ örgüsü için düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının değişimi	39
Şekil 4.5. $L=4$ $T \gg T_c$ örgüsü için düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının değişimi	39
Şekil 4.6. $L=4$ örgüsü için $T \ll T_c$, $T < T_c$, $T = T_c$, $T > T_c$, $T \gg T_c$ 'de düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının karşılaştırması	40
Şekil 4.7. $L=6$ $T \ll T_c$ örgüsü için düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı değişimi	40
Şekil 4.8. $L=6$ $T < T_c$ örgüsü için düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı değişimi.....	41
Şekil 4.9. $L=6$ $T = T_c$ örgüsü için düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı değişimi	41

Şekil	Sayfa
Şekil 4.10. $L=6$ $T > T_c$ örgüsü için düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı değişimi.....	42
Şekil 4.11. $L=6$ $T \gg T_c$ örgüsü için düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının değişimi.....	42
Şekil 4.12. $L=6$ $T < T_c$, $T < T_c$, $T = T_c$, $T > T_c$, $T \gg T_c$ için düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının karşılaştırması.....	43
Şekil 4.13. $L=8$ $T < T_c$ örgüsü için düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının değişimi.....	43
Şekil 4.14. $L=8$ $T < T_c$ örgüsü için düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının değişimi.....	44
Şekil 4.15. $L=8$ $T = T_c$ örgüsü için düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının değişimi.....	44
Şekil 4.16. $L=8$ $T > T_c$ örgüsü için düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının değişimi.....	45
Şekil 4.17. $L=8$ $T \gg T_c$ örgüsü için düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının değişimi.....	45
Şekil 4.18. $L=8$ $T < T_c$, $T < T_c$, $T = T_c$, $T > T_c$, $T \gg T_c$ için düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının karşılaştırması.....	46
Şekil 4.19. $L=4, 6, 8$ örgüleri için $T < T_c$ de düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının karşılaştırması	46
Şekil 4.20. $L=4, 6, 8$ örgüleri için $T > T_c$ 'de de düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının karşılaştırması.....	47
Şekil 4.21. $L=4, 6, 8$ örgüleri için $T = T_c$ 'de de düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının karşılaştırması.....	47
Şekil 4.22. Doğrusal boyutları $L = 4, 6, 8, 10$ olan örgüler için ölçeklenmiş düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının, $(P_L L^{-d/4})$, ölçeklenmiş manyetizasyona $(M L^{d/4})$ karşı grafiği.	49
Şekil 4.23. a. Çizgisel boyutu $L=4$ olan örgü için $P_L(M)$ 'nin M 'ye karşı analitik ifadesine göre yapılmış olan fit. b. Çizgisel boyutu $L=4$ olan örgü için $P_L(M)$ ile fitin fark grafiği.	50
Şekil 4.24. a. Çizgisel boyutu $L=6$ olan örgü için $P_L(M)$ 'nin M 'ye karşı analitik ifadesine göre yapılmış olan fit. b. Çizgisel boyutu $L=6$ olan örgü için $P_L(M)$ ile fitin fark grafiği.	51
Şekil 4.25. a. Çizgisel boyutu $L=8$ olan örgü için $P_L(M)$ 'nin M 'ye karşı analitik ifadesine göre yapılan fit. b. Çizgisel boyutu $L=8$ olan örgü için $P_L(M)$ ile fitin fark grafiği.....	52

SİMGELER VE KISALTMALAR

Bu çalışmada kullanılmış simgeler ve kısaltmalar, açıklamaları ile birlikte aşağıda sunulmuştur.

Simgeler	Açıklamalar
$< >$	Beklenen Değer ve Ortalama
∞	Sonsuz İşareti
A	Alternatif Enerji
B_i	Ising spini
C	Özısı
d	Uzay Boyutu
E_D	Demon Enerjisi
E_I	Ising Enerjisi
H	Dış manyetik Alan
H_I	Ising Spin Enerjisi, İç Enerji
J_{i,j}	Spinler Arası Eşleşme Sabiti
k_B	Boltzmann Sabiti
L	Doğrusal Boyut
M	Manyetizasyon (Düzen parametresi)
P_L(M)	Düzen Parametresi Olasılık Dağılımı
S	Entropi
T	Sıcaklık
t	İndirgenmiş Sıcaklık
T_c	Kritik Sıcaklık
α	Özısı Kritik Üssü
β	Manyetizasyon Kritik Üssü
γ	Manyetik Alınganlık Kritik Üssü
ΔH_I	Ising Enerjisindeki Değişim
v	Korelasyon Uzunluğu Kritik Üssü
ξ	Korelasyon Uzunluğu
χ	Manyetik Alınganlık

Kısaltmalar	Açıklamalar
CA	Cellular Automaton
CCA	Creutz Cellular Automaton
MC	Monte Carlo
RG	Renormalizasyon Grup Teorisi

1. GİRİŞ

Günümüz teknoloji çağında çevremizdeki manyetik alanın insan ve madde üzerindeki etkisi, bilim adamları için yoğun bir şekilde çalışılan konulardandır. Maruz kaldığımız manyetik alanın etkilerini öğrenmemiz hem araştırmaların geliştirilmesi hemde farkında olmadan yaşanabilecek kötü durumları engellemek veya önlem almak için gereklidir. Bilgisayardan cep telefonuna birçok alanda kullandığımız elektronik cihazların elektromanyetik etkileri araştırılması gereken bir durumdur. Bu araştırmalar özellikle tıp, elektronik, haberleşme ve biyoloji gibi birçok alanda sürdürülmektedir

Faz geçişi, doğada maddenin belirli koşullar altında maddenin bir durumdan diğer bir duruma ani geçişi olarak tanımlanır ve parçacıklar arası etkileşimin bir sonucudur. Faz dönüşümüne en basit örnek suyun faz değişimidir. Bu dönüşüm sadece sıvı-katı-gaz olarak değil bununla birlikte paramanyetik fazdan ferromanyetik faza, normal iletken fazdan süper iletken faza geçişler olarak gerçekleşebilir [1].

Manyetik faz geçişi, maddenin mıknatıslanmasındaki değişimi ifade eder. Bir maddenin mıknatıslanması manyetik dipol momentinin hacmine oranıdır. Mıknatıslanmanın kaynağı yörüngelerdeki çiftlenmemiş elektron spinidir. Maddeler manyetik özellik açısından Ferromanyetik, Paramanyetik ve Diyamanyetik olarak gruplandırılır. Paramanyetik ve Ferromanyetik maddeler sürekli manyetik dipol momentlere sahip atomlardan oluşur. Diyamanyetik maddeler sürekli manyetik momente sahip olmayan atomlardan oluşur [2].

Curie sıcaklığın altında manyetik momentleri farklı yönde olan spinlerin aynı yönde dizilmesiyle madde ferromanyetik özellik kazanır. Curie sıcaklığında spinlerin aşağı ve yukarı yönde yönelim sayıları yaklaşık eşittir. Curie sıcaklığın üstündeki spin durumları ise rastgele biçimdedir. Madde Curie sıcaklığı üstüne çıktığında paramanyetik hale geçmiş olur. Paramanyetik madde, manyetik dipol momentli atomların varlığından kaynaklanır. Spinlerin birbirleri ile etkileşebileceği düşünülse de bu etkileşme bir değişiklik oluşturmayacak kadar zayıftır. Dış manyetik alanın maddeye etkisi alanın yönüne göre aynı yönde atomik dipolleri yöneltmeye zorlayarak madde mıknatıslanmış olur. Dış manyetik alan yok olduğunda maddedeki manyetik dipol momentler eski halini alır. Diyamanyetik maddeler sürekli dipol momentlere sahip olmayan maddelerdir. Diyamanyetik madde bir dış manyetik alan içersine konulduğunda bu alana zıt yönde zayıf bir manyetik dipol moment oluşur ve madde

mıknatıslanmış olur. Manyetik alanın kaldırılmasıyla manyetik dipol momentler tekrar eski halini alır [2].

Manyetik faz geçişi, atom yörüngelerindeki serbest elektronların spinine bağlıdır. Serbest elektron spinleri aynı yönde ise etkileşme enerjileri az olur. Sıcaklık mutlak sıfıra yakın olduğunda sistemin enerjisi en az seviyededir ve spinler aynı yönde yönelmiştir. Bu durumu ferromanyetik durum olarak tanımlayabiliriz. T sıcaklığı yükseldikçe spinler rastgele yönelim gösterir. Sıcaklık, T_c kritik sıcaklığına ulaştığında tüm spinler rastgele yönelmiş olur ve sistem paramanyetik hale geçer. $T < T_c$ durumunda sistem düzenli ve manyetik faz ferromanyetik halde, $T > T_c$ durumunda ise sistem düzensiz manyetik faz paramanyetik haldedir [3].

Ising model spinler arası basit etkileşmeleri içeren, ferromanyetik maddelerin davranışlarını ve termodinamik özelliklerinin inceleyen bir modeldir. Bilgisayar simülasyonu yardımıyla faz geçişleri ve kritik olaylar incelenir. Ising modelin ferromanyetik faz geçişini temsil eden en basit hali spin $\frac{1}{2}$ ising modelidir [4]. Bu model iki durumlu ve tek düzen parametrelili bir modeldir. Analitik çözümü E. Ising tarafından 1925 yılında bir boyutlu uzayda yapılmıştır [5]. Dış manyetik alan yokluğunda iki boyutlu uzayda ise 1944 yılında Onsager tarafından analitik çözüm yapılmıştır [6]. Bundan başka üç durumlu ve iki düzen parametrelili bir sistem olan Spin-1 ising modeli de araştırmacılar tarafından incelenmektedir [7-9]. Spin-1 modeli Blume, Emery ve Griffiths tarafından 1971 yılında tanımlanmıştır [8]. Bu tez çalışmasındaki simülasyonlarda spin $\frac{1}{2}$ ising modeli kullanılmıştır. Simülasyon ölçülecek bir durumun yapay bir ortamda, benzer koşullar altında gerçekleştirip ölçümler veya etkiler ile ilgili bilgilenmektir. İstatistik mekanikte bazı problemlerin çözümü tam yapılamazken yaklaşık çözüm bulmak mümkün olabilir. Bu yaklaşık çözümlerin doğruluğunu denemek ve desteklemek açısından simülasyon çalışmaları oldukça önemlidir [10,11]. Simülasyon çalışması deneyde karşılaşılabilecek birçok problemi ortadan kaldırması açısından önem kazanmaktadır. Bilgisayar simülasyon çalışmaları teorik ve deneysel çalışmalar arasında oldukça işlevsel bir yere sahiptir. Simülasyon çalışmaları ile fiziksel olayları incelerken, modelin kurulması, modelin gelişiminin sağlanması, verilerin elde edilmesi ve bu verilerin değerlendirilmesi teorik çalışmaların yönlendirilmesi ve geliştirilmesini sağlar. Oluşturulan teorik model ile sistemin birbirine uyumluluğu elde edilen bulgular ile araştırılan özellikler hesaplanır.

İstatistik sistemlerin sayısal simülasyonu, dolayısı ile faz geçişi ve kritik olay çalışmalarında kullanılan en temel araç Monte Carlo (MC) ve Molekül Dinamiği (MD)dir [11,12]. Bu yaklaşımda rastgele üretilen sayılar kullanılır. Başlangıç anında temel durum olarak spinlerin hepsi aynı yönde kabul edilir. Bu hesaplamalardaki algoritmalarda sıcaklık değeri önceden bilinir ve giriş parametresi olarak kullanılır. Sabit sıcaklıkta bütün spinler teker teker yön değiştirmeye çalışmaktadır. Örgünün spinlerin durum değiştirmesi bir Monte Carlo adımıdır. Değişikliğe uğrayacak spin, örgü üzerinde herhangi bir şekilde seçilebilir. Rastgele bir konfigürasyonla karşılaşma ihtimali Boltzman dağılımına uygundur.

Cellular Automaton (CA) matematiksel bir modeldir. Cellular Automatonda uzay ve zaman kesikli değerlere sahiptir ve sonsuza kadar genişletilebilen düzenli bir hücre örgüsünden oluşur. Bu model için ilk temel teoriler 1983 yılında Wolfram tarafından verilmiştir [13,14]. Bölgesel iç etkileşmeye sahip çok sayıda farklı sistem genellikle Cellular Automaton kullanılarak modellenmiştir. Mikroskobik seviyedeki her bir konum kristal örgüdeki atomlara karşılık gelen noktaları temsil eder. Makroskobik seviyede bir “Cellular Automaton” için her hücre birçok molekül ihtisas eden bir bölgeyi temsil edebilir ve onun değeri birkaç farklı faza karşılık gelebilir.

Günümüzde Creutz CA’ında termodinamik nicelikler üzerinde boyut etkisinin ve teorik çalışmaların öngördüğü sonuçların doğruluğunu araştırmak için $d=2$ [15,16], $d=3$ [17], $d=4$ [18-21], $d=5$ [22,23], $d=6$ [24], $d=7$ [25], $d=8$ [26] boyutlu Ising modelleri için simülasyonlar yapılmıştır.

Tek spin dönüşüm dinamiği algoritması

Sistemdeki enerji değişimini spin değerinin değişiminden veya dönüşüm olasılığından yararlanarak buluruz. Burada enerji yükselişinin miktarı dönüşümlerinin olasılığını da değiştirir. Büyük enerji değişimleri spin değişimi olasılığını da yükseltir. Dönüşüm olasılığında daha düşük bir enerji değerinde spin yeni değerini elde eder. Aksi halde spin değeri değişmez. Yeni enerji değeri sistemin özelliklerinden hesaplanabilir. Bu dönüşüm enerji değerine bağlıdır ve hesaplama T sıcaklık parametresi ile teorye uygun şekilde yapılır [27].

Sıcaklık

Manyetik sistemin davranışı sıcaklıkla değişir. Bundan dolayı modellerin genelinde sıcaklık önemlidir. Fizikte sıcaklık mx^2/t^2 boyutundadır ($1/2mv^2$). Molekül dinamiğinde sıcaklık moleküllerinin ortalama dönüşümsel moleküler kinetik enerjisi ile bulunur. Termodinamikte, termodinamiğin 1. yasası $du = cvdt$ ile ideal bir gaz için du sıcaklık değişimi, cv öz ısı ve T Kelvin cinsinden sıcaklık olarak ifade edilir. Spinler arası etkileşim enerjisi J ile ifade edilir. $J = 1,380 \times 10^{-23}$ Joule $k_B = 1,380 \times 10^{-23}$ olarak $J/k_B = 1$ olur. ΔE_{ij} birimi joule k_B birimi joule ve T ifadesi birimi Kelvin olarak $\Delta E_{ij}/k_B T$ ifadesi birimsizdir [27].

Bağlı durumlar

Sonlu örgünün incelenmesindeki zorluk sonsuz örgüler simule edilirken periyodik bağ koşullar adı verilen yöntem ile aşılabılır. Sonlu örgülerden sonsuz örgünün elde edilmesi amaçlanmaktadır. Bu sonlu örgüdeki birimlerin bir yüzeyinin en yakın komşuluk biriminin diğer birimdeki ters yüzünün ayarlanması ile her bir birimin aynı sayıda en yakın komşuluk etmesi sağlanır. Ele alınan hücrenin mevcut komşu sayısı dikkate alınırsa bu durum serbest bağ koşulu olarak adlandırılır [27].

Sonlu örgü etkileri

Yalnızca sonsuz ideal sistemlerde tekillik ve kesiklilikler gözlemlenir. Örneğin sonsuz kare ising modelde T_c değerinde manyetizasyon sıcaklığı T bağlı olarak kesiklilik gözlemlenebilir. $T > T_c$ için ve $T < T_c$ için $M=0$ da bu doğaldır. T_c sıcaklık azaldıkça M değeri de yükselir. Ancak sonunda bir sistemde T_c nin üstünde bir değerde bile M değeri sıfır olmaz ve buna bağlı olarak T_c oranında bir kesiklik gözlemlenmez. Bir davranışın en ideal olarak incelenebilmesi için modelin boyutunun değerini de artırılmalıdır. Ancak bundan dolayı boyutlu sistemler daha uzun hesaplama süresi gerektirir [27].

2. TEORİ

2.1. Faz Geçişleri

Ferromanyetik durumda ($T < T_c$) maddeye alan uygulanmasında mıknatıslanabilir ve bir dış H alan uygulandığında mıknatıslanma (manyetizasyon) alan doğrultusunda olmak için ani olarak dalgalanır. Manyetizasyon artık H 'ye lineer olarak bağlı değildir. Sıfır dış alanda manyetizasyonun büyüklüğü $M_0(T)$, T_c kritik sıcaklığa alttan yaklaşırken azalır. Buna göre dış manyetik alan yokluğunda demiri ısıtırsanız ilginç olan hiçbir şey olmaz sadece manyetizasyon düzgün olarak azalır; T_c ve üstü sıcaklıklarda hiç manyetizasyon kalmaz. T_c 'de kesikli olarak değişen M_0 'ın kendisi değil değişim oranıdır. Sürekli faz geçişinin özünü şudur: T_c kritik sıcaklığında kesikli olarak değişen sistemin özellikleri değil en az onlardan birinin değişim oranıdır. Sonuç olarak sıfırdan farklı bir gizli ısı varsa faz değişikliği birinci dereceden faz geçişi diğer geçişlerin hepsi de sürekli faz geçişi olarak nitelendirilir. Manyetik faz geçişlerinin anlaşılması 20. yüzyılın başlarında geliştirilen yeni teorilerle birlikte hızlanmıştır. Bunlardan ilk göze çarpanı Pierre Weiss'in 1907'de geliştirdiği ferromanyetizma teorisidir. Bu teori, sistemi oluşturan manyetik momentlerin birbirleriyle etkileşmesi ve bu etkileşmenin de ortalama manyetizasyonla orantılı olan yapay bir moleküler alan yoluyla olması ilkesine dayanmaktadır. Bu modellerin ortak özelliği manyetik momentlerin sabit örgü konumlarına (noktalarına) yerleştirilmesi ve momentlerin paralel olması durumunda enerjisi maksimum olan çift etkileşmeleri şeklinde olmasıdır. Bu etkileşmelerin özellikle iki çeşidi önemlidir: İlki Ising model'dir. Bu modelde manyetik momentler sadece iki yönelime sahip olan bir boyutlu klasik çubuklar şeklinde düşünülmüştür. İkinci model ise Heisenberg modelidir. Manyetik momentleri kuantum mekaniksel üç boyutlu spin operatörleri (işlemcileri) şeklinde değerlendirip, enerjilerinin bu operatörlerin skaler çarpımlarıyla orantılı olduğunu kabul eder. Modeller manyetik faz geçişleriyle ilgili yorumlar yapılmasına önemli katkılarda bulunur [3].

2.2. Statik Kritik Olay ve Statik Kritik Üsler

Kritik olay ikinci derece faz geçişi yapan sistemin kritik sıcaklık T_c civarındaki davranışlarını ifade eder. Kritik sıcaklığın her iki tarafında iki faz farklı uzaysal simetrilere sahiptir. Kritik sıcaklığın üstünde manyetizasyon sıfırdır ve sistem dönme simetrisine sahiptir. Kritik sıcaklığın altında manyetizasyon kendiliğinden oluşur. Bu durum dönme

simetrisini bozmaktadır. Bir simetrinin olup olmaması veya diğer bir ifade ile kritik noktadaki süreksizlikten dolayı, termodinamik niceliklere karşılık gelen iki faz farklı fonksiyonlar ile tanımlanabilir. Simetrinin bozulmasıyla düşük sıcaklık fazını belirlemek için yeni bir parametre gereklidir. Bu parametre düzen parametresi olarak adlandırılıp M ile temsil edilir. Herhangi bir sistem için bu parametre rahatlıkla ölçülebilen yaygın bir termodinamik değişken olarak alınmaktadır. Ferromanyetizma için M manyetizma vektörüdür [28].

2.3. $d > 4$ için Sonlu Örgü Ölçekleme

Renormalizasyon Grup (RG) teorisine dayanılarak türetilen sonlu örgü ölçekleme, serbest enerjinin singüler kısmı ve kolerasyon uzunluğu aşağıdaki formüllerle verilmektedir [2].

$$f_L = L^{-d} f(tL^{Y_T}, hL^{Y_H}, uL^{Y_U}) \quad (2.1)$$

$$\xi_L = L\xi(tL^{Y_T}, hL^{Y_H}, uL^{Y_U}) \quad (2.2)$$

Burada t indirgenmiş sıcaklık, $y_T > 0$, $y_H > 0$, ve $y_U < 0$ renormalizasyon grup üsleri, h dış manyetik alan, u 'da alakasız değişkendir. Eğer serbest enerji ölçekleme fonksiyonu $f(x, y, z)$, $z \rightarrow 0$ iken “tekil” ise, o zaman u tehlikeli alakasız değişken olarak adlandırılır. $\xi(x, y, z)$ kolerasyon ölçekleme fonksiyonu $z \rightarrow 0$ sınır koşulunda düzenli olduğu kabul edilsede daha sonra tekil olma ihtimali göz önüne alınmaktadır. Küçük z değerleri için;

$$f(x, y, z) = z^{p_1} \bar{f}(xz^{p_2}, yz^{p_3}) \quad (2.3)$$

alınabilir. Serbest enerji yoğunluğu f 'nin bu şekilde seçimi; $d \geq 4$ boyutunda bulk ölçeklemesi için bilinen formül yazılabilir.

$$f_L = L^{-d^*} F(tL^{Y_T^*}, hL^{Y_H^*}) \quad (2.4)$$

Bu denklem t ve h parametrelerini içerir ve $d^* = d - P_{yu}$, $y_T^* = y_T + P_2 y_U$, $y_H^* = y_H + P_3 y_U$ etkin üslerdir. Fisher üssü;

$$w^* = d - d^*(y_T^* v). \quad (2.5)$$

Monte Carlo simülasyonlarında genellikle kullanılan kübik veya benzer sistemler için $d=d^*$ dir. $L \rightarrow \infty$ olduğunda f_L 'nin f_∞ serbest enerjisine uygunluğunun var olması $x \rightarrow \pm\infty$ şartında $y|x|^{-\Delta}$ için sabittir.

$$F(X, Y) = |x|^{-v} X_z(y|x|^{-\Delta}) \quad (2.6)$$

$\Delta = y_H^* / y_T^*$, ve $Y_\pm$ ölçekleme fonksiyonudur. Bulk kolerasyon uzunluğununa benzer şekilde $L \rightarrow \infty$ bizi asimtotik formüle ulaştırır.

$$\xi(x, y, 0) = |x|^{-v} X_\pm(y|x|^{-\Delta}) \quad (2.7)$$

Burada

$$v = 1/y_T \quad \text{ve} \quad \Delta^* = y_H / y_T \quad (2.8)$$

dır. Burada eşitlik 2.2'deki ξ ölçekleme fonksiyonunun $z \rightarrow 0$ iken tekil olmadığı varsayılmıştır. Serbest enerjinin çeşitli türevleri alınarak aşağıdaki ölçekleme bağıntılarına ulaşılır;

$$\alpha = 2 - d^* / y_T^*, \quad \beta = d^* / y_T^* - \Delta, \quad \text{ve} \quad \gamma = 2\Delta - d^* / y_T^* \quad (2.9)$$

Burada α , β ve γ sırasıyla öz ısı, manyetizasyon ve manyetik alınganlık için kritik üslerdir. Sonuç olarak y_T^* ve y_H^* aşağıdaki gibi ifade edilir;

$$y_T^* = \frac{1}{v^*} = d^* / (\gamma + 2\beta) \quad (2.10)$$

$$y_H^* = \frac{\Delta}{v^*} = d^* (\gamma + \beta) / (\gamma + 2\beta). \quad (2.11)$$

y_T^* ve Δ^* değerleri kolerasyon uzunluğunun ölçekleme formüllerinde görünen $y_T=1/\nu$ ve $\Delta^* = y_H / y_T$ kritik üslerinden farklı ise hiperölçeklemede bozulma oluşur. Bu durumdan kaçınmak için $d=d^*$ alınmalıdır. Sonlu örgü boyu için manyetizasyon ve manyetik alınganlık göz önüne alınmalıdır.

$$m_L = \langle s \rangle_L \quad (2.12)$$

$$X_L = L^d (\langle s \rangle_L - \langle s \rangle_L^2) \quad (2.13)$$

Burada $s = (1/L^d) \sum s_i$ ve s_2 i'inci hücreye ait spindir. Eşitlik 2,4'e göre manyetizasyon M_L ve manyetik alınganlık χ_L aşağıdaki ölçekleme formülleri şeklinde ifade edilebilir;

$$m_L = \frac{\partial f_L}{\partial h} = L^{Y_H^* - d} V(tL^{Y_T^*}, hL^{Y_H^*}) \quad (2.14)$$

$$\chi_L = \frac{\partial^2 f_L}{\partial h^2} = L^{2Y_H^* - d} W(tL^{Y_T^*}, hL^{Y_H^*}) \quad (2.15)$$

V ve W sembolleri ile gösterilen ölçekleme fonksiyonları F 'den türetilmiştir. Manyetik alınganlık kadar toplam manyetizasyon için kritik sıcaklık altında ($T < T_c$) $L \rightarrow \infty$ ve $h \rightarrow \pm 0$ sınırında dikkat verilmelidir. İlk önce $L \rightarrow \infty$ sonra da $h \rightarrow \pm 0$ limit alındıktan sonra genel toplam değerleri elde edilir.

$T \rightarrow T_c^-$ ye giderken

$$m_b = |t|^\beta \text{ ve } \chi_b = |t|^{-\gamma} \quad (2.16)$$

dir. Eşitlik 2.13 ile

$$\langle s^2 \rangle_L = m_b^2 + L^{-d} \chi_b \quad (t < 0, L \rightarrow \infty) \quad (2.17)$$

Elde edilir. Eğer ilk önce $h=0$ alıp daha sonra $L \rightarrow \infty$ iken limit alınır ise $\langle s^2 \rangle_L = 0$ olur ve

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \left[\langle s^2 \rangle_{L,h=0} \right] = m_b^2 \quad (2.18)$$

elde edilir. Eşitlik 2.17 bu limitte de uygulanabilir. Eşitlik 2.13 ve eşitlik 2.14 sıfır alanlı manyetik alınganlığın yardımıyla 2.19 daki koşullarla uyumlu olmalıdır.

$$\chi_L \propto L^d |t|^{2\beta} \quad T \rightarrow T_c^- \quad (2.19)$$

Eşitlik 2.15'dan bu ölçekleme formülünü elde etmek için

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} W(x,0) \propto |x|^{2\beta} \quad (2.20)$$

$$d^* = 2(y_H^* + \beta y_T^*) - d \quad (2.21)$$

Eşitlik 2.21'e eşitlik 2.10 ve eşitlik 2.11'deki ifadeleri yazarak, 2.22 eşitliğini elde ederiz.

$$d^* = d \quad (2.22)$$

İkinci olarak kritik sıcaklığın altında $T < T_c$ sonlu boyutlu manyetizasyon M_L ifadesi

$$m_L = m_b \tanh(m_b h L^d) \quad (2.23)$$

ifadesine sahiptir. ξ_b bulk kolerasyon uzunluğu ve m_b bulk manyetizasyonu olmak üzere,

$L \gg \xi_b$ ve $|h| \ll (m_b \xi_b)^{-1} L^{1-d}$ için χ_L nin ifadesi

$$\chi_L = L^d m_b^2 \cosh^{-2}(m_b h L^d) \quad (2.24)$$

olur. $T \rightarrow T_c^-$ ve $h=0$ için χ_L denklem 2.19'a indirgenir ve böylece $d^* = d$ elde edilir.

Kritik sıcaklığın altında ($T < T_c$) manyetizasyonun sıfır alanlı ihtimaliyet dağılımı $P_L(s)$ 'nin

sonlu örgü ölçekleme özellikleri göz önüne alınmaktadır. $P_L(s)$ 'nin L ve $\pm m_b$ için denklem 2.25'deki gibi yazılabilir.

$$P_L(s) = \frac{L^{d/2}}{2(2\pi\delta\chi_b)^{1/2}} (e^{-(s-m_b)^2 L^d/2\chi_b} + e^{-(s+m_b)^2 L^d/2\chi_b}). \quad (2.25)$$

Üstel fonksiyonun argümanları aşağıdaki gibidir;

$$(s|t|^{-\beta} + a)^2 \frac{(|t|L^{y_T^*})^{\gamma-2\beta}}{2b} \quad (2.26)$$

$P_L(s)$ 'de $|t|L^{y_T^*}$ ölçekleme ifadelerinin oluşumunu gösterir. Burada $y_T^* = d^*(\gamma + 2\beta)$ 'dır. Benzer olarak bir dış manyetik alanın varlığında üstel fonksiyonların argümanları $(s \pm m_b - \chi_b h)^2 L^d / 2\chi_b$ olur. h 'nin birinci kuvvetini içeren (lineer) terim $(b|t|L^{d/(\gamma+2\beta)})^{-(\gamma+\beta)} h L^{y_H^*}$ 'dir. Bu ölçekleme değişkeni $P_L(s)$ 'nin $L^{y_H^*}$ 'ya bağımlılığını göstermektedir. Burada $y_H^* = d^*(\gamma + \beta) / \gamma + 2\beta$ 'dır. Bu ifadeler ancak $d^* = d$ olduğunda y_T^* ve y_H^* denklem 2.10 ve denklem 2.11'te verilen ifadelere eşit olurlar Denklem 4.4 ölçekleme formülünde $d^* = d$ olması gerektiği anlaşılır.

Renormalize edilmiş eşleşme sabiti (Binder parametresi) Binder tarafından aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır [2].

$$g_1 = \frac{\langle s^4 \rangle_L}{\langle s^2 \rangle_L} - 3 = \left[\frac{\chi_L^{(4)}}{L^d \chi_L^2} \right]_{h=0} \quad (2.27)$$

Burada χ_L eşitlik 2.15'da verilen ifade olup, dördüncü türev $\chi_L^{(4)}$ ise aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır.

$$\chi_L^{(4)} = \frac{\partial^4 f_L}{\partial h^4} = L^{4y_H^*-d} W^{(4)}(tL^{y_T^*}) \quad (2.28)$$

Eşitlik 2.27'de $h=0$ sınır koşulu ile eşitlik 2.15 ve eşitlik 2.28 yerine yazılırsa;

$$g_L = L^{d^*-d} G(tL^{y_T^*}), L \rightarrow \infty \quad (2.29)$$

Elde edilir. G ifadesi ölçekleme fonksiyonunu tanımlar. $d^* = d$ şartına uygun olarak $T = T_c$ için sıfırdan farklı bir sabit olur. Burada hiperölçekleme bozulduğunda dahi $d^* = d$ olduğu gösterilmiştir. Eşitlik 2,3'ye benzeterek

$$\xi(x, y, z) = z^{q_1} \bar{\xi}(xz^{q_2}, yz^{q_3}) \quad (2.30)$$

$$\xi_L \approx L^{1+q_1 y_U} Z(tL^{y_T^{**}}, hL^{y_H^{**}}) \quad (2.31)$$

elde edilir. Burada $y_T^{**} = y_T + q_2 y_U$ ve $y_H^{**} = y_H + q_3 y_U$ 'dır. $x \rightarrow \pm\infty$ Limitinde ve $y|t|^{-\Delta^{**}}$ değişmemek kaydıyla aşağıdaki ifade yazılabilir;

$$Z(x, y) \rightarrow |x|^{-\nu} \tilde{Z}_{\pm}(y|x|^{-\Delta^{**}}) \quad (2.32)$$

Burada üstel ifadeler $\nu = (1 + q_1 y_U) / y_T^{**}$ ve $\Delta^{**} = y_H^{**} / y_T^{**}$ 'dır. Sonlu örgü kolerasyon uzunluğu ξ_L , L ile sınırlandırılması nedeniyle $q_1 y_U \leq 0$ olması gerekir. $t=h=0$ olduğu kabul edildiğinde, kolerasyon uzunluğu örgünün doğrusal boyut değerine ulaşınca kadar artar. Bu durum $q_1 = 0$ ve $\nu = 1 / y_T^{**}$ olduğunu gösterir. y_T^{**} 'ın y_T 'ye eşit olması gerekli değildir. İndirgenmiş sıcaklık, T_L sıcaklığıyla;

$$T_L = [T - T_c(L)] / T_c \quad (2.33)$$

ifade edilir. $T_c(L)$ çizgisel boyutu L olan örgünün kritik sıcaklığıdır ve manyetizasyonun iki tepeli piklerini gözlenebildiği sıcaklık olarak tanımlanabilir. Buna göre aşağıdaki gibi bir Ψ kayma üssü;

$$[T_c(L) - T_c] / T_c = AL^{-1/\Psi} \quad (2.34)$$

Yazılabilir. Bu ifadede A bir sabittir. Periyodik sınır şartlı bir örgü için $d > 4$ boyutta

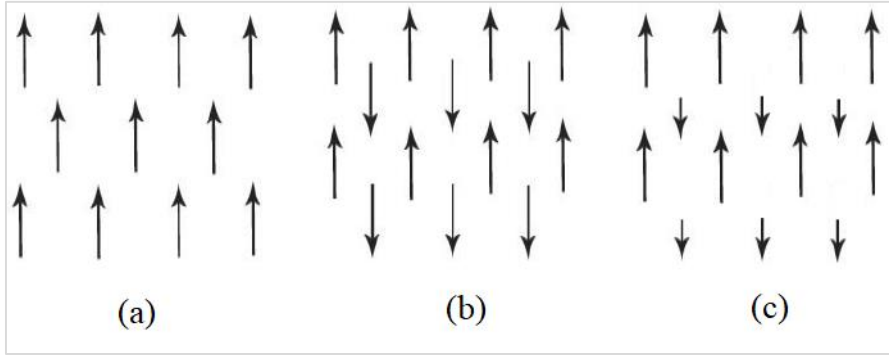
$$\Psi = v^* = 1/y_T^* \text{ yazılabilir.}$$

2.4. Spin-1/2 Ising Model

Ising model ferromanyetik sistemlerin faz yapılarının ve çeşitli özelliklerinin belirlenmesi için geliştirilip kullanılan bir modeldir. Spin-1/2 Ising modelini ilk olarak Lenz önermiştir [13]. 1925 yılında Ising, modelin bir boyutta analitik çözümünü yapmış ve faz geçisi olmadığını belirtmiştir [5]. Bununla birlikte farklı yaklaşımlar kullanarak yüksek boyutlarda da faz geçisi olmadığını iddia etmiştir. Çalışmaları detaylandıran Heisenberg, Lenz'in sonuçlarından farklı olarak Ising modelde faz geçişlerini gözlemiştir [7]. Peierls de ayrıca düşük sıcaklıklarda Ising model ile ilgili çalışmalarıyla kendiliğinden manyetizasyonu 1936'da tanımlamış ve yüksek boyutlardada faz geçisi olabileceğini kanıtlamıştır [12]. Modelin iki boyutta analitik çözümü Lenz'in öğrencisi Onsager tarafından sıfır alan için yapılmıştır [11]. Diğer boyutlarda modelin analitik çözümü henüz tamamlanmamıştır. Ising model, genel yapısıyla ferromanyetik malzemelerin termodinamik özelliklerini araştıran bir modeldir. Bu modelde ele alınan sistem, N tane sabit noktadan oluşan d boyuttaki periodik bir örgünün örgü noktalarına spinlerin yerleştirilmesini temel alır. Her bir spin, belli bir yönde yönelmiş mikroskobik magnetler olarak ele alınıp iki olası durumda bulunabilirler. Noktalar +1 (eksene paralel, spin yukarı) veya -1 (eksene zıt, spin aşağı) değerlerine sahip S_i spin değişkeni ile isaretlenir. Verilen bir $S = \{S_i\}$ kümesi tüm sistemin olası tüm sonuçlarını belirtmek üzere, sistemin Hamiltonien' i S ' nin bir fonksiyonudur.

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j + h \sum_i S_i \quad (2.35)$$

Burada $\langle ij \rangle$ en yakın komşuluk toplamını, J_{ij} etkileşim enerjisini, h ise dış manyetik alan parametresini temsil eder. Etkileşimler izotropik ise $J_{ij} = J$ alınır. $J < 0$ ise sistem ferromanyetik olup tüm spinler aynı yönelimde, $J > 0$ ise sistem antiferromanyetik olup birbiriyle zıt yönelimli spinlerden oluşan taban duruma sahiptir.



Şekil 2.1. Düzen sistemlerinde çeşitli spin dizilimleri: (a) ferromagnetikler, (b) antiferromagnetikler, (c) ferrimagnetikler [28].

2.5. Creutz'un Gezgin Demon Algoritması

Moleküler dinamik olarak bilinen yöntem Monte Carlo yönteminin bir alternatifidir. Yöntem, klasik dinamik sistemi için Hamilton hareket denklemlerinin sayısal hesaplamalarını içerir. Başlangıç şartı için p genelleştirilmiş momentum ve q genelleştirilmiş koordinatları bilinmelidir. Moleküler dinamik hesaplamalarda rastgele sayı üretimi kullanılmamaktadır. Sistemin istatistik yapısı büyük bir faz uzayından meydana gelmektedir. Molekül dinamiği yönteminin anlaşılması için sistemlerin mikroskopik incelenmesi yapılmalıdır. Bu sistemler birkaç tane parçacıktan oluşabildiği gibi çok sayıda parçacıktan da oluşabilir. Molekül dinamiği maddelerin molekül yapıları, enerjileri ve hareketleri ile bulk (parçacık sayısının sonsuz olduğu durum) özelliklerini ayrıntılı bir şekilde araştırılmasını sağlamaktadır. Sistemin belli kurallara bağlı gelişimi uygun Hamiltonyen kullanılarak gerçekleştirilir. Bu tür algoritmalarda giriş parametresi olarak sıcaklık kullanılır ve sıcaklık değerleri farklı serbestlik derecelerinin arasındaki enerjilerin eş bölüşümünü kullanarak hesaplama yapılır.

Metropolis ve arkadaşlarının oluşturduğu algoritma ile molekül dinamiği arasına giren diğer bir simülasyon yöntemi Creutz (1983) tarafından geliştirilmiştir [4]. Bu yöntemde kullanılan demonlar spine eşlenik momentumların bir serbestlik derecesi olarak tanımlanmaktadır. Bu yeni değişken molekül dinamiğindeki eşlenik momentumun bir benzeri olarak kabul edilebilir. Molekül dinamiğindeki eşlenik momentumun kinetik enerjinin hesabında kullanılmasına benzer şekilde demonlar da kinetik enerjiye sahiptir. Sistemin toplam enerjisi korunacak şekilde demon rastgele olarak spinleri ziyaret eder. Demonların spinleri dolaşmasından dolayı gezgin demon tanımı kullanılır. Demon bir hücreye ulaştığı zaman

spini tersi yönde çevirmeye çalışır. Eğer spinin enerjisi düşükse demon spine enerjisini aktarır ve spinin ters çevrilmesine yetecek kadar enerjiyi aktarır spini ters çevirir. Aksi takdirde başka birimdeki spine geçer ve bu spini ters çevirmeye çalışır. Büyük sistemlerde demonun enerjisi toplam enerjinin sadece küçük bir kısmını oluşturur. Bu algorithmada bir veya birden fazla gezgin demon bulunabilir [9].

2.6. "Cellular Automaton"lar

"Cellular automaton" ilk olarak Neuman ve Ulam tarafından biyolojik sistemlerin simülasyonu için önerilmiştir [29, 30, 31]. CA'lar için ilk temel teori Wolfram tarafından ileri sürülmüştür [32]. Bir CA'da örgü hücrelerine ait olan bir veya daha çok değişken bir kurala uygun şekilde eş zamanlı değişir. Bölgesel iç etkileşmeye sahip birçok farklı elemanlar içeren fiziksel sistemler CA olarak modellenenebilir. Kum ve benzeri tanecikli sistemlerin akışı, difüzyon, "dendritic" kristallerin büyümesi, "turbulent" sıvıların uzaysal yapısının modellenmesi bunlara örnek olarak gösterilebilir. CA'larda uzay ve zaman kesikli değerlere sahip olup sonsuza kadar genişletilebilen düzenli ve periyodik hücrelerden oluşur. Örgünün her hücresinde kesikli değerler alabilen değişkenler bulunur. CA kesikli zaman adımlarında gelişerek her bir hücre değişkeni için değişim kurallarına uygun şekilde bir önceki zaman adımına bağlı olarak kendisi ve kendisine bağlı komşu hücrelerdeki değişkenlerin değerlerine göre yeni değerler elde eder. Komşuluk, bir hücrenin kendisi ve ona en yakındaki komşu hücreleri kapsayan bir ifadedir. Herhangi bir zaman adımında tüm hücre değişkenleri belirli bir kurala uygun şekilde elde edilir. Genel olarak d boyuttaki bir CA'un gelişimi için periyodik sınır şartı kullanılır. Periyodik sınır şartında örgüler oluşturulurken periyodikliğin devamı için $N+1$ 'inci örgü noktası 1'inci örgü noktası olarak $(N+1) \equiv (1)$ kabul edilir. Bu şarta ek olarak serbest sınır şartı da kullanılır. Bu sınır şartında ise $N+1$ 'inci örgü noktasının başlangıç noktası olduğu $(N+1) = (0)$ kabul edilir. Bir boyutlu CA için üç komşu bulunur. Bunlar incelenen hücrenin bir önceki zaman adımına göre kendisinin sağındaki ve solundaki hücrelerdir. İki boyutlu basit kare örgülü CA'larda iki farklı komşuluk bulunur. Bunlardan biri beş komşuluklu, diğeri ise dokuz komşuluklu CA olarak adlandırılır. Beş komşuluklu CA'larda komşu hücre olarak iki boyuttaki ifadesiyle hücrenin kendisi ve onun 3, 6, 9, 12 saat yönlerindeki en yakın hücreler kastedilmektedir. Dokuz komşuluklu CA'larda ise komşu hücreler olarak en yakın beş komşu hücrenin yanı sıra köşegenlerdeki komşu hücreler göz önüne alınmaktadır. İki boyutlu CA kuralında merkezdeki (i,j) hücresine ait a_{ij} değişkeninin bir sonraki zaman

adımında alacağı değer, bu değişkenin ona komşu hücrelerdeki değerlerine bağlı bir fonksiyon olarak ifade edilir. Örneğin beş komşuluklu CA'larda kurallar, aşağıdaki gibi en yakın komşu hücrelere bağlı bir fonksiyonu olarak yazılabilir;

$$a_{ij}^{t+1} = f(a_{ij}^t, a_{ij-1}^t, a_{ij+1}^t, a_{i-1j}^t, a_{i+1j}^t) \quad (2.36)$$

2.7. Creutz "Cellular Automaton"

Genel olarak örgüdeki her birimde n tane ikili bit bulunur. Her birimi değeri önceki zaman adımıdaki yakın komşuluklarla göre hesaplanır. Uygulama kuralı olarak her birimde bulunan n tane ikili bitin ilki Ising spinidir (B_i) ve alabileceği değerler 0 veya 1 olabilir. Örgünün Ising spin enerjisi veya iç enerjisi H_i aşağıdaki şekilde ifade edilir;

$$H_i = - \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \quad (2.37)$$

$S_i = 2B_i - 1$ olarak $\langle i, j \rangle$ her bir üniteadaki komşuluk toplamını ifade eder. Sonraki $n-2$ bit demonun momentum eşlenik değişkeni içindir. Bu $n-2$ bit tamsayı olarak $(0, N = \sum_{i=1}^{n-2} 2^{i-1})$ değerlerini alır. Kinetik enerji E_D demonların 4 katı alınarak bulunur;

$$E_D = 4(2^0 \times D_1 + 2^1 \times D_2 + \dots + 2^{n-3} \times D_{n-2}) \quad (2.38)$$

Kinetik enerji, bir spin değişiminde Ising enerjisinde oluşan ve değerleri 4'ün katları olan enerji değişimini karşılayabilmektedir. H_i örgünün Ising spin enerjisi H_k örgünün toplam kinetik enerjisini temsil ederek örgünün toplam enerjisi H ;

$$H = H_i + H_k \quad (2.39)$$

korunmaktadır. Toplam enerji için yazılabilecek sistem sıcaklığı T (J/k_B , k_B boltzmann sabitini ifade etmek üzere) bir demonun kinetik enerjisinin ortalama değeri ile hesaplanır;

$$\langle E_D \rangle = \frac{\sum_{m=0}^N (4m) e^{(-4m)/T}}{\sum_{m=0}^N e^{(-4m)/T}}$$

(2.40)

N'inci bit dama tahtası şeklinde yenilenmeyi sağlar. Bu sayede Ising modelin Cellular Automaton'da simülasyonu sağlanır. Dama tahtasındaki siyah bölgeler değişerek renkleri beyaza dönüşür. Beyaz bölgeler yenilenmeden siyaha dönüşür. Spinin yönü değişirse Ising enerji (H_i iç enerji) de değişir. Bu enerji değişimi momentum değişkeni tarafından ilgili birime iletilirse toplam enerji H korunur ve dönüşüm tamamlandığında momentum uygun olarak değişir. Aksi durumda ise spin ve momentumda bir değişiklik olmaz. İlk durumda bütün spinler yukarı (up) veya aşağı (down) durumundadır. Örgünün iç kinetik enerjisi beyaz birimlerdeki Momentum değişkenlerini oluşturan bitler kullanılarak bulunur. Simülasyonlar basit hiperkübik örgüler kullanılarak L^d ifadesinde d Boyut ve L örgüyü temsil etmek üzere; Q2R Cellular Automaton gibi tersine çevrilebilirdir. Q2R Cellular Automaton gibi ergodik değildir; ancak belirli bir toplam enerjide, ulaşılamayan olası spin konfigürasyonlarının etkisi sadece bilgisayar deneyleri ile anlaşılabilir. Modelin bilgisayar hesaplamalarındaki diğer özellikleri genel olarak;

- Dama tahtasının yenilenme sebebi ile örgünün çift katlı tam sayıları kullanılarak yapılır. $L=2, 4, 6, 8, 10, \dots$
- Kullanılacak örgü L^d demonların enerji seviyelerinin sayısını belirler. Bu da bize toplam enerjinin maksimum değerinden sonra simülasyon yapılmasını sınırlar. Örneğin 4 boyutlu Ising model için iki bitli demonlar uygun değildir. Çünkü 2 bitli demonun maksimum kinetik enerjisi J biriminde 12 olup bütün spinler aşağı durumdayken spinlerin dönüşümü için en az kinetik enerji 13 olmalıdır. O yüzden 4 boyutlu model simülasyonu için en az 3 bit demonlar gereklidir.
- Toplam enerji olması gerekenin çok altında bir değerde ise Creutz Cellular Automaton Ising modeli uygulanamaz.
- Demonun enerji seviyelerinin sayısı manyetizasyon ve iç enerji değerlerini etkilemez. Ancak manyetik alınganlık ve özısı (iç enerjideki dalgalanma) etkilenir [1].

2.8. Demon Enerjisinin Hesaplanması

Demon enerjisinin hesabı yapılırken bit sayısına dikkat edilmesi gerektiğini belirtmiştir [6]. Çünkü demon enerjisinin alacağı enerji değerleri bit sayısına bağlı olarak değişir. İki bitten oluşan demon (0'dan 3'e kadar) dört enerji seviyesine, üç bitten oluşan demon 0'dan 7'ye kadar sekiz enerji seviyesine, dört bitten oluşan demon 0'dan 15'e kadar onaltı enerji seviyesine, beş bitten oluşan demon 0'dan 31'e kadar otuz iki enerji seviyesine sahiptir. Bilgisayarda ikili sayı sistemi kullanıldığı için D_1, D_2, D_3 yalnızca 1 ve 0 değerlerini alabilir. 5 bitli demon'un olabileceği enerji düzeyleri Çizelge 2.1 de verilmiştir. ΔH_I Ising enerji değişiminin 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 aldığı görülmektedir.

Çizelge 2.1. Beş bitli demon'un enerji düzeyleri

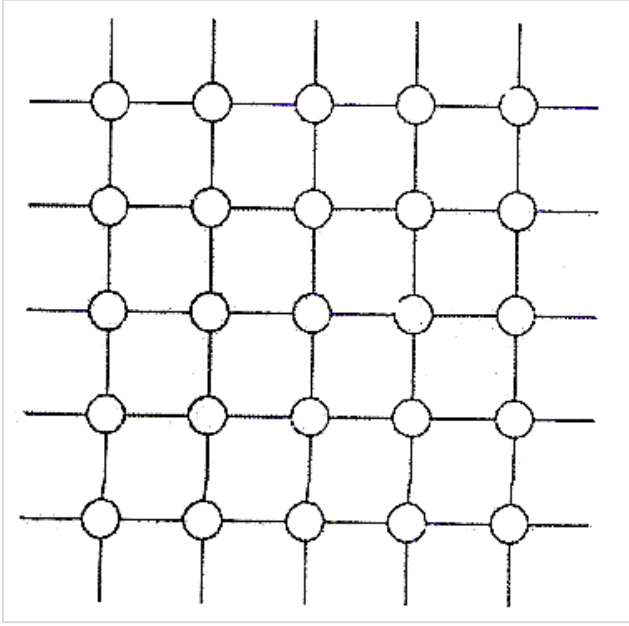
,	D_4	D_3	D_2	D_1	E_D
0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	1	1
0	0	0	1	0	2
0	0	0	1	1	3
0	0	1	0	0	4
0	0	1	0	1	5
0	0	1	1	0	6
0	0	1	1	1	7
0	1	0	0	1	8
0	1	0	0	0	9
0	1	0	1	0	10
0	1	0	1	1	11
0	1	1	0	0	12
0	1	1	0	1	13
0	1	1	1	0	14
0	1	1	1	1	15
1	0	0	0	0	16
1	0	0	0	1	17
1	0	0	1	0	18
1	0	0	1	1	19
1	0	1	0	0	20
1	0	1	0	1	21
1	0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

Benzer şekilde düşünürsek beş boyutlu uzayda ΔH_1 'ın 20, 16, 12, 8, 4, 0, -4, -8, -12, -16, -20 değerlerini alacağını ve bu enerjinin ise iki bitli demonlarla yeterli olmayacağı görülmektedir. Sonuç olarak dört boyut ve üzerindeki çalışmalarda demon sayısı ihtiyacı karşılayacak şekilde artırılmalıdır. Örnek olarak yedi boyut için simülasyonda beş bitli demonlar kullanılırsa $E_D = 4(2^0 \times D_1 + 2^1 \times D_2 + 2^2 \times D_3 + 2^3 \times D_4 + 2^4 \times D_5)$ ifadesine göre $4(1 + 2 + 4 + 8 + 16) = 124$ simülasyon kolaylıkla yapılabilir.

Demonların sayısal değeri 3 olursa alabileceği sayısal değerler 0 ile 7 arası olur. Demon enerjisi buna göre hesaplanırsa $(2^0 \times D_1 + 2^1 \times D_2 + 2^2 \times D_3) = (1 + 2 + 4) = 7$ olur. Bunun 4 katı $E_D = 4(2^0 \times D_1 + 2^1 \times D_2 + 2^2 \times D_3) = 28$ bize enerjiyi verir. Bilgisayarlardaki ikili sayı sistemi demon enerjisini hesaplanmasına benzer yapıdadır. Bir boyutlu uzayda bir birimin en yakın komşu sayısı 2, iki boyutlu uzayda 4, üç boyutlu uzayda 6, dört boyutlu uzayda 8, 5 boyutlu uzayda 10, 6 boyutlu uzayda 12 olmalıdır.

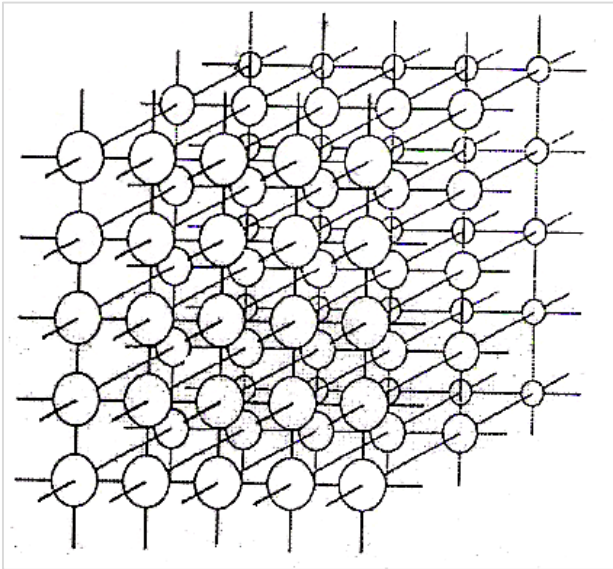
2.9. Hiperkübik Örgüler

Spin sistemlerinde spinlerin varolduğu bölgeler veya en azından birbirleri ile etkileşim halinde olabileceği bir yapı olmalıdır. Genellikle böyle bir sistemdeki spin etkileşimleri yoğun olarak en yakın komşuluk biçiminde olur. Belki de bu geometrik örgü yapısı dikey veya yatay eksenlerin basit birleşimi ile oluşturulabilir [27]. Örgü geometrisine en basit örnek kare örgüdür:

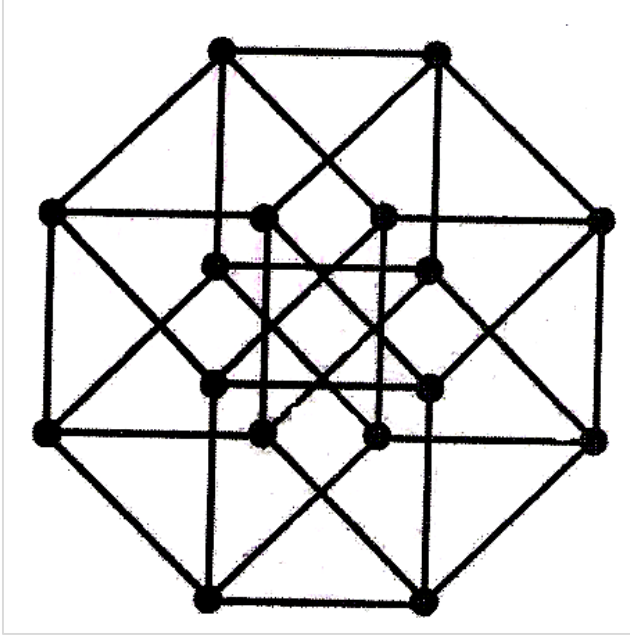


Şekil 2.2. 2 boyutlu örgü

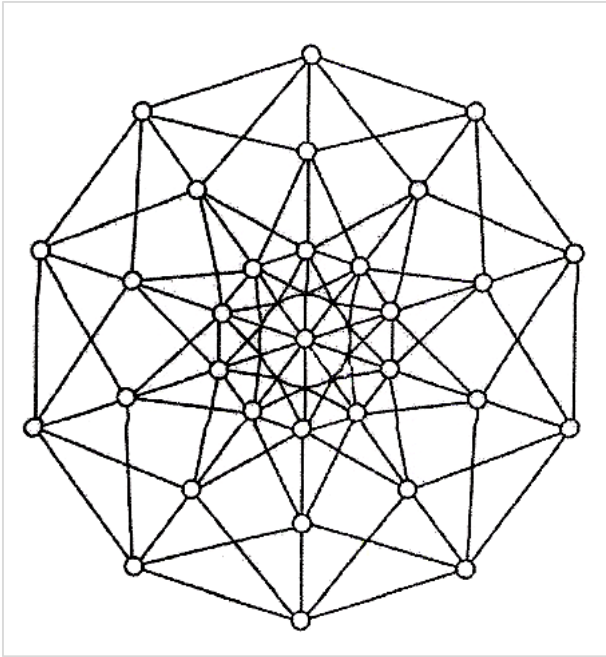
Bu görüntüyü üç boyutlu düşünürsek kübik örgü elde ederiz. 4 veya daha üstü boyutlar için kübik örgü gösterimleri hiperkübik örgüler olarak tanımlanır.



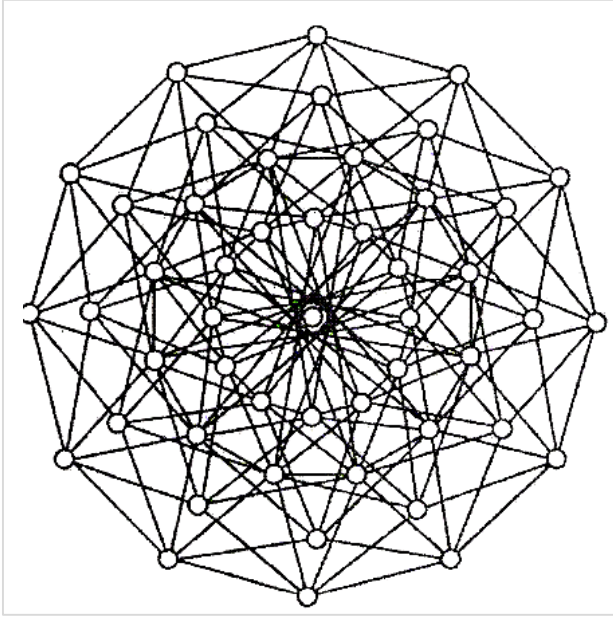
Şekil 2.3. 3 boyutlu örgü



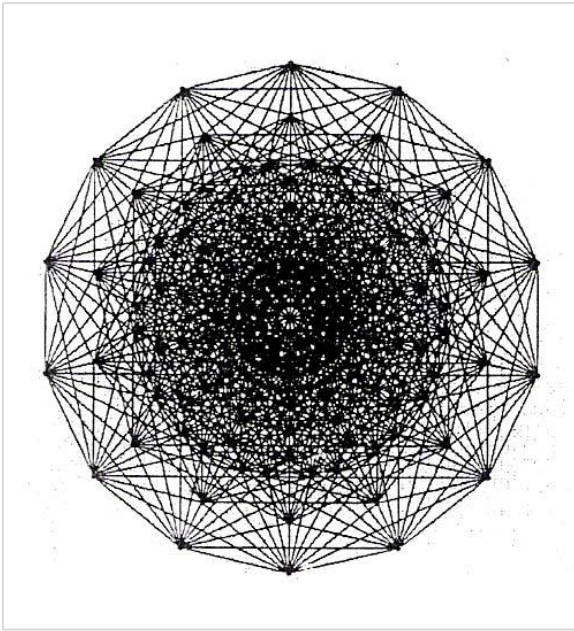
Şekil 2.4. 4 boyutlu hiperkübik örgü.



Şekil 2.5. 5 boyutlu hiperkübik örgü



Şekil 2.6. 6 boyutlu hiperkübik örgü



Şekil 2.7. 7 boyutlu hiperkübik örgü

Bal Peteği örgüsü ve elmas örgü olarak da adlandırılan (C atomları) üçgen örgü kübik örgü gösterimleri dışındaki örneklerdendir. Her bir spin tarafından işgal edilen her alan “birim” veya “site” olarak tanımlanabilir ancak her biriminde bir spinin bulunması gerekmez. Birbirine bağlı iki site veya birim örgü bağı olarak adlandırılır. Örgü geometrisinin karakteristik özelliklerinden biri, doğrudan bir siteye bağlı sitelerin sayısı yani

komşuluklarının sayısıdır. Koordinasyon sayısı olarak bilinen bu sayı genellikle tüm birimler için aynıdır

Çizelge 2.2. Boyutlara göre koordinasyon sayıları

Boyut	İsim	Koordinasyon sayısı
2	balpeteği	3
2	kare	4
2	üçgen	6
3	elmas	4
3	kübik	6
3	tetrahedral	12
4	hiperkübik	8

Birçok çalışmada spin sistemlerini içeren örgülerde tüm birimler spinler tarafından işgal edilmiş ve bütün örgü bağları enerji bağları olarak yorumlanmıştır. Böyle örgü veya Spin sistemlerini saf örgüler olarak adlandırabiliriz [27].

3. ARAŞTIRMA VE VERİLER

3.1. Serbest Enerjideki Sonlu Örgü Ölçekleme

Basit miknatıslardaki sıradan sürekli geçişler için iki ölçekleme durumu vardır. Bunlar sıcaklık g_t ve dış manyetik alana benzeyen g_h ifadeleri olup, üs değerleri de $\lambda_t = 1/\nu$ ve $\lambda_h = \Delta/\nu$ ile ifade edilir. Kritikliğe yaklaşılrken g_t ve g_h 'nin değerleri, $g_t \approx C_1 t$ ve $g_h \approx C_2 h$ olur. Burada C_1 ve C_2 sistemin özelliklerine bağlı parametreler olup, t ve h 'da indirgenmiş sıcaklık ve indirgenmiş manyetik alan değerleridir. Böylece $b \gg l$ uzaysal ölçekleme faktörüyle yapılan asimtotik bulk dönüşümü gösterilirse;

$$f_{\infty}^{(s)}(t, h) \approx b^{-d} \bar{f}_{\infty}^{(s)}(c_1 t b^{1/\nu}, c_2 h b^{\Delta/\nu}; 0, 0, \dots) \quad (3.1)$$

$\bar{f}_{\infty}(g_t, g_h, 0, 0, \dots)$ ifadesi tüm değişkenlerin eşit olduğu G (Ginzburg-Landau-Wilson) modelinin serbest enerjisini durumunu ifade eder. Burada herhangi bir değişkenin oluşumu ihmal edilmiştir. Böylece sonuçlar $d < 4$ ile sınırlanır. Periyodik sınır şartlı sonlu sistemler için alan teorisine dayanan hesaplamalar Brezin tarafından yapılmıştır. Sonlu bir sistemin enerjisinin “tekil” kısmının asimtotik davranışı tanım olarak;

$$f_{\infty}^{(s)}(t, h, L) \approx b^{-d} \bar{f}^{(s)}(c_1 t b^{1/\nu}, c_2 h b^{\Delta/\nu}, 0, 0, L/b). \quad (3.2)$$

dır. $\bar{f}^{(s)}$ 'nin L 'ye bağımlılığı, momentum değişkeni üzerinde uygun kızıl ötesi kesilme meydana getirir [33]. $b = L/l_0$ referans uzunluğu olarak seçilir. l_0 ; sisteme bağımlı $l_0 \gg \alpha_0$ şartını sağlayan keyfi seçilen bir sabittir. $L \gg l_0$ için

$$L^d f^{(s)}(t, h; L) \approx l_0^d \bar{f}^{(s)}(c_1 t L^{1/\nu}, c_2 h L^{\Delta/\nu}; 0, 0, \dots; l_0) \quad (3.3)$$

Yukarıdaki ifadede C_1 ve C_2 sonlu örgü metrik faktörleri sadece sistem parametrelerine bağımlıdır. Böylece “iki ölçek faktörlü evrensellik” kuramı veya “hyperuniversality” hipotezi adı verilen sonlu örgü formülü bu parametrelere bağlı olarak çıkarılabilir [33].

3.2. Düzen Parametresi İhtimaliyet Dağılımı

Belirsizliği yok etmek için ψ 'nin $(-\infty, +\infty)$ aralığında, sürekli skaler bir değişken olduğunu varsayalım. Olasılık yoğunluğu dağılımı ψ için $P_L(\Psi) \equiv P_L(\Psi, T, h)$ dir. Manyetizasyon veya diğer bir değişle mıknatıslanma, denge durumunda keskin pik gösterir ve mıknatıslanma civarında bu davranış Gaussian olarak adlandırılır [34,35].

$$P_L(\Psi) \propto \exp \left[-\frac{(\psi - M)^2}{2\chi} V \right] \quad (3.4)$$

ψ fonksiyonu için standart termodinamik kararsızlığının sonucunda $\propto \sqrt{\chi/V}$ genişliğinde, yaklaşık olarak mıknatıslanmaya eşit olduğu sonucuna ulaşılır. (3.4) denkleminin normalize edilmemiş olmasına dikkat edilmelidir.

$P_L(\Psi)$ pikleri $h \cong 0$ olduğunda iki değerde pik göstermelidir. ($M_{1,2} = M_{1,2}^{(b)} + \chi_{1,2}^{(b)} h + \dots$) M_1 ve M_2 mıknatıslanmalarında piklerin nasıl toplanacağına karar vermek açısından önemlidir. Temel görüşe göre üst üste binmiş (toplanmış) normalize pik bir tane olmalıdır [35]. Çünkü birlikte bulunan fazdan uzak kalmak için baskın pik normalize olmuş $P_L(\Psi)$ 'yi hesaba katar. Bu temel görüş eşdeğer sonuçlara yol açar. Diğer bir şekilde; $P_L(\Psi)$, kısıtlı sabit ψ temel durum serbest enerjisi için $p(\psi; L)$ ifadesinin bir sonucu olmalıdır [36].

$$P_L(\Psi) = \frac{e^{-V[p(\Psi; L) - h\Psi]}}{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-V[p(\Psi; L) - h\Psi]} d\Psi} \quad (3.5)$$

Bu denklem için genellikle $\psi = M$ olduğunda (3.4) deklemini $[P(\psi, L) - h\psi]$ 'nin alabileceği minimum değere ulaşılır.

$$P - h\psi \approx \frac{1}{2\chi} (\psi - M)^2 \quad (3.6)$$

Eğer $M_{1,2}^{(b)}$ 'nin olası en küçük iki tane değeri varsa, doğru yaklaşım olarak normalize edilmeden önce üstel olarak toplanmalıdır [36]. Bu tipik bir ortalama alan faktörüdür. Genellikle, $M_2^{(b)} < \psi < M_1^{(b)}$ durumunda $P(\psi L)$ değeri çok fazla etkiler için düzeltilmiştir [34]. Eğer $P(\psi L)$ 'in sonlu büyüklük parametrelerini oldukça küçük kabul ederek normalizasyon problemi aşılabılır. Normalize bir pik elde etmek için kesrin paydasına ψ yerine M yazarak;

$$P - h \approx \frac{1}{2\chi} (\psi - m)^2 - \frac{1}{2V} \ln \frac{V}{2\pi\chi}, \psi \cong M \quad (3.7)$$

dir. L^{-d} ve $L^{-d} \ln L$ değerleri serbest enerji miktarlarından farklı değildir. Böylece; P'nin çeşitli değerlerini minimum yapabilmek amacıyla, $M \cong M_{1,2}^{(b)}$, de normalize pikler yapılabilir;

$$|\Delta P_{\min}| = \left| \frac{1}{2V} \ln(\chi_2^{(b)} / \chi_1^{(B)}) \right| \quad (3.8)$$

3.3. Düzen Parametresi İhtimaliyet Dağılımı Fonksiyonları

Sonlu bir sistemde; bir faz geçişinin olmaması kendiliğinden kırılan simetrisinin sonlu sistemlerde görülememesine sebep olur. Bu nedenle tüm sıfırdan farklı sıcaklıklarda, manyetizasyonun kırılma alanlarının termal ortalaması aynı şekilde sıfırdır [37].

$$\langle M \rangle_{T,L} \equiv 0 \quad (3.9)$$

$$\langle |M| \rangle_{T_c} \propto L - \beta_c \quad (3.10)$$

Şüphesiz eşitlik (3.9) ve eşitlik (3.10) arasında, eşitlik (3.10)'da ifade edilen şartlara göre bir çelişki yoktur. $\langle M \rangle_{T,L}$ değerinin sadeleşmesi manyetizasyonun her iki işaretinde aynı şekilde kullanılabilmesini mümkün kılar. Bu hem T_c 'nin altındaki hem üstündeki iki değer için doğrudur. Her iki durumda da L^d hacminin sonlu küp değerinde, M manyetizasyonunun $P_L(M)$ olasılık dağılımı, (Şekil 3.1'de) $M=0$ civarında simetrik olmalıdır. Bununla birlikte T değeri $T < T_c$ 'den $T > T_c$ 'ye kadar yükseltildiğinde $P_L(M)$ değerinde değişiklik

gözlenmelidir. $P_L(M)$ olasılık dağılım fonsiyonu bir Ising modeli için doğru sonuçlarla çift pik içeren bir şekil oluşturmaktadır. Bu piklerin mıknatıslanma değerleri $(\pm M_{s,p})$ civarında bulunur. Bu piklerin yakınında $P_L(M)$ fonsiyonu, iki gauss ifadesiyle yazılabilmelidir;

$$P_L(M) \approx \exp\left[-\frac{(m - M_{sp})^2 L^d}{2k_B T \chi^t}\right] + \exp\left[-\frac{(m + M_{sp})^2 L^d}{2k_B T \chi^t}\right] \quad (3.11)$$

$$\chi' = (L^d / k_B T) (\langle m^2 \rangle_T - \langle m \rangle_T^2) \approx |T - T_c(\infty)| - \gamma \quad (3.12)$$

Burada χ , T_c 'nin alt bölgesi için var olan duyarlılıktır ve L sonsuza yaklaşırken denklem (3.12)'de tanımlanan eşitliğe denk gelmektedir. T sıcaklığı T_c sıcaklığına doğru yöneldiği zaman, denklem (3.11) tarafından iki pik birbirine doğru hareket etmelidir. Çünkü $M_{SP \rightarrow 0}$, olur. Bu elde edilen değer T_c sıcaklığına çok yakın ise ve ξ değerinin L büyüklüğüne ulaşır. Pikler, sıfırdan farklı kritik dağılım için kaybolur. Sıfır manyetizasyon sonuçları $T \gg T_c$ civarında tek pik oluşturmaktadır;

$$P_L(M) \sim \exp\left[-\frac{(m - M_{sp})^2 L^d}{2k_B T \chi^t}\right], T > T_c (L \gg \xi) \quad (3.13)$$

T_c 'nin üst bölgesi için χ duyarlılığı termodinamik kararsızlık (değişim) bağıntısında yerine yazılırsa;

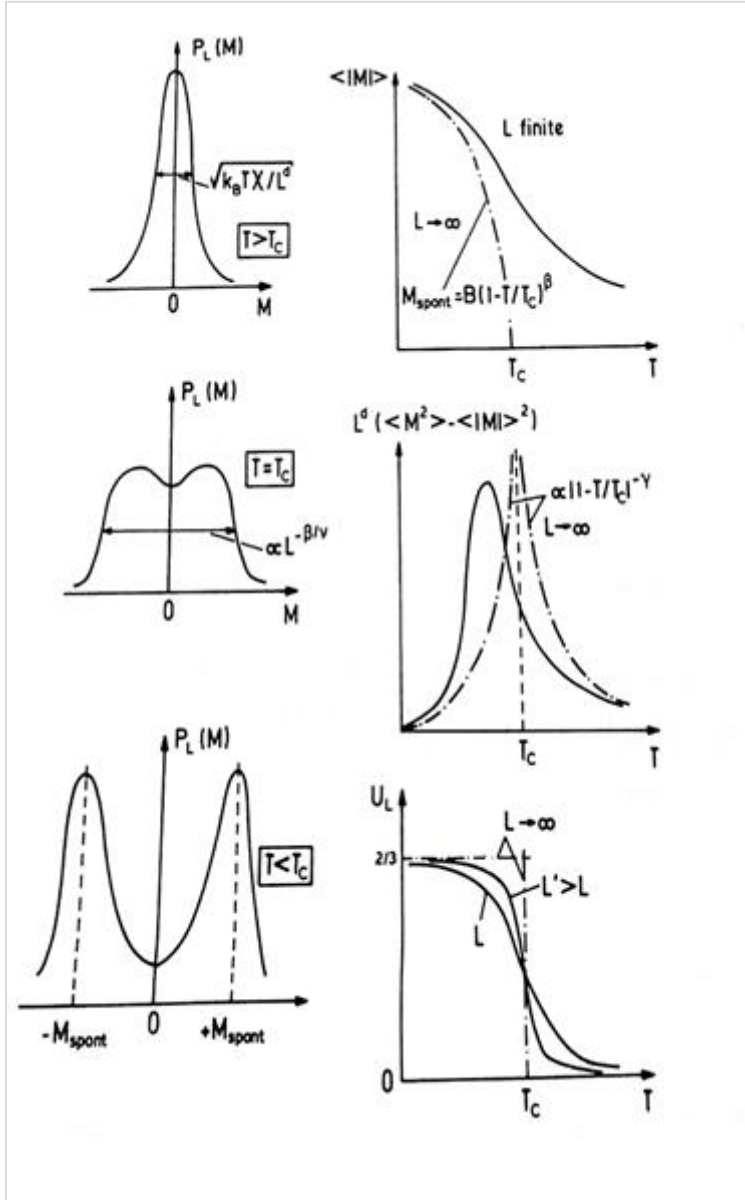
$$\chi = (L^d / k_B T) (\langle m^2 \rangle_T - \langle m \rangle_T^2) \quad (3.14)$$

Elde edilir. Kırılma alanları simetrisinin bulunmaması durumunda, denklem (3.14)'nin benzeri olan, denklem (3.9)'u kullanabiliriz.

$$\chi = (L^d / k_B T) (\langle m^2 \rangle_T) . \quad (3.15)$$

Eğer izinli bir kırılma-alanı simetrisi sıfıra gitmeden önce termodinamik limit alınmak istenirse, denklem (3.14)'te açıklanan duyarlılık denklemi (3.12)'de $T < T_c$ için tanımlanan

χ azalır. Ancak, T sıcaklığı T_c 'ye doğru azaldığında, denklem (3.15)'deki duyarlık düzenli artan bir fonksiyona dönüşür. $T < T_c$ ve $L \gg \xi$ değerlerinde bu, temel olarak $\chi \approx (L^d/k_B T) M_{sp}^2$ şeklinde yer alır. Başka bir deyişle, eğer denklem (3.12)'deki χ' T_c değeri üstünde bir değerse, $L \gg \xi$ için $\chi' \approx \chi(1 - 2\pi)$ denklemini sağlar. Böylece χ' , χ 'de olduğu gibi aynı γ katsayısına (üs kuvvetine) ıraksar. Fakat titreşim genliği bir $1-2/\pi$ faktörü tarafından azaltılır [38, 39]. Bu yüzden bilgisayar ile yapılan simülasyonlarda, T_c değeri üzerindeki (denklem (3.15)'de tanımlanan) χ ve T_c 'nin altında tanımlanan (denklem (3.12)) χ' duyarlılıkları için farklı tanımlamalar kullanmamız gerekir. Yarı kararlılık etkileri sebebiyle, başlangıçtaki duruma bağlı olarak denklem (3.9) yerine düşük sıcaklıklarda çoğunlukla $\langle m \rangle_T = M_{sp}$ veya $\langle m \rangle_T = -M_{sp}$ tanımlamaları yararlı olur. Ergodik olmayan davranışların gözlemlenmesi konusunda, simülasyon gözlem süresi M_{sp} 'den $-M_{sp}$ 'ye veya tam tersine geçiş yapmak için denklem (3.14), denklem (3.12) ile aynı sonuçlar vermelidir. Buna rağmen ergodik işlemler ve gözlem süresi uyduğunda sıcaklık için, denklem (3.14)'te tanımlanan χ gerçekleşmiş gibi bir yanılsama ortaya çıkarır.



Şekil 3.1. Düzen parametresinin olasılık dağılımının $P_L(M)$ şematik değişimi

Şekil 3.1 de $[T < T_c$ 'den $T > T_c$ 'ye (sol tarafta)] ortalama düzen parametresinin sıcaklıkla ilişkisi, düzen parametresi duyarlılığı $k_b T_X = L^d (<m^2> - <|m|^2>)$ ve azaltılmış düzenin dördüncü boyutu $U_L = 1 - <m^4>_L / (3 <m^2>^2)$ sergilenmiştir. Kesikli çizgi ile temsil edilen eğriler, $L \rightarrow \infty$ termodinamik limitindeki sonuçların değişebildiğini gösterir. Bu nicelikler, gözlem süresi ve kullanılacak olan model için Monte Carlo algoritması tarafından gerekli parametrelerin her ikisine de bağlıdır ve düzenli faz sistemi içerisinde oldukça derin kritik bölgede görülmez. L değerinin ξ 'den çok çok büyük olduğu düzeylerde, T_c civarında $P_L(M)$ 'nin davranışı formül olarak yazılırsa;

$$P_L(m) = L^y P'(mL^y, L/\xi) y = \beta/v. \quad (3.16)$$

Burada P' ifadesi ölçeklendirilmiş fonksiyondur ve denklem (3.16)'nın önceki ölçeklendirilmiş L^y ifadesi için gereklidir $\int_{-\infty}^{+\infty} P_L(m) dm = 1$ bağıntısıyla normalize edilmiştir.

Başlangıç anını göz önünde bulundurursak y 'nin değeri sabit olur (P' 'nin M 'ye eşit olduğuna dikkat ediniz ve bu m $L^y = \delta$ şeklinde adlandırılır).

$$\langle |m| \rangle_{T,L} = L^{-y} \int_{-\infty}^{+\infty} d\delta |\delta| \dot{P}(\delta L/\xi) = L^{-y} \dot{m}(L/\xi) \quad (3.17)$$

3.4. Düzen Parametresi İhtimaliyet Dağılımında Kullanılan Sonlu Örgü Ölçekleme Bağıntısı

Ising modelinde düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı için sonlu örgü ölçekleme hipotezi, dış manyetik alan yok iken, genel olarak şöyle ifade edilebilir [40-43];

$$P_L(M, t) = a(L) p(Ma(L), TB(L)), t \rightarrow 0, L \rightarrow \infty \quad (3.18)$$

Bu ifadede M düzen parametresi, $t = (T - T_c)/T_c$ 'de, T_c sonsuz örgünün sahip olduğu kritik sıcaklık olmak üzere, indirgenmiş sıcaklığı tanımlar. $a(L)$ ve $b(L)$ değerlerinin L 'ye bağımlılığı, $|M_L(t)|$ için sonlu örgü ölçekleme bağıntısı aşağıda verilen tanım ile birlikte kullanılarak hesaplanabilir.

$$|M_L(t)| = \int_{-\infty}^{\infty} P_L(M, t) |M| dM \quad (3.19)$$

$|M_L(t)|$ için sonlu örgü ölçekleme bağıntıları $d < 4$, $d = 4$ ve $d > 4$ 'de birbirinden farklıdır. $d > 4$ 'te sonlu örgü ölçekleme bağıntısı aşağıda verilmektedir [37, 44].

$$f_L^{(S)}(t, h) = L^{-d} Y(C_1 t L^{d/2}, C_2 h L^{3d/4}), \quad t \rightarrow 0, h \rightarrow 0, L \rightarrow \infty \quad (3.20)$$

düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı için türetilen sonlu örgü ölçekleme bağıntısı aşağıda verilmektedir [40].

$$P_L(M,t) = C_2^{-1} L^{d/4} p(MC_2^{-1} L^{d/4}, tC_1 L^{d/2}), \quad t \rightarrow 0, L \rightarrow \infty \quad (3.21)$$

bu, düzen parametresi dağılımı için sonlu örgü ölçekleme fonksiyonunun, $p(m, x)$, analitik olarak bilindiği durum olup, $p(m, x)$ ortalama alana uygun yapıdadır [40, 43].

3.5. Düzen Parametresi Olasılık Dağılımının Sonlu Örgü Ölçekleme Fonksiyonu ile Kritik Noktadaki Analitik İfadesi

$d=7$ 'de sonlu örgü ölçekleme fonksiyonunun ardışık normalleştirilmesinin kullanıldığı ortalama alan seviyesinde başka bir deyişle önemi en fazla olan logaritmali terimleri içerecek doğrulukta kritik noktadaki analitik ifadesi aşağıda verilmektedir [45-48];

$$p(m,0) = p_0 \exp(-(Am^2 + Bm^4)). \quad (3.22)$$

Bu ifade, $d>4$ 'de olduğu gibi ortalama alana uygun yapıdadır [49, 2, 50, 51, 52]. P_0 , A ve B birer sabit olup, analitik fonksiyon karşılığı olan sayısal fonksiyona uydurularak değerleri belirlenebilir [43]. Sayısal fonksiyon ise doğrusal boyutu yeterince büyük örgülerdeki simülasyonlar ve düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı için sonlu örgü ölçekleme bağıntısı kullanılarak elde edilebilir.

$$p(m,0) = p_0 \exp(-(Am^2 + Bm^4 + CL^{-2}m^6)) \quad (3.23)$$

Bu ifadede A , B ve C sayısal fonksiyona uydurularak değerleri belirlenecek olan parametreler olup m ölçeklenmiş miknatıslanmayı ifade eder. (3.22) nin yeniden düzenlenmiş hali;

$$p(m,0) = p(m_0,0) \exp(-((m^2 / m_0^2) - 1)^2 (a(m^2 / m_0^2) + c)) \quad (3.24)$$

dir ve m_0 , $p(m,0)$ 'ın en büyük değer olan $p(m_0,0)$ 'a eşit olduğu değer m 'nin alabileceği en olası değerdir. a ve c 'nin değerleri ölçeklenmenin gerçekleştiği durumlarda düzenlidir. $a=0$ olduğunda $p(m,0)$ ortalama alana uygun bir yapıya sahip olur. $p(m,0)$ 'ın bu haliyle L 'ye nasıl bağlı olduğunu ve C 'nin belirlenmesi için aşağıdaki denkleme ihtiyaç vardır;

$$CL^{-2} = am_0^{-6} \quad (3.25)$$

Bu işlemlerin doğruluğunun ispatı Eşitlik 3.13 ile yapılmış olup, yöntem olarak Creutz CA simülasyonu uygulanmıştır.

Eşitlik (3.11) ifadesine uygun şekilde eşitlik (3.23) düzenlenirse;

$$p(m,0) = -((m^2 - m_0^2) - 1)^2 (a(m^2 / m_0^2) + c)) \quad (3.26)$$

$$p(m,0) = (m^2 - m_0^2)(a \frac{m^2}{m_0^2} + c^2) \quad (3.27)$$

düzenlemeler yapıldığında;

$$p(m,0) = -(m^4 - 2m^2m_0^2 + m_0^4)(a \frac{m^2}{m_0^2} + c^2) \quad (3.28)$$

$$p(m,0) = (-m^4 + 2m^2m_0^2 - m_0^4)(a \frac{m^2}{m_0^2} + c^2) \quad (3.29)$$

$$p(m,0) = -a \frac{m^6}{m_0^2} - cm^4 + 2m^4 + 2cm^2m_0^2 - am^2m_0^2 - cm_0^4 \quad (3.30)$$

$$p(m,0) = -cm^4 + 2m^4 + 2cm^2m_0^2 - am^2m_0^2 - cm_0^4 - a \frac{m^6}{m_0^2} \quad (3.31)$$

$$p(m,0) = -[cm^4 - 2m^4 - 2cm^2m_0^2 + am^2m_0^2 + cm_0^4 + a \frac{m^6}{m_0^2}] \quad (3.32)$$

$$p(m,0) = -[(2cm_0^2 + am_0^2)m^2 + (c - 2)m^4 + cm_0^4 + a \frac{m^6}{m_0^2}] \quad (3.33)$$

dir. Denklem (3.32) m^6 ile çarpılır ve bölünürse;

$$p(m,0) = -[(2cm_0^2 + am_0^2)m^2 + (c-2)m^4 + (c\frac{m_0^4}{m^6} + \frac{a}{m_0^2})m^6] \quad (3.34)$$

elde edilir. Eşitlik (3.22) ile eşitlik (3.33) kıyaslamasında eşitlik (3.33) ifadesinde m^2 parantezine alınan ifade A'yı, m^4 parantezine alınan ifade B'yi ve m^6 parantezine alınan ifadede de bize CL^{-2} 'yi verir.

$d > 4$ için sonlu örgü ölçekleme fonksiyonu eşitlik (3.22)'den görüldüğü üzere m^6 veya C'li ifade olmadığı için m^6 parantez içi sıfır olmalıdır, yani;

$$p(m,0) = (c\frac{m_0^4}{m^6} + \frac{a}{m_0^2})m^6 = 0 \quad (3.35)$$

$$c = -a\frac{m^6}{m_0^6} \quad (3.36)$$

denklem (3.36) denklem (3.34)'te yerine yazılırsa;

$$p(m,0) = -[(2a\frac{m^6}{m_0^4} + am_0^2)m^2 + (-a\frac{m^6}{m_0^6} - 2)m^4] \quad (3.37)$$

buradan

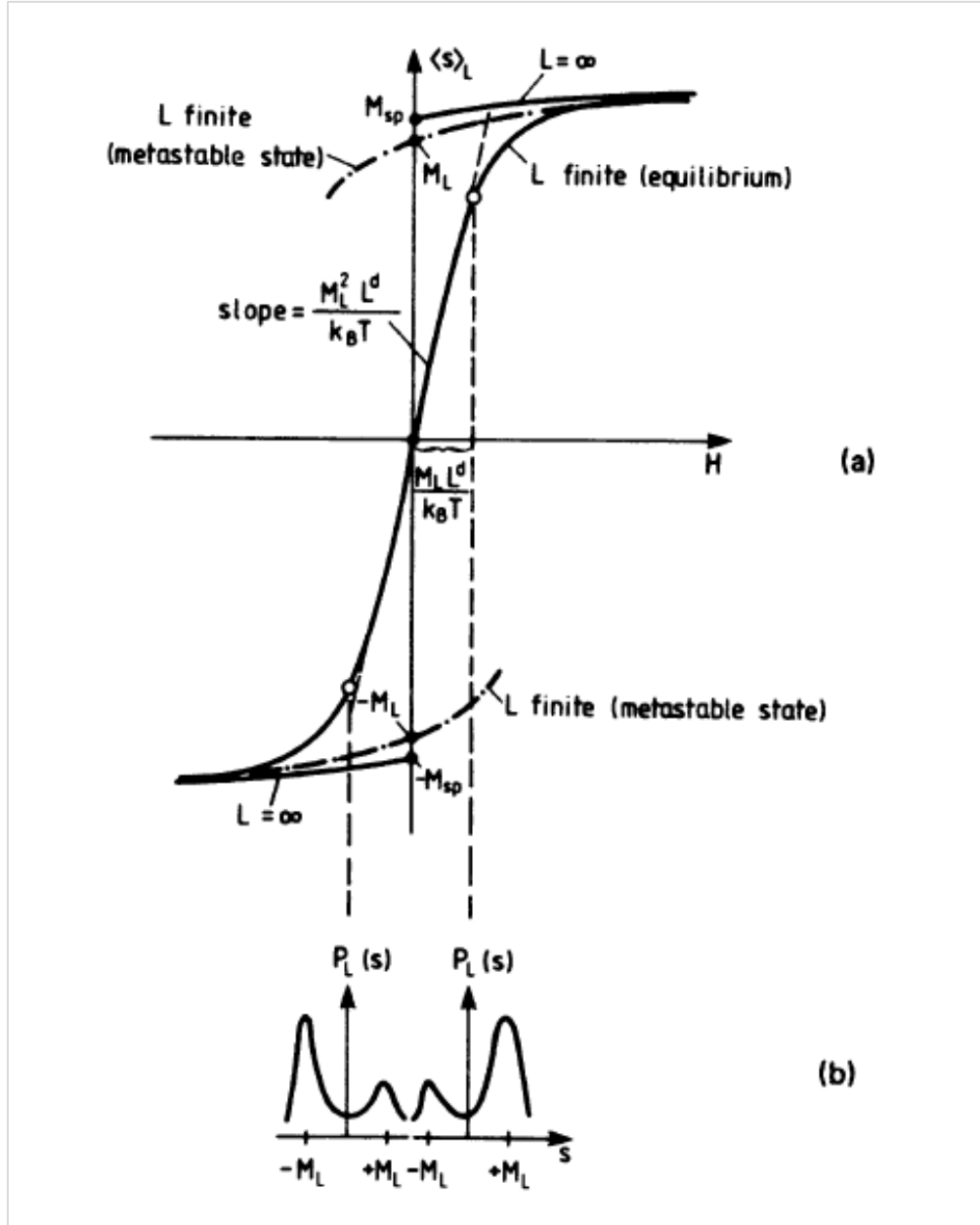
$$A = (2a\frac{m^6}{m_0^4} + am_0^2) \quad (3.38)$$

$$B = (-a\frac{m^6}{m_0^6} - 2) \quad (3.39)$$

bulunur.

3.6. Monte Carlo çalışmalarıda Birinci ve İkinci Dereceden Faz Dönüşümlerinin Sonlu Örgü Etkileri

Monte carlo spin simülasyon sistemleri sonlu örgü ölçeklemenin çeşitli alanlarında test amaçlı kullanılmaktadır. Ayrıca sonlu örgü ölçekleme teorisi simülasyonla elde edilen verilerin yorumlanmasında önemli bir yere sahiptir. Teori ve simülasyon arasında köprü oluşturan bu yöntem bilinmeyen düzenlerde sistemlerin incelemesini sağlayan en etkili örnektir. Simülasyonda termodinamik limitte dönüşüm düzeninden bağımsız olarak uygun sonuçlar elde edilebilir. Serbest enerjinin türevlerinin tekillikleri örnek boyutu N sonsuz olduğunda elde edilebilir. İkinci derece sonlu örgü etkileri dönüşümü sonsuz örgü kritik örneklerinin örgü boyutuna bağlı olarak uzun süredir araştırılmaktadır. Araştırma sonucundaki fikirler bir noktada birleşmiş olup örneğin çizgisel boyutu sonsuza gittikçe L^d fonksiyonlarda çeşitlilik gösterir. Bu sonuçlar birinci derece için geçerlidir. Ising ferromanyetik manyetik alan içinde ise H kritik sıcaklığın altındaki sıcaklıklarda çeşitlilik gösterir. Parçacık başına manyetizasyon $\langle s \rangle$ sonsuz bir sistemde $+M_{sp}$ nin değeri $H \rightarrow 0^+$ ve $-M_{sp}$ $H \rightarrow 0^-$ olarak değişir. Sonlu örgü manyetizasyonunun davranışı $\langle S \rangle_L$ ve H sonlu bir L için beklentilere uygundur. Şekilde gösterildiği gibi dönüşüm $|H| = k_B T / M_{sp} L^d$ ve alınganlığın $\chi_L = \partial \langle s \rangle_L / \partial H$ sonsuz olduğu bölgede $M_{sp}^2 L^d / k_B T$ düzeninde yuvarlanmış bölgede gözlenebilir.



Şekil 3.2. (a) Sonlu $L \times L$ Ising ferromagnetinin manyetizasyonu $\langle s \rangle$ ve sonsuz Ising ferromanyetik grafiğinin manyetik alanla karşılaştırması. Noktalı çizgiler Monte Carlo simülasyonunda kısa sürede oluşan dallanmayı gösterir. $\pm M_{sp}$ sonsuz sistemin doğal manyetizasyonu, $\pm M_L$ $t=0$ da sonlu sistemin manyetizasyonun en olası değerini gösterir. (b) iki bölge için manyetizasyonun olasılık dağılım değerlerine karşılık gelen grafiği gösterir [37].

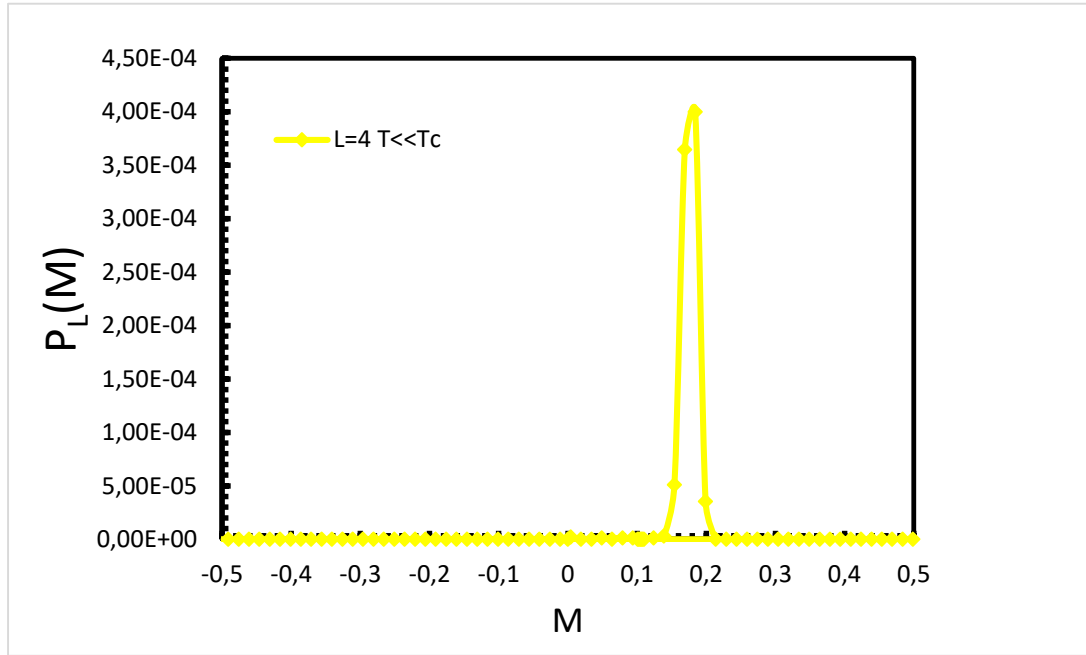
Şekilde gösterilen δ -Fonksiyon tekilliği $L = \infty$ için gözlenebilir ve ikinci derece dönüşümündeki sonlu örgü davranışına benzerlik göstermektedir. İki durumda da χ_L çizgileri büyür ve örgü sonsuza giderken keskinleşir. Örgünün sonlu boyutu pik civarında değişim gösterir ancak Ising modelde spin çevirme simetrisinden dolayı dönüşüm

bölgesinde böyle bir durum gözlenmez. Böylece Monte Carlo simülasyonları birinci derece faz değişimlerinin kullanarak sonlu örgüye etkilerini incelemiş oluruz.

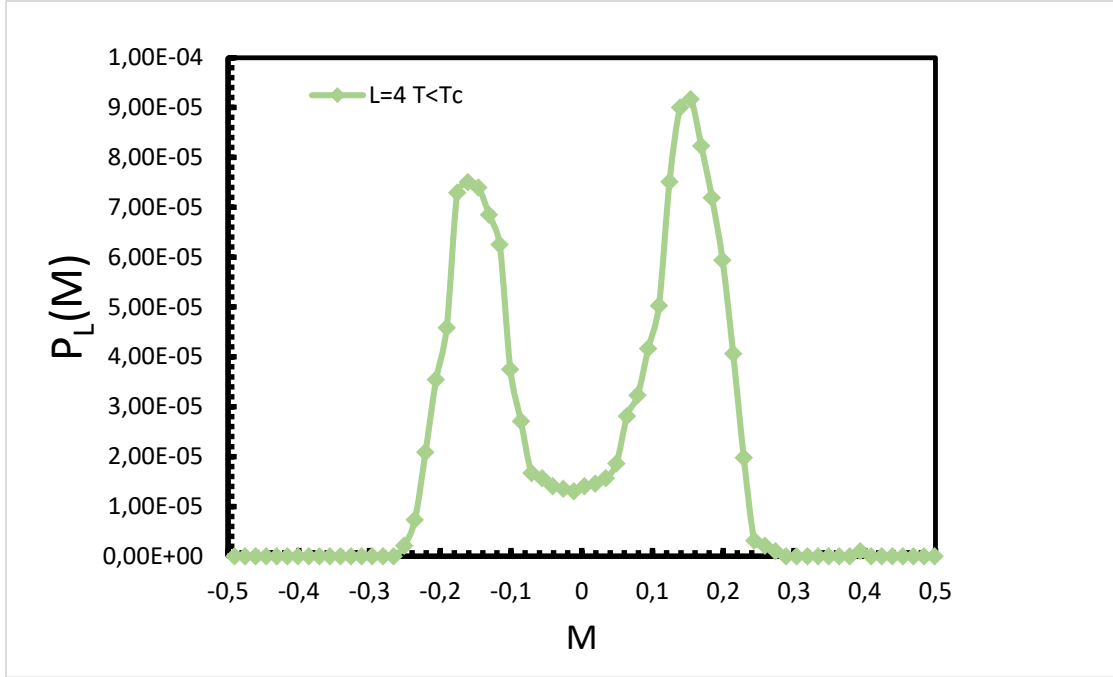
4. SONUÇ

Yedi boyutlu ising modelinde boyutu $L=4,6,8$ olan periyodik sınır şartlı örgülerde ve sonlu örgü kritik sıcaklık için beş “bit”li demonlar kullanılarak CCA ile simülasyonlar yapılmıştır. $L=4, 6, 8$ örgülerde enerji değerleri için tek simülasyonda 60000 adımda her bir örgü için farklı limitlerde 21 bağımsız simülasyon yapılarak sonuçların ortalamaları alınmıştır.

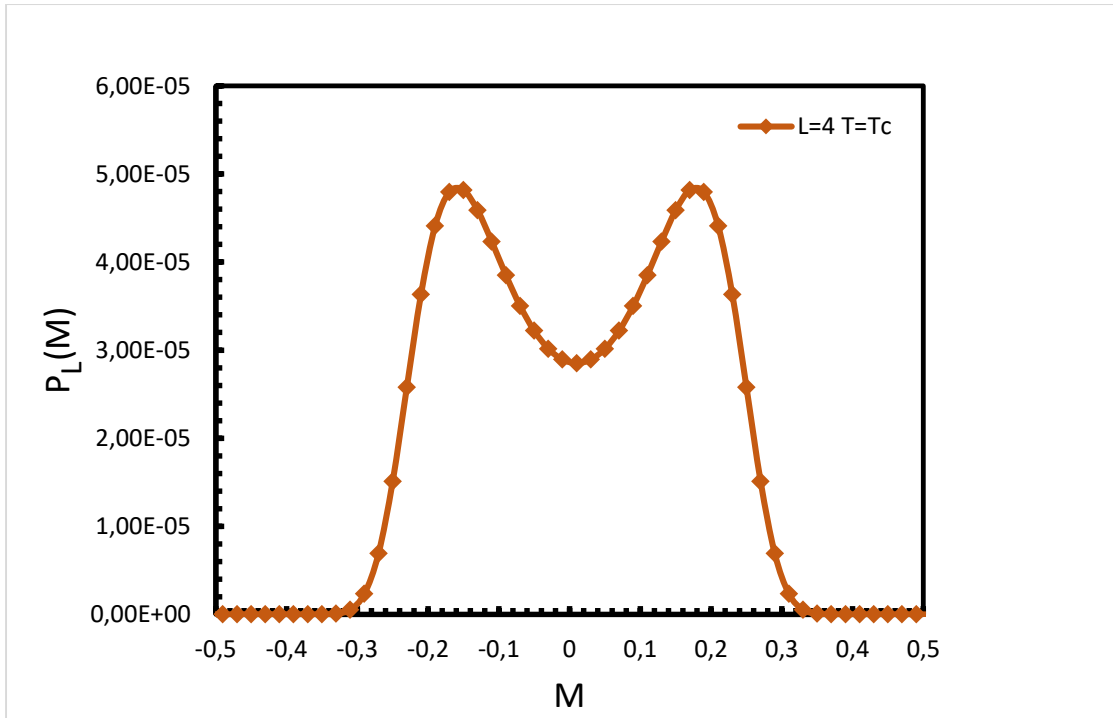
$L=4, 6, 8$ örgüler için $T \gg T_c$, $T > T_c$, $T = T_c$, $T < T_c$, $T \ll T_c$ sıcaklık değerlerinin düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının ($P_L(M)$), düzen parametresine (M) karşı grafikleri çizilmiştir (Şekil 4.1- Şekil 4.21). Çizilen grafiklerin literatürdeki grafiklerle uyumlu olduğu görülmüştür [37]



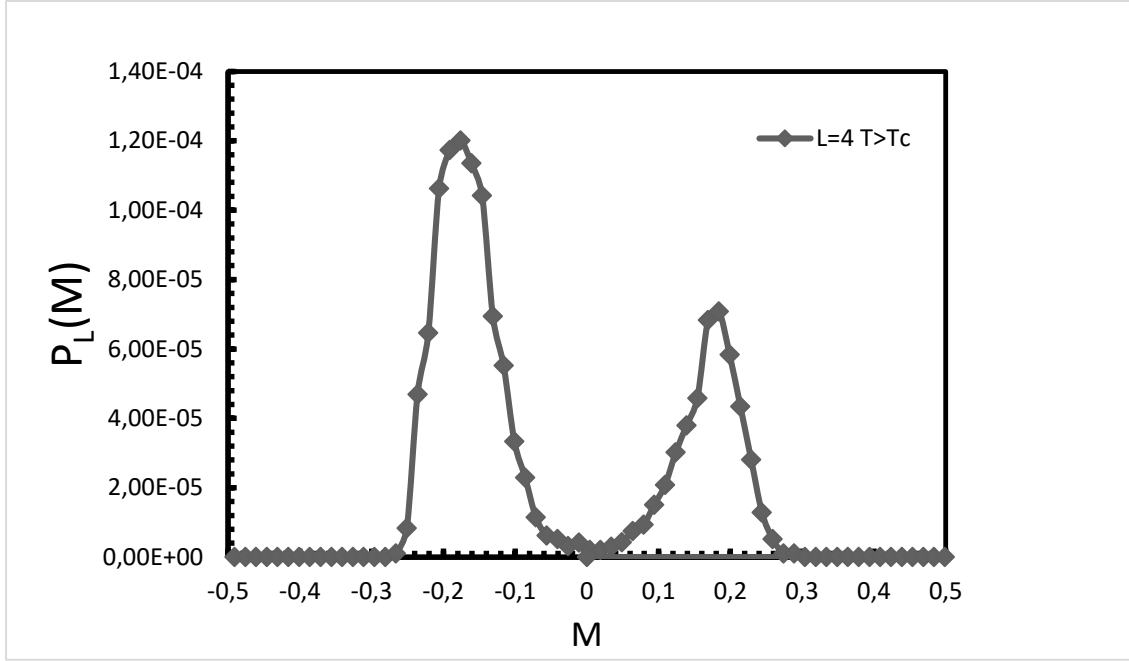
Şekil 4.1. $L=4$ örgüsü için $T \ll T_c$ de düzen parametresinin ihtimaliyet dağılımının değişimi



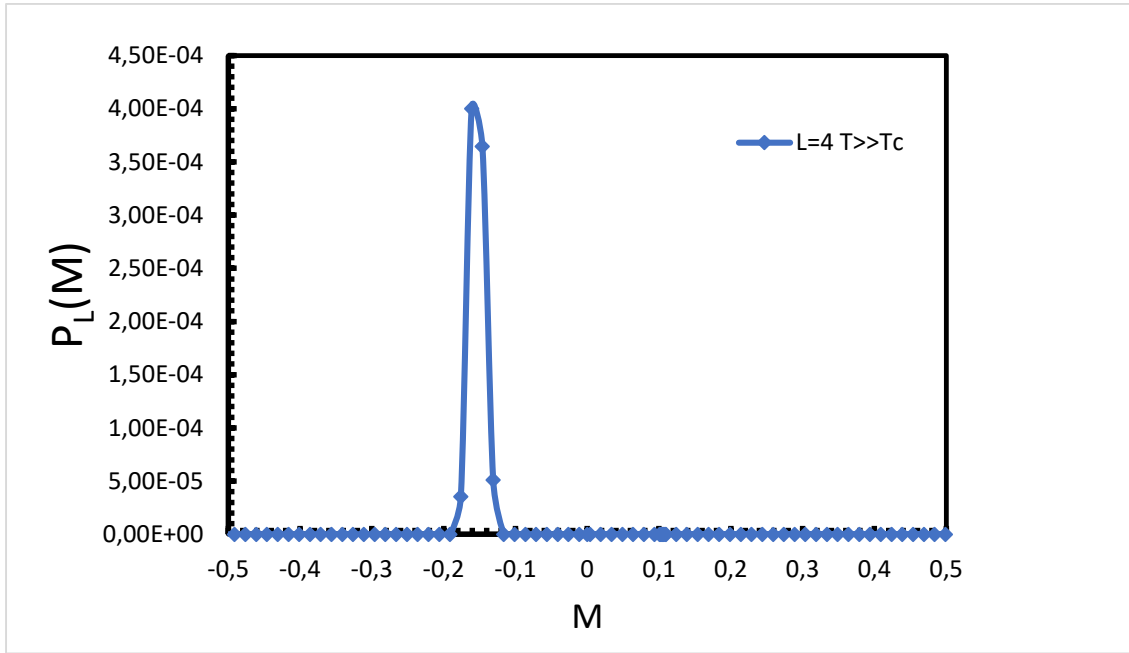
Şekil 4.2. $L=4$ $T < T_c$ örgüsü için düzen parametresinin ihtimaliyet dağılımının değişimi



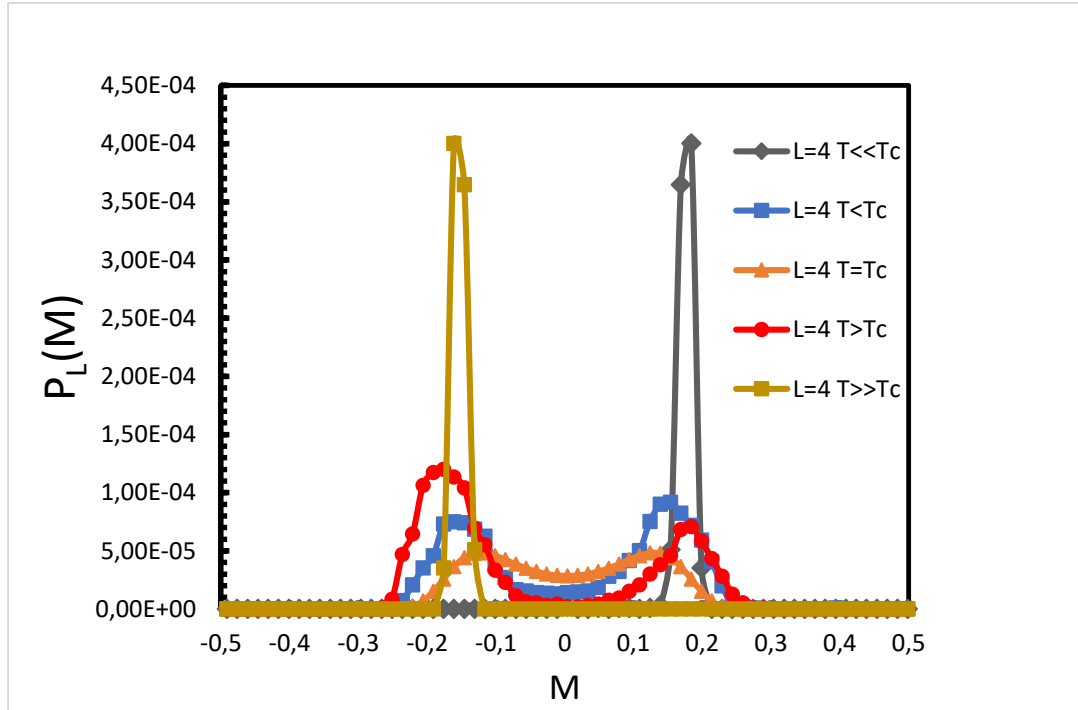
Şekil 4.3. $L=4$ $T = T_c$ örgüsü için düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının değişimi



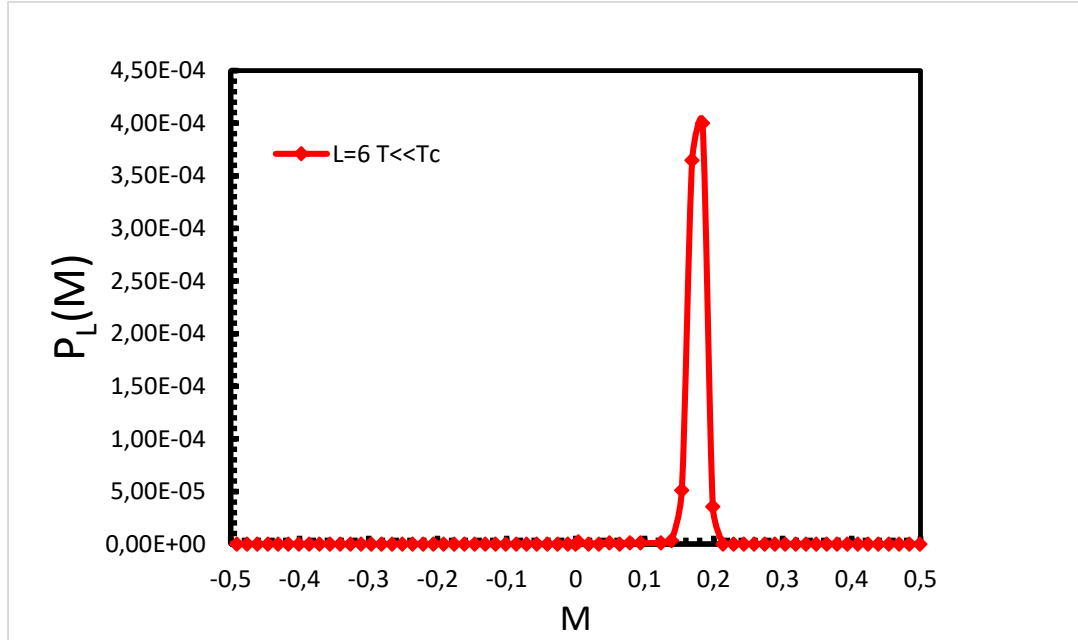
Şekil 4.4. $L=4$ $T > T_c$ örgüsü için düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının değişimi



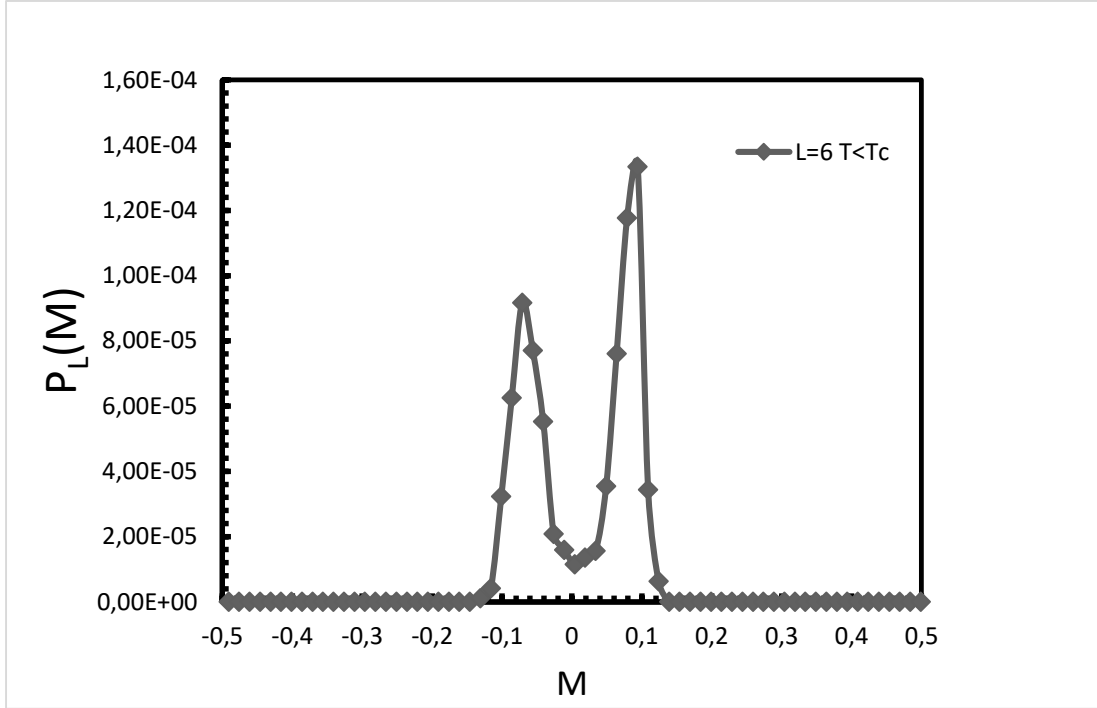
Şekil 4.5. $L=4$ $T \gg T_c$ örgüsü için düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının değişimi



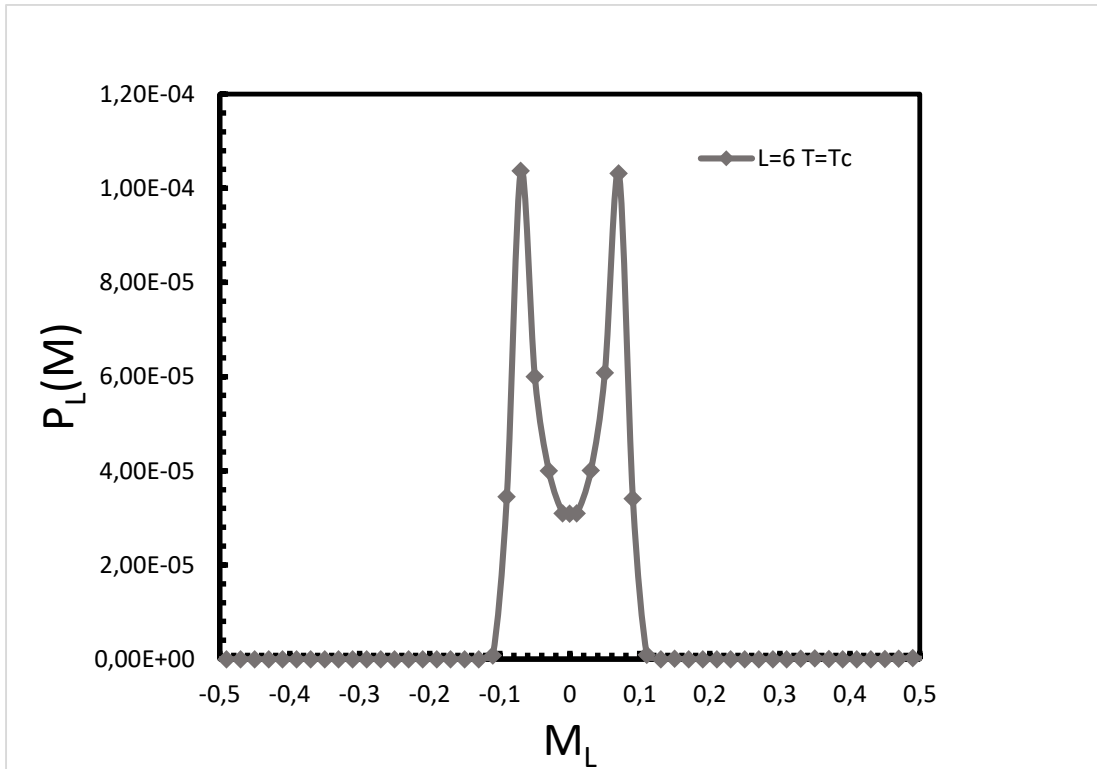
Şekil 4.6. $L=4$ örgüsü için $T \ll T_c$, $T < T_c$, $T = T_c$, $T > T_c$, $T \gg T_c$ 'de düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının karşılaştırması



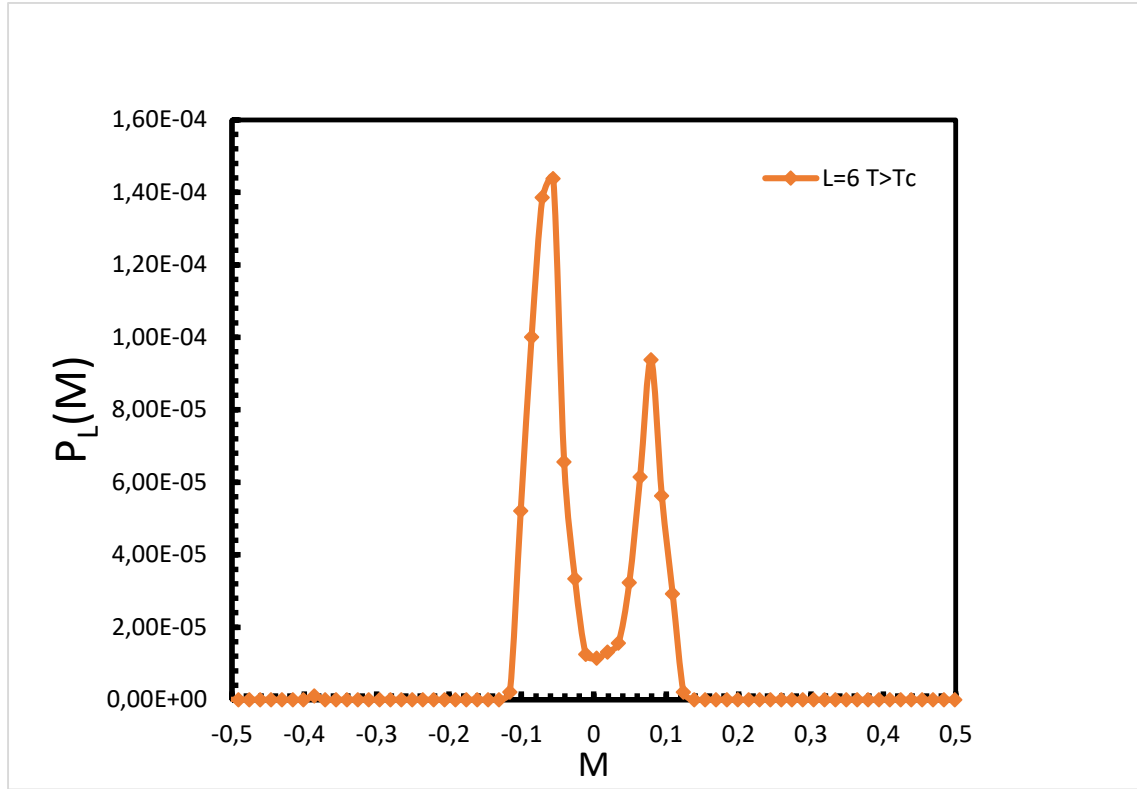
Şekil 4.7. $L=6$ $T \ll T_c$ örgüsü için düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı değişimi



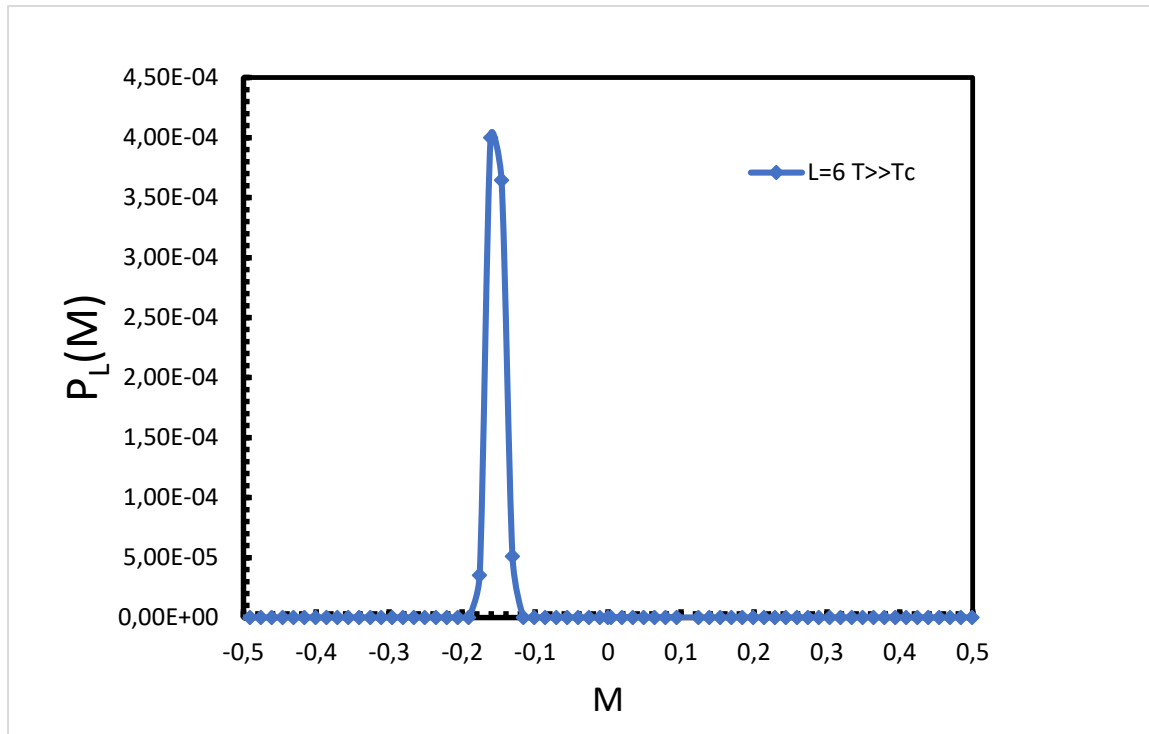
Şekil 4.8. $L=6$ $T < T_c$ örgüsü için düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı değişimi



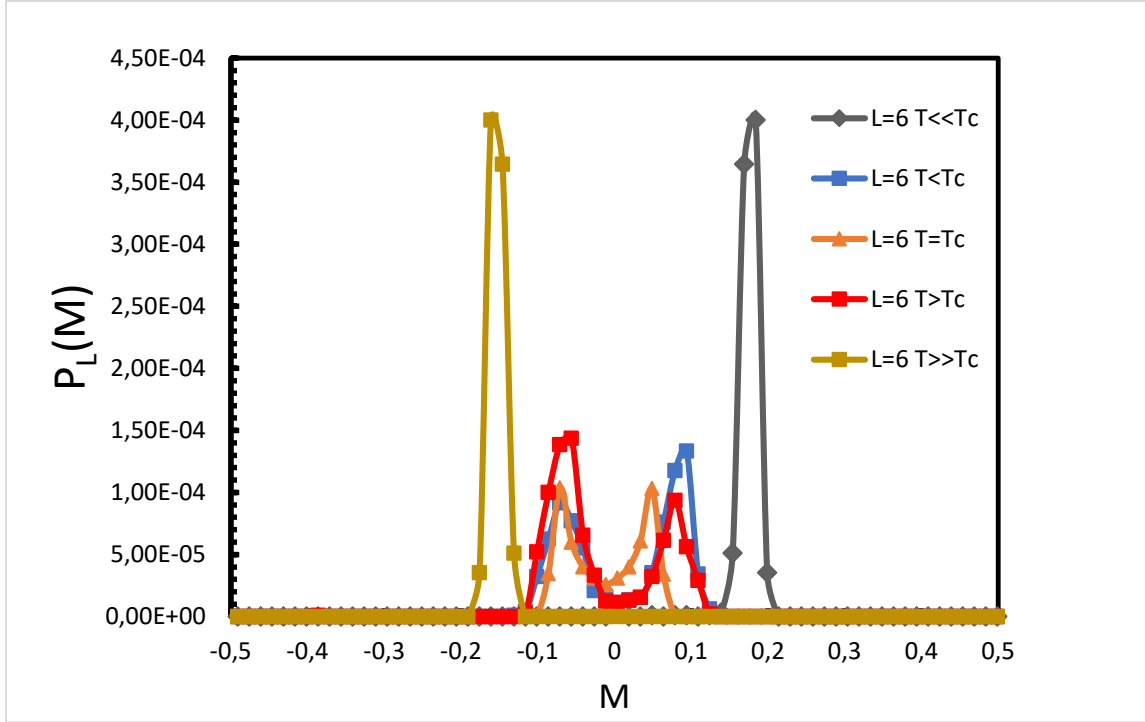
Şekil 4.9. $L=6$ $T = T_c$ örgüsü için düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı değişimi



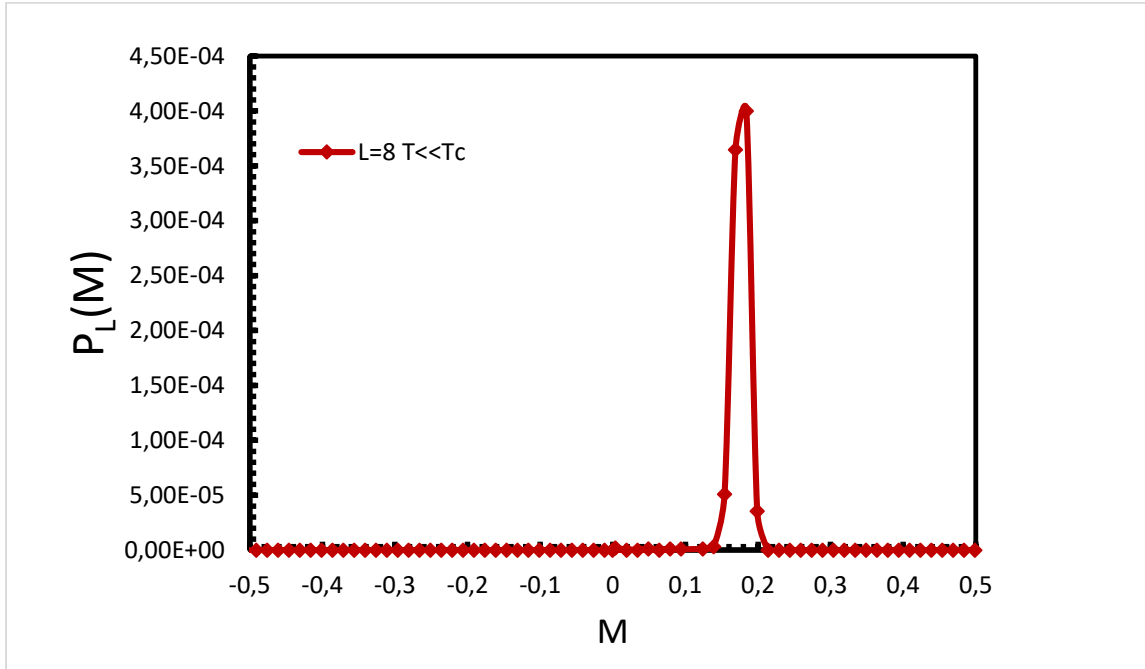
Şekil 4.10. $L=6$ $T > T_c$ örgüsü için düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı değişimi



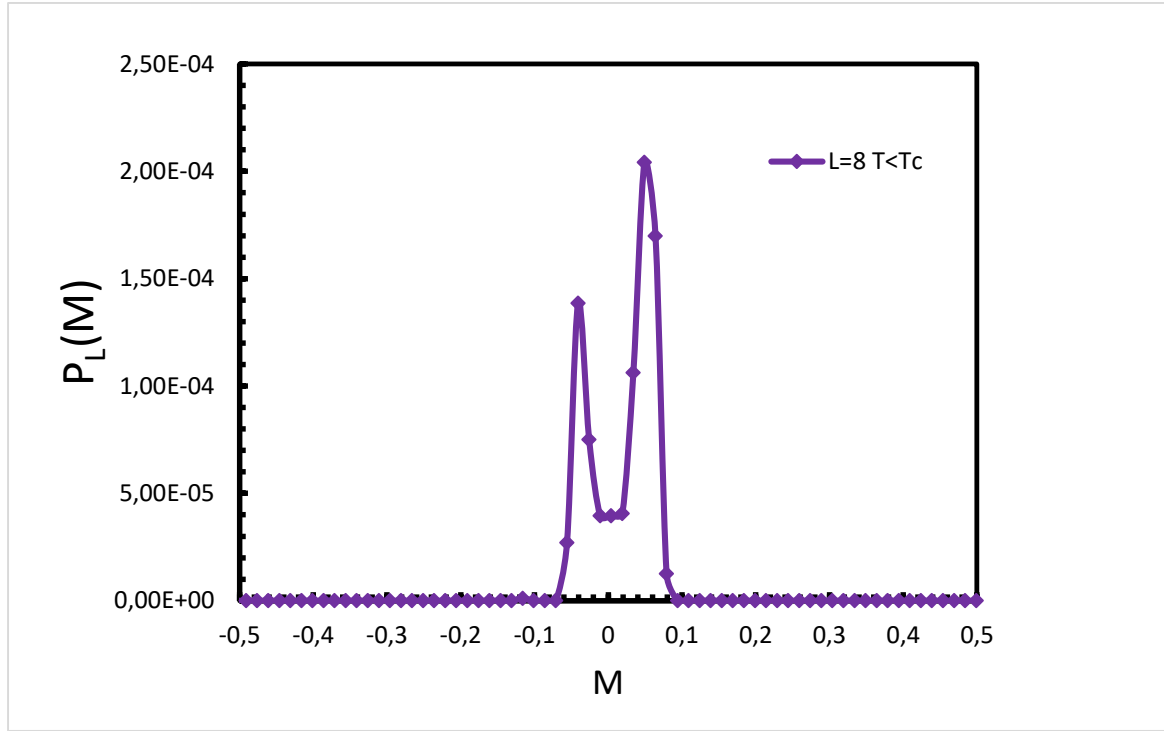
Şekil 4.11. $L=6$ $T \gg T_c$ örgüsü için düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının değişimi



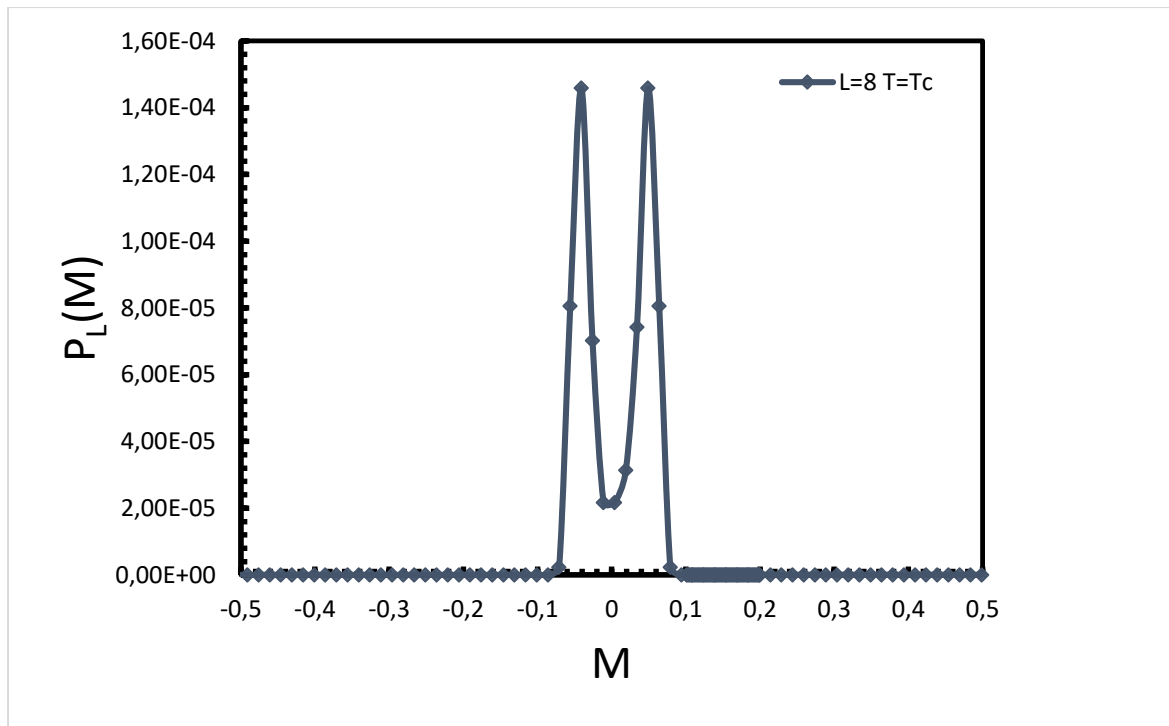
Şekil 4.12. $L=6$ $T \ll T_c$, $T < T_c$, $T = T_c$, $T > T_c$, $T \gg T_c$ için düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının karşılaştırması



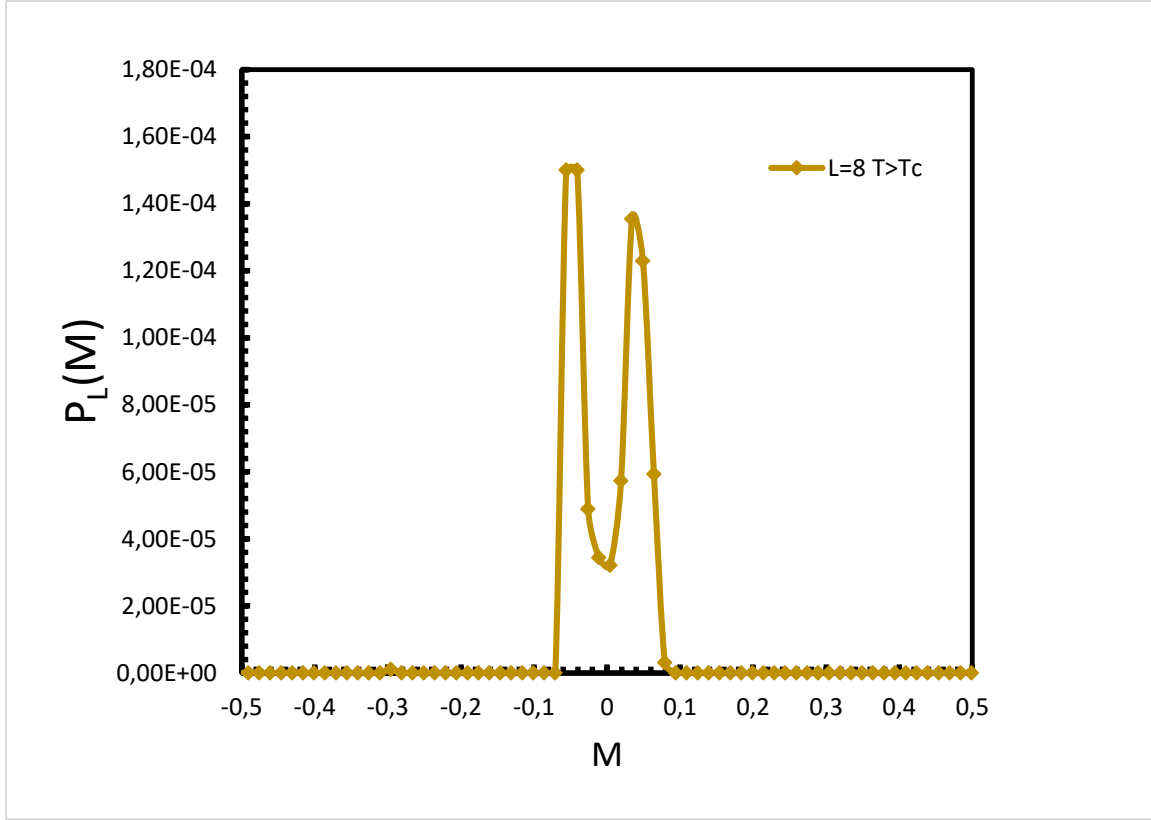
Şekil 4.13. $L=8$ $T \ll T_c$ örgüsü için düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının değişimi



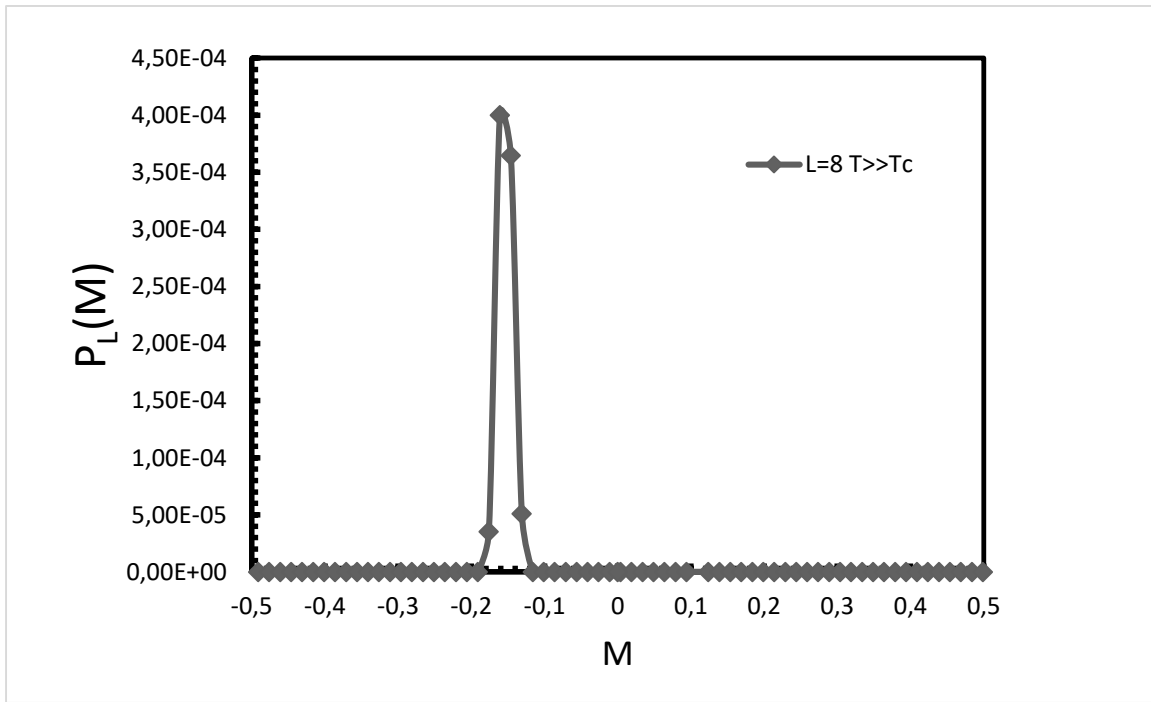
Şekil 4.14. $L=8$ $T < T_c$ örgüsü için düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının değişimi



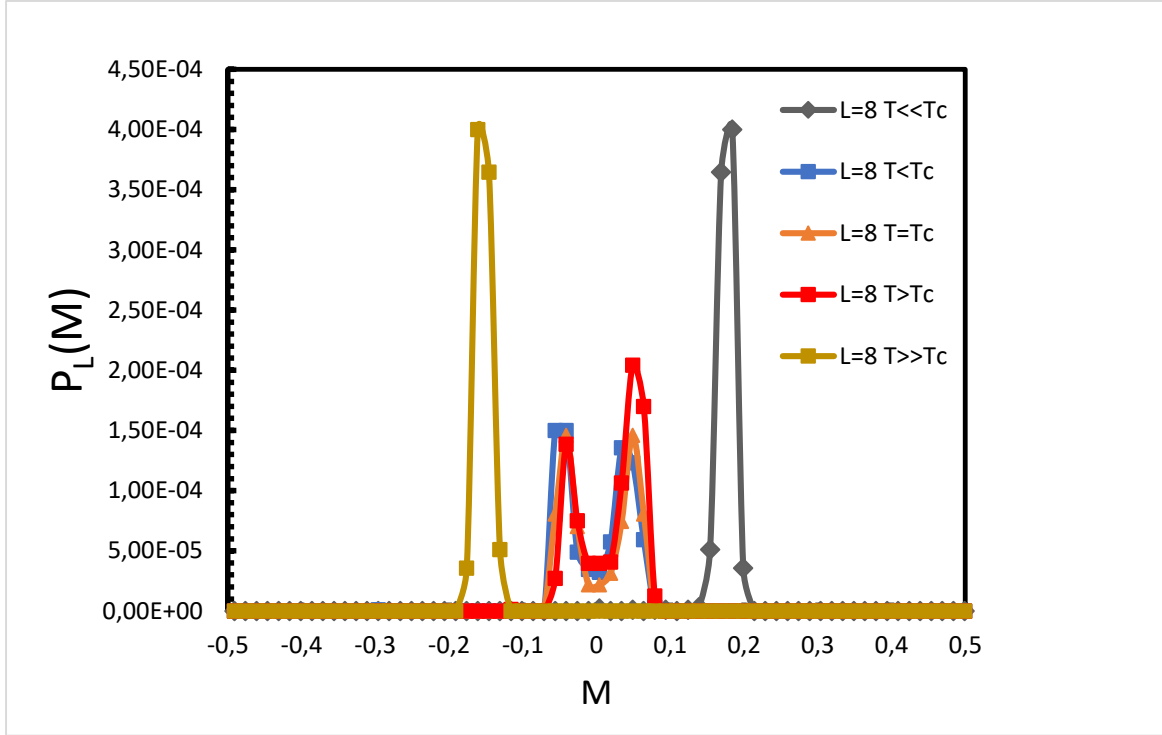
Şekil 4.15. $L=8$ $T = T_c$ örgüsü için düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının değişimi



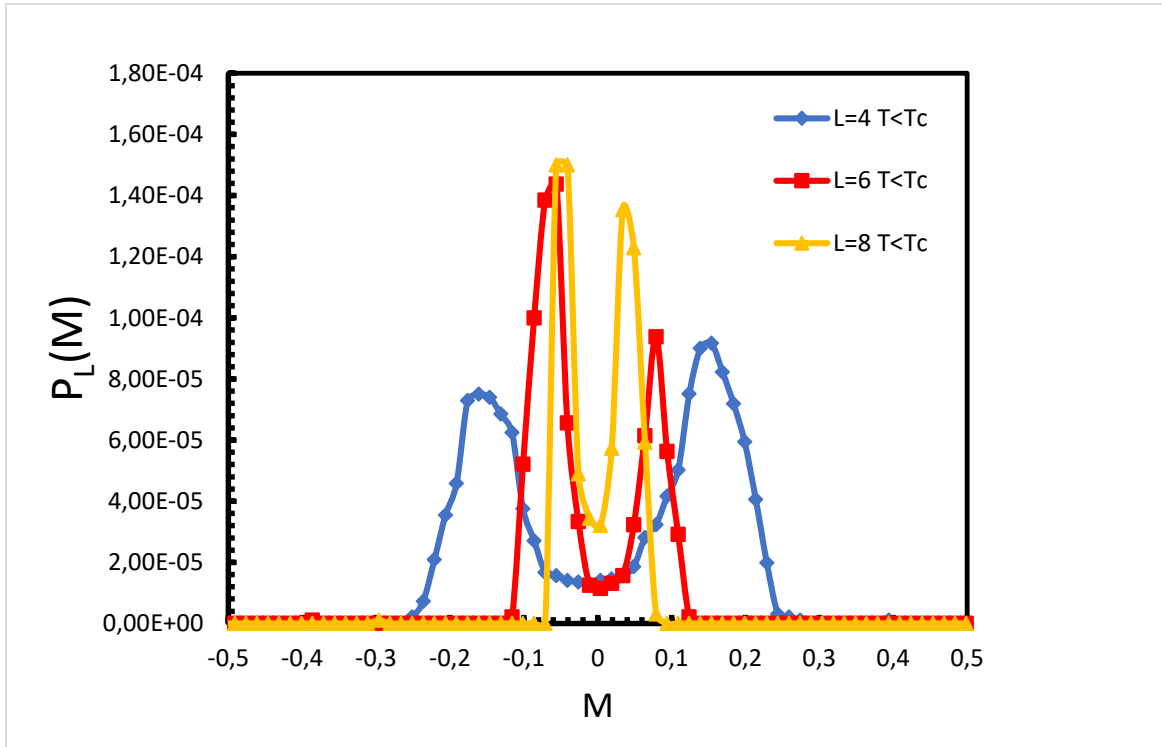
Şekil 4.16. $L=8$ $T > T_c$ örgüsü için düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının değişimi



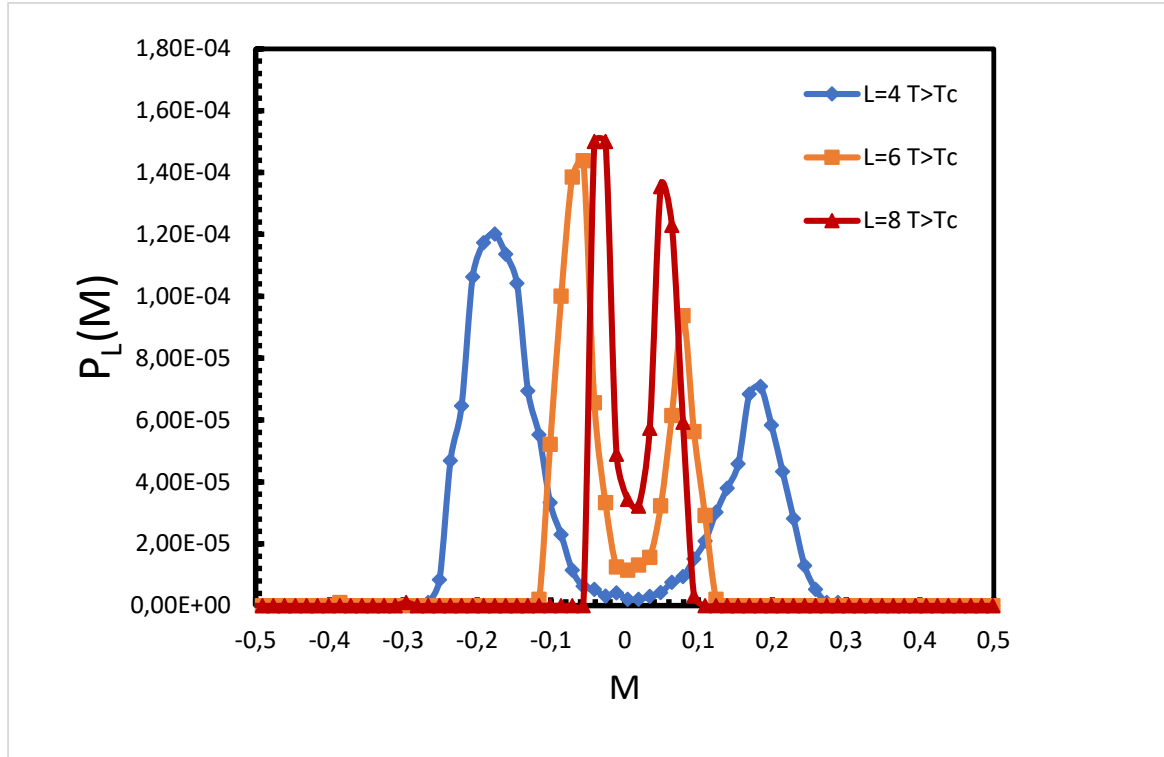
Şekil 4.17. $L=8$ $T \gg T_c$ örgüsü için düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının değişimi



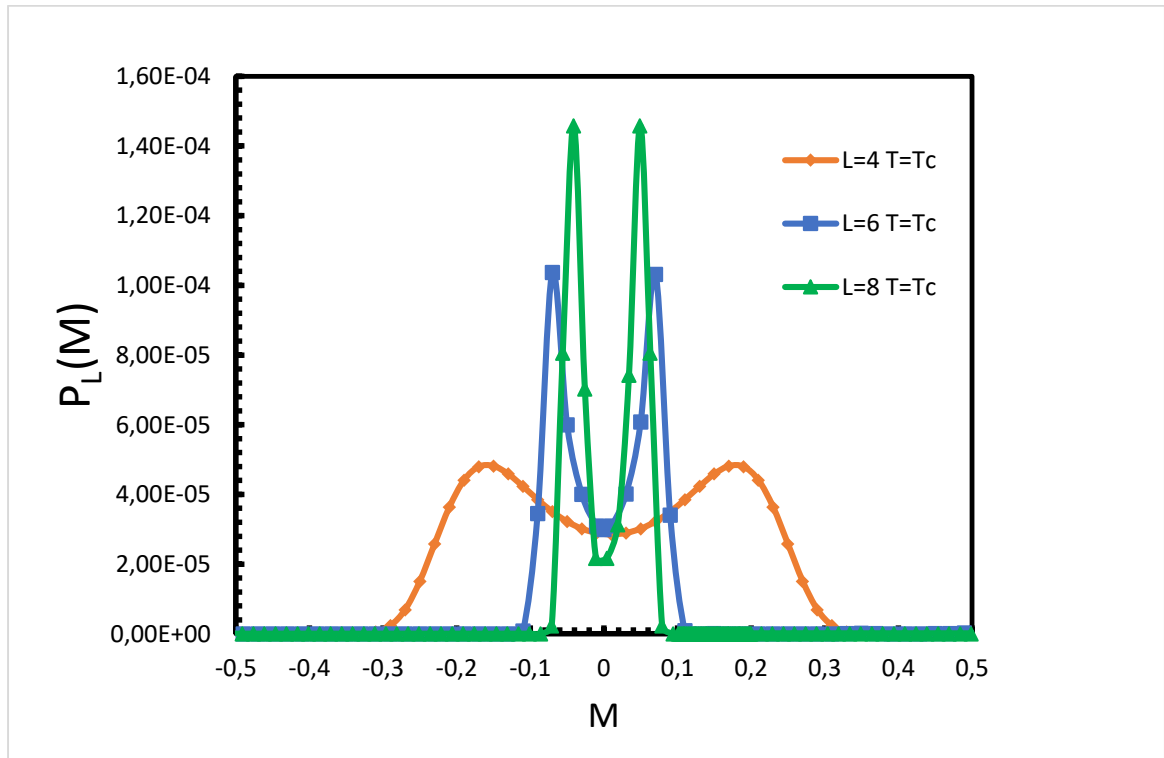
Şekil 4.18. $L=8$ $T \ll T_c$, $T < T_c$, $T = T_c$, $T > T_c$, $T \gg T_c$ için düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının karşılaştırması



Şekil 4.19. $L=4, 6, 8$ örgüleri için $T < T_c$ de düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının karşılaştırması



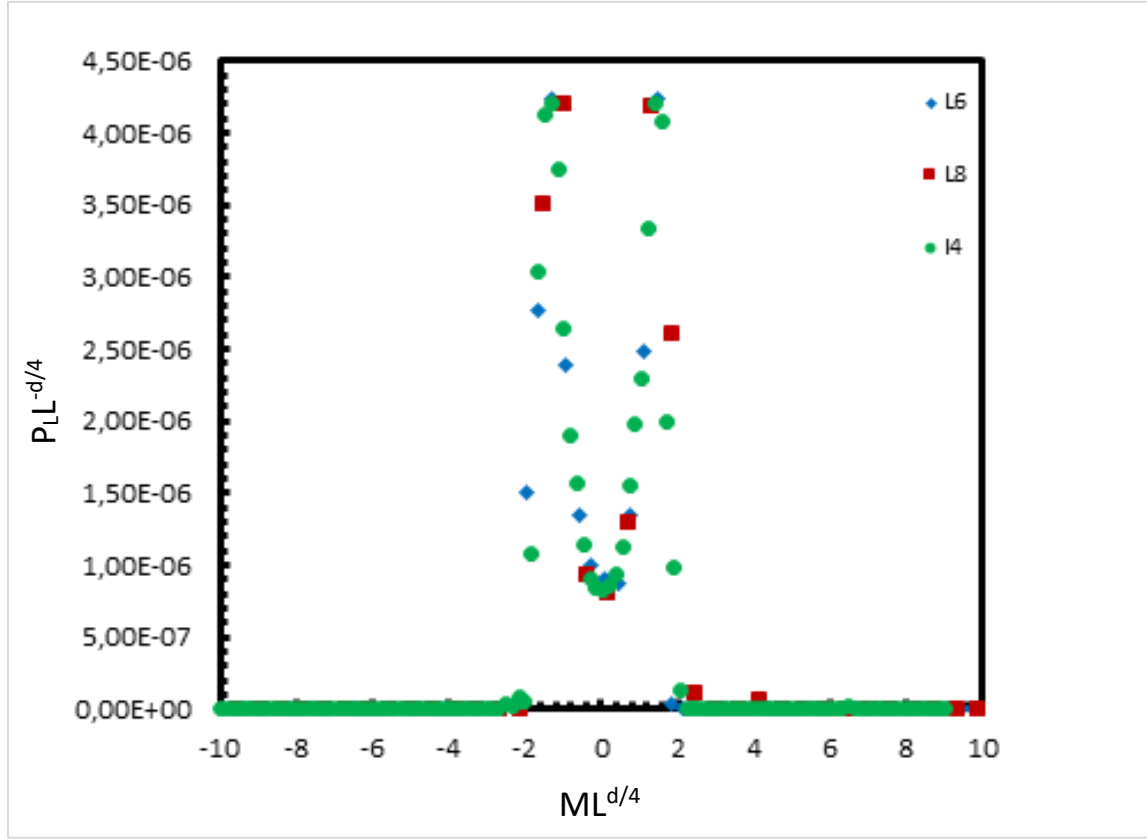
Şekil 4.20. $L=4, 6, 8$ örgüleri için $T > T_c$ 'de de düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının karşılaştırması



Şekil 4.21. $L=4, 6, 8$ örgüleri için $T = T_c$ 'de de düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının karşılaştırması

Şekil 4.1. den Şekil 4.21. 'e kadar grafikler incelendiğinde $L=4,6,8$ için $T \gg T_c$, $T > T_c$, $T = T_c$, $T < T_c$, $T \ll T_c$ eğrileri örgü boyuna bağlı olarak değişim göstermektedir. $L=4, 6, 8$ için $T = T_c$ de eğriler çift pik şeklinde ve tepe noktaları eşit değerlerde, $T < T_c$ de görülen piklerin tepe noktalarının büyüklüğü değişiklik göstermekte olup $T = T_c$ grafiklerine göre tepe noktaları arasındaki değer farkı artmakta, $T \ll T_c$ de ise çift pik oluşumu yok olup tek pik gözlemlenmektedir. $T > T_c$ veya $T < T_c$ 'de eğriler $T = T_c$ 'deki durumlarına kıyasla piklerden birisinin tepe noktası diğerine göre daha yüksekte, $T \gg T_c$ 'de ise eğrilerin ikili pik yapısı bozulup yerine tek pik şeklinde bir görünüm vermekte ve pikin maksimum değeri oldukça artmaktadır. Tüm bu durumlar literatürdeki durumlarla uyum halindedir [37, 51, 53]. Şekil 4.21. incelendiğinde örgü boyutu büyüdükçe pik tepe noktaları arasındaki mesafe küçülmekte fakat pik yüksekliği (pik değeri) artmaktadır. Tüm bu durumlar literatürdeki durumlarla uyum halindedir [37, 49].

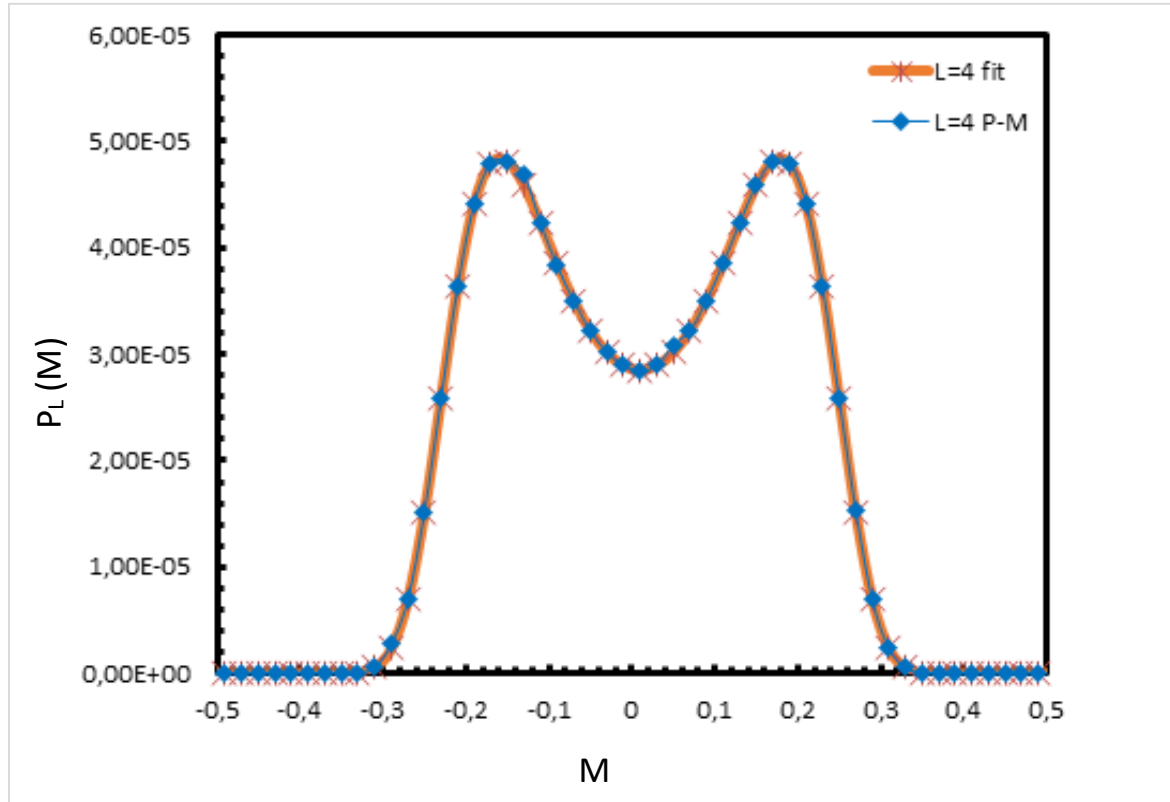
$L=4,6,8$ örgüleri için $T = T_c$ 'de ölçeklenmiş düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının ölçeklenen düzen parametresine karşı değerlerinin grafiği çizilmiştir (Şekil 4.22.). Eğrilerin üst üste gelmesi düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı için kullanılan ölçekleme bağıntısının geçerli olduğunu göstermektedir. [37]



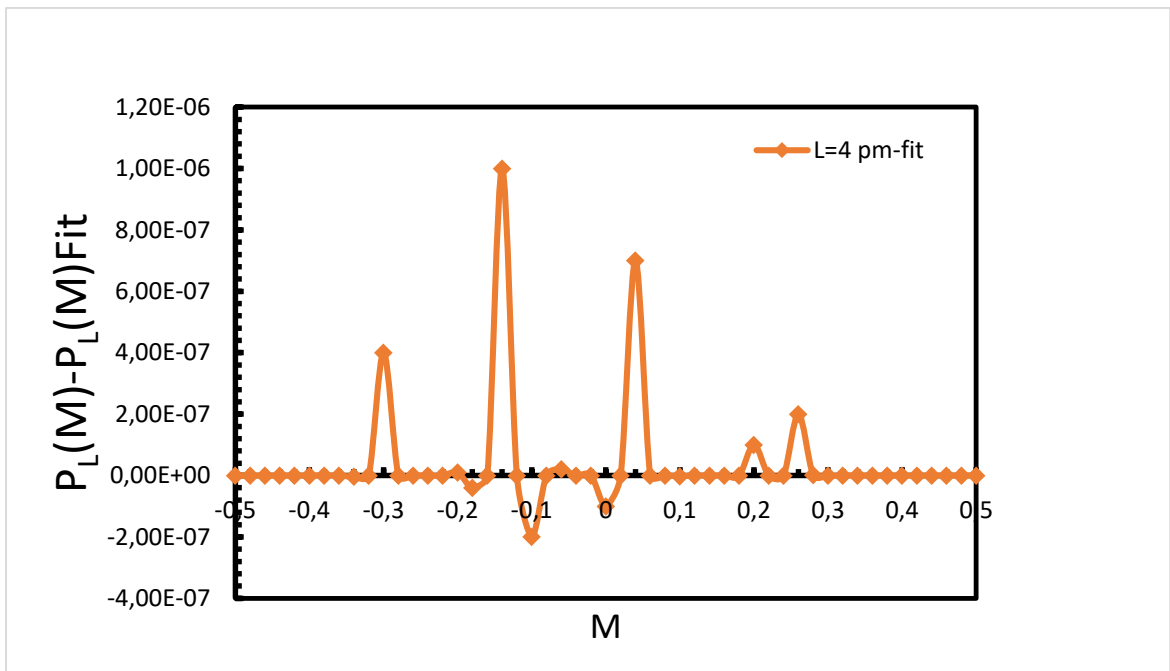
Şekil 4.22. Doğrusal boyutları $L = 4, 6, 8, 10$ olan örgüler için ölçeklenmiş düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının, $(P_L L^{-d/4})$, ölçeklenmiş manyetizasyona $(M L^{d/4})$ karşı grafiği.

Şekil 4.22. incelendiğinde simülasyonlardan elde edilen dataların üst üste gelmesi bulunan sonuçların doğruluğunu göstermektedir. Örgü değerlerinin farklı olması $L^{-d/4}$ ve $L^{d/4}$ çarpanları farklı değerlere sahip olan grafiklerin üst üste binmesini sağlamıştır. Önceki grafiklerde görüldüğü üzere piklerin çeşitli örgü değerlerinde genişlik, yükseklik değerleri değişiklik göstermektedir.

$L=4, 6, 8$ örgüler için düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının ve analitik fonksiyonlara göre yapılan fitlerin düzen parametresine göre grafikleri ve fit farkları çizilmiştir (Şekil 4.23., Şekil 4.24., Şekil 4.25.) Fit eğrilerinden A ve B çarpanları elde edilmiştir.

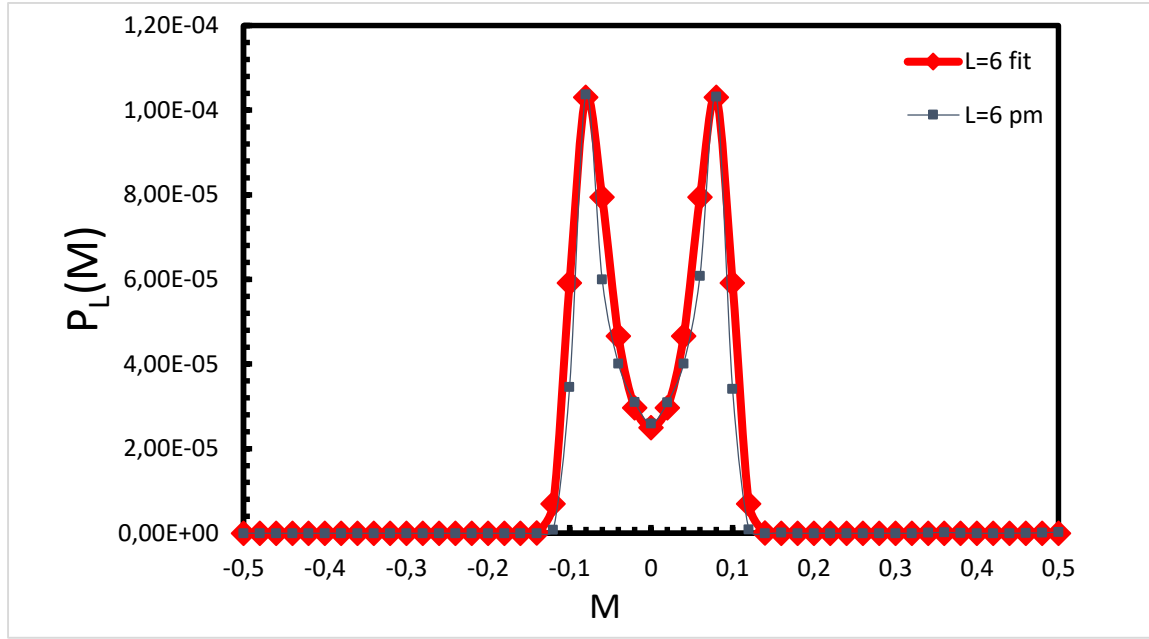


(a)

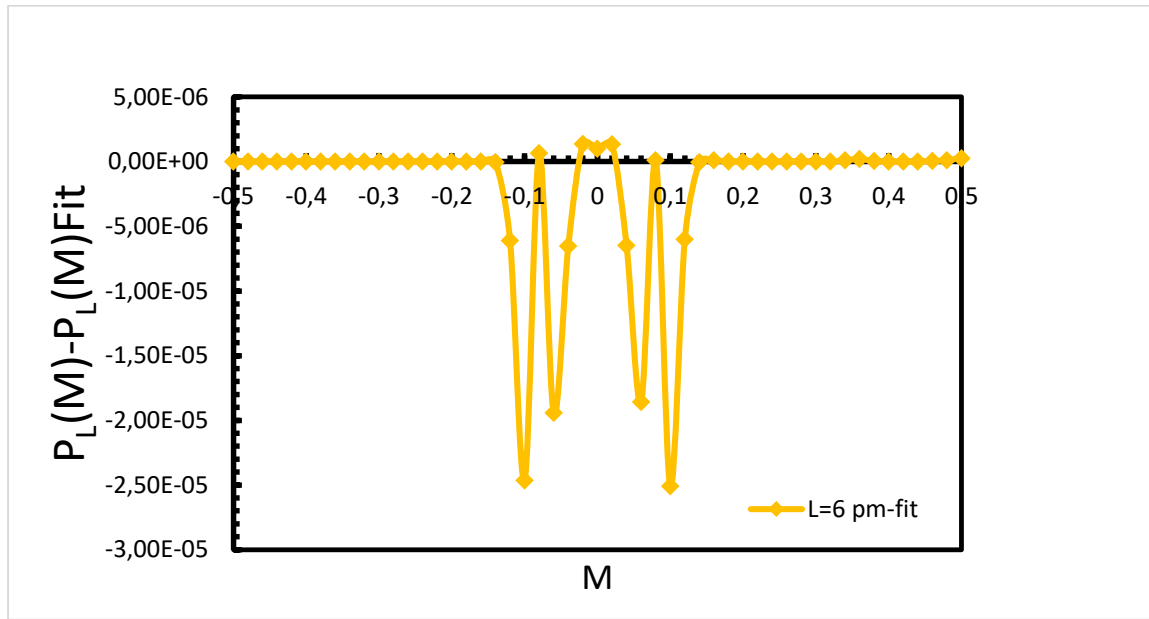


(b)

Şekil 4.23. a. Çizgisel boyutu $L=4$ olan örgü için $P_L(M)$ 'nin M 'ye karşı analitik ifadesine göre yapılmış olan fit. b. Çizgisel boyutu $L=4$ olan örgü için $P_L(M)$ ile fitin fark grafiği.

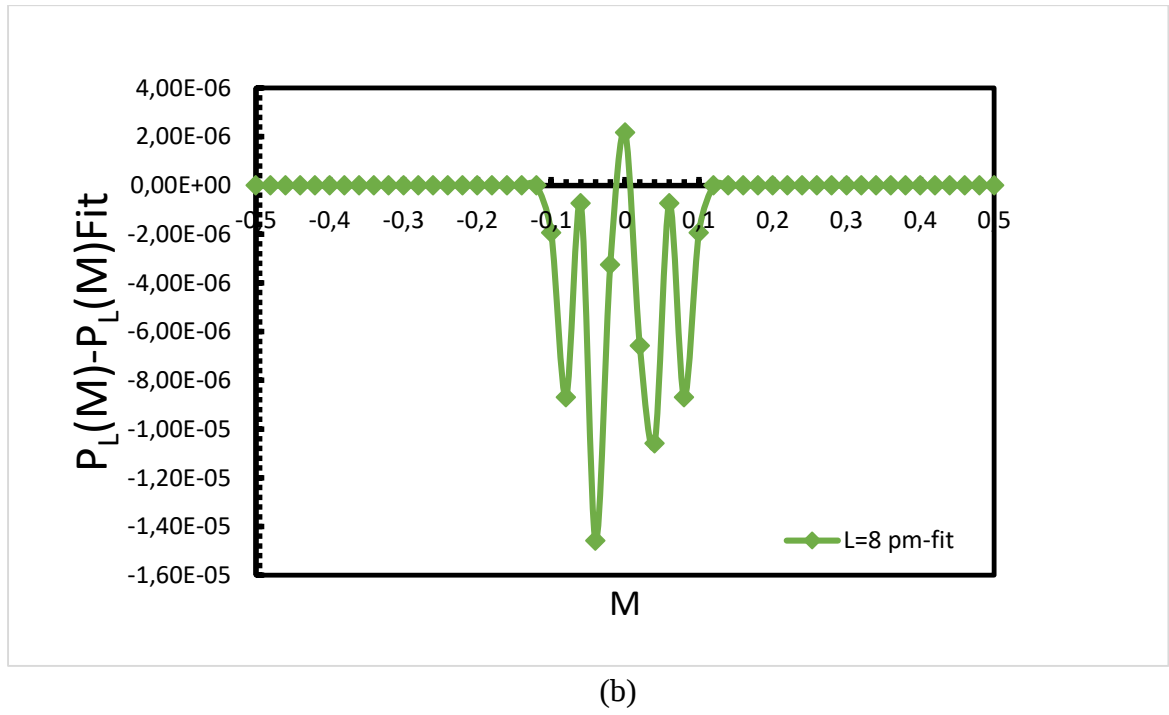
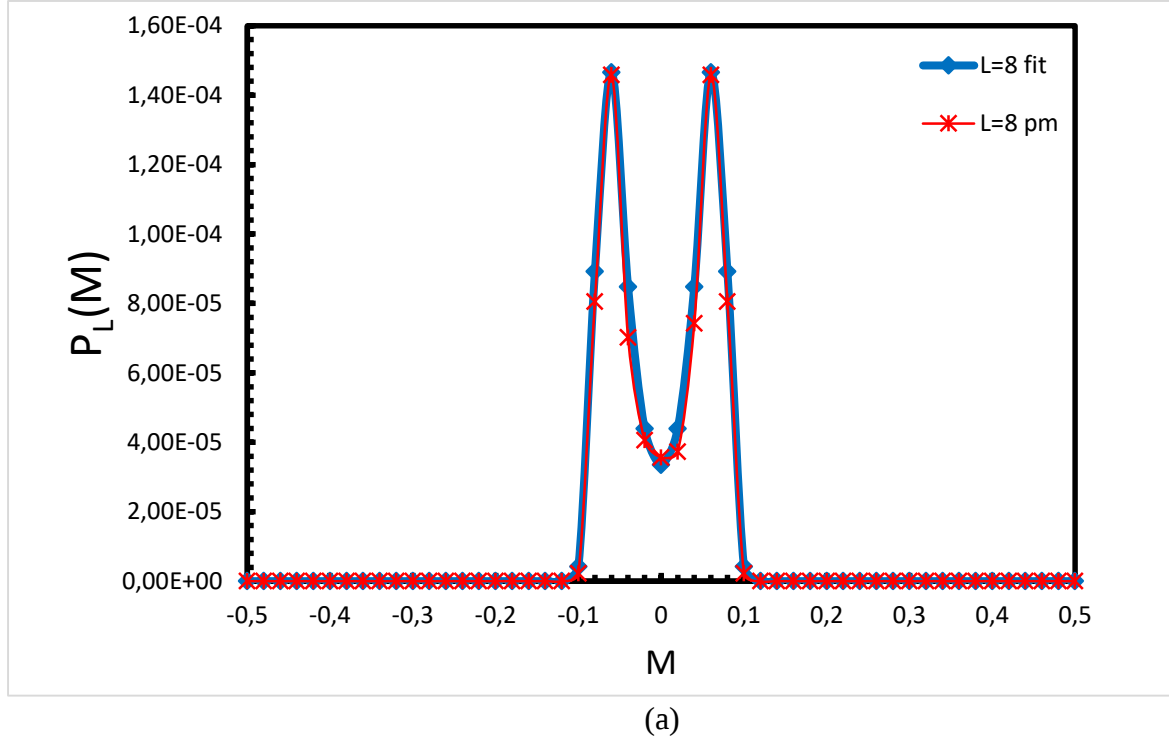


(a)



(b)

Şekil 4.24. a. Çizgisel boyutu $L=6$ olan örgü için $P_L(M)$ 'nin M 'ye karşı analitik ifadesine göre yapılmış olan fit. b. Çizgisel boyutu $L=6$ olan örgü için $P_L(M)$ ile fitin fark grafiği.



Şekil 4.25. a. Çizgisel boyutu $L=8$ olan örgü için $P_L(M)$ 'nin M 'ye karşı analitik ifadesine göre yapılan fit. b. Çizgisel boyutu $L=8$ olan örgü için $P_L(M)$ ile fitin fark grafiği.

Fitler için elde edilen parametreler çizelge 4.1 de verilmiştir:

Çizelge 4.1. L=4,6,8 için elde edilen parametre değerleri

L	A	B	P ₀	M ₀
4	0,04	0,53	4,84E-05	1,68E-01
6	0,07	1.42	1,03E-4	7,8999E-2
8	0,09	1,5	1,5E-4	6,3999E-2

Düzen parametresi dağılımı için sonlu örgü ölçekleme fonksiyonunun, $P(m, x)$, analitik olarak bilindiği durum olup, $P(m, x)$ ortalama alana uygun yapıdadır [40,43]. Ölçümlerde yedi boyutlu ising model için düzen parametresi olasılık dağılım fonksiyonlarında analitik ifadeye göre fit yapılarak A ve B değerleri tespit edilmiştir (Şekil 4.23., Şekil 4.24., Şekil 4.25.). Yapılan fitler tüm örgülerde $P_L(M)$ fonksiyonlarına oldukça iyi uyum sağlamaktadır. Uyumun test edilebilmesi için $P_L(M)$ fonksiyonu ile yapılmış olan fit fonksiyonu farkları alınarak Şekil 4.23.b, Şekil 4.24.b, Şekil 4.25.b’de gösterilmiştir.

Çizelge 4.2. Fit analizi için literatür değerleri

L	A	B	M ₀	P ₀
4	0,02	1,12	0,206	0,0027
6	0,05	1,15	0,116	0,0048
8	0,06	1,2	0,078	0,0072

Şekil 4.21. Düzen parametresi olasılık dağılımının $P_L (M)$ şematik değişimini gösteren grafikten [38];

$$\Delta M \propto L^{-\frac{\beta}{\theta}}; T = T_c \quad (4.1)$$

dir.

Çizelge 4.3. $d=7$ boyutta $L=4,6,8$ örgüleri için Düzen Parametresindeki değişime karşılık $-\frac{\beta}{\vartheta}$ kritik üst değerleri;

L	ΔM	$-\frac{\beta}{\vartheta}$
4	0,48	-0,53
6	0,18	-0,96
8	0,12	-1,01

Çizelge 4.3 de görüldüğü gibi örgü boyutu büyüdükçe $-\frac{\beta}{\vartheta}=-1,01$ kritik üs değeri $-\frac{\beta}{\vartheta}=-1$ teorik değeri ile uyum halindedir [24-26,29,38,44,47].

KAYNAKLAR

1. Aktekin, N. (1999). The simulation of the Ising model on the Creutz cellular automaton, In *Annual Reviews of Computational Physics*, 4, 1-23.
2. Binder, K., Nauenberg, M., Privman, V. and Young, A. P. (1985). Finite-size tests of hyperscaling. *Physical Review B*, 31(3), 1498.
3. Binney, J. J., Dowrick, N. J., Fisher, A. J. and Newman, M. E. (1992). *The theory of critical phenomena: An introduction to the renormalization group*. Oxford University Press Book, 464.
4. Creutz, M. (1983). Microcanonical monte carlo simulation. *Physical Review Letters*, 50(19), 1411.
5. Erdinç, A. and Keskin, M. (2002). Equilibrium and nonequilibrium behavior of the spin-1 Ising model in the quadrupolar phase. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 307(3-4), 453-468.
6. Kalay, M. (2001). *Beş boyutlu Ising modelinin creutz "Cellular Automaton"ında incelenmesi*, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 93.
7. Kundrotas, P. J., Lapinskas, S. and Rosengren, A. (1997). Model of adsorbate-induced missing-row reconstructions of the (110) surface of fcc metals. *Physical Review B*, 56(11), 6486-6489.
8. Kutlu, B. ve Aktekin, N. (1993). *Ising model faz geçiş sıcaklık üslerinin "Cellular Automaton" yöntemi ile hesaplanması*. 3. Ankara Yoğun Madde Konferansı, Ankara
9. Merdan, Z. (2002). *Altı boyutlu Ising modelinin creutz "Cellular Automaton"ında incelenmesi*, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 108.
10. Merdan, Z. and Bayırlı, M. (2005). The effect of the increase of linear dimensions on exponents obtained by finite-size scaling relations for the six-dimensional Ising model on the Creutz cellular automaton. *Applied Mathematics and Computation*, 167(1), 212-224.
11. Onsager, L. (1944). Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition. *Physical Review*, 65(3-4), 117.
12. Özkan, A. and Kutlu, B. (2007). Phase diagrams of the FCC blume–emery–griffiths model on A cellular automaton. *International Journal of Modern Physics C*, 18(3), 1417-1427.
13. Seferoğlu, N. and Kutlu, B. (2007). Critical exponents for the re-entrant phase transitions in the three-dimensional blume emery griffiths model on the cellular automaton. *Chinese Physics Letters*, 24(7), 2040-2043.
14. Stanley, H. E. (1971). *Phase transitions and critical phenomena*. Clarendon Press, Oxford, 7.

15. Kutlu, B. and Aktekin, N. (1994). Computation of critical exponents for two-dimensional ising model on a cellular automaton. *Journal of Statistical Physics*, 75(3-4), 757-763.
16. Merdan, Z., Bayirli, M., Günen, A. and Bülbül, M. (2016). The finite-size scaling study of the ising model for the fractals. *International Journal of Theoretical Physics*, 55(4), 2031-2039.
17. Aktekin, N. (1995). Simulation of the three-dimensional Ising model on the Creutz cellular automaton. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 219(3-4), 436-446.
18. Aktekin, N. (1996). Simulation of the four-dimensional Ising model on the creutz Cellular Automaton. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 232(1-2), 397-407.
19. Merdan, Z., Kürkçü, C. and Öztürk, M. K. (2014). The finite-size scaling study of four-dimensional Ising model in the presence of external magnetic field. *Low Temperature Physics*, 40(12), 1058-1062.
20. Merdan, Z. & Güzelsoy, E. (2012). The effect of the number of simulations on the exponents obtained by finite-size scaling relations of the order parameter and the magnetic susceptibility for the four-dimensional ising model on the creutz Cellular Automaton. *International Journal of Theoretical Physics*, 51(5), 1621-1631.
21. Merdan, Z. and Güzelsoy, E. (2011). Finite-size scaling relations for a four-dimensional Ising model on Creutz cellular automata. *Low Temperature Physics*, 37(6), 470-475.
22. Aktekin, N., Erkoç, Ş. and Kalay, M. (1999). The test of the finite-size scaling relations for the five-dimensional Ising model on the creutz Cellular automaton. *International Journal of Modern Physics C*, 10(7), 1237-1245.
23. Merdan, Z., Aras, N. and Kürkçü, C. (2016). The finite-size scaling study of five-dimensional ising model. *Acta Physica Polonica A* 129(23) 1100-1104.
24. Aktekin, N. and Erkoç, Ş. (2001). The test of the finite-size scaling relations for the seven-dimensional Ising model on the creutz Cellular Automaton. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 290(1-2), 123-130.
25. Merdan, Z., Duran, A., Atille, D., Mülazimoğlu, G. and Günen, A. (2006). The test of the finite-size scaling relations of the Ising models in seven and eight dimensions on the Creutz cellular automaton. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 366, 265-272.
26. Merdan, Z. and Gokbel-Keklikoglu, D. (2018). The test of a new critical exponent by using ising model on the creutz Cellular Automaton. *Acta Physica Polonica A*, 133, 1200-1204.
27. Meyer, P. J. G. (2000). *Computational Studies of Pure and Diluted Spin Models*. MScThesis, University of Derby.

28. Demirel, H. (2007). *Dış manyetik alanda spin-1 Ising modelin incelenmesi*, Yüksek Lisans Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 52.
29. Aktekin, N. (2000). The simulation of the ising model on the creutz Cellular Automaton. *In Annual Reviews of Computational Physics VII*. Ed. D. Stauffer, World Scientific, Singapore, 1-23.
30. Kutlu, B. (1996). *İki boyutlu ising modelin creutz Cellular Automaton'da incelenmesi*, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara.
31. Aktekin, N. (1995). Simulation of the three-dimensional Ising model on the Creutz cellular automaton. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 219(3-4), 436-446.
32. Wolfram, S. (1983). Statistical mechanics of cellular automata. *Reviews of Modern Physics*, 55(3), 527-601.
33. Kalay, M. (2001). “Beş boyutlu Ising modelin “Creutz cellular automaton”ında incelenmesi”, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Ankara, 64-101.
34. Yeomans, J. M., (1992). Statistical mechanics of phase transitions, *Clarendon Press Book*, Oxford 1-141.
35. Binder, K. Z. (1981). Physik B43, 119, *Physical Review Letters*, 47,693.
36. Binder, K. and Landau, D.P. (1984). *Physical Review Letters*, B30, 1477.
37. ChaHa, M. S. S., Landau, D.P. and Binder, K. (1986). *Physical Review Letters*, B34,1841.
38. Privman, V. (Ed.). (1990). *Finite-Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems*, World Scientific, Singapore, 1-98. (Privman, 1990)
39. Privman, V., Hohenberg, P.C. and Aharony, A. in: *Phase Transitions and Critical Phenomena*, C. Domb and J. L. Lebowitz Eds. (Academic, NY, in print), see Ch. 10 there.
40. Stauffer, D., Ferer, M. and Wortis, M. (1972). *Physical Review Letters*, 29,345.
41. Aktekin, N. (2004). The finite-size scaling relation for the order-parameter probability distribution of the four-dimensional ising model. *Gazi University Journal of Science*, 17(3), 59-70.
42. Binder, K. (1981). Finite size scaling analysis of Ising model block distribution functions. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 43(2), 119-140.
43. Bruce, A.D. (1985). Probability density functions for collective coordinates in Ising-like systems, *Journal of Physics Review*, 31, 1498-1502.

44. Binder, K. (1990). Some recent progress in the phenomenological theory of finite size scaling and application to Monte Carlo studies of critical phenomena. In *Finite size scaling and numerical simulation of statistical systems*, Ed. V. Privman, World Scientific Books, Singapore, 173-221.
45. Privman, V., & Fisher, M. E. (1984). Universal critical amplitudes in finite-size scaling. *Physical Review Letters B*, 30(1), 322.
46. Rudnick, J., Guo, H. and Jasnow, D. (1985). "Finite-size scaling and the renormalization group", *Journal Statistical Physical*, 41,353-373.
47. Jasnow, D. (1990). Finite-size scaling, hyperscaling and the renormalization group. In *Finite-Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems*, Ed. V. Privman, World Scientific Book, Singapore, 99-140.
48. Lai, P. Y. and Mon, K. K. (1990). Finite-size scaling of the Ising model in four dimensions, *Physical Review Letters B*, 41(13), 9257-9263.
49. Kenna, R. and Lang, C.B. (1993). Renormalization group analysis of finite-size scaling in the ϕ^4 model, *Nucl. Phys. B*, 393, 461-479
50. Mülazımoğlu Kızılırmak, G. (2009). *Dört boyutlu ising modelin (18,20, 22) ve (18,20,22) örgülerinde Creutz Cellular Automaton ile incelenmesi*, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara.
51. Luijten, E., Binder, K. and Blöte, H. W. (1999). Finite-size scaling above the upper critical dimension revisited: the case of the five-dimensional Ising model. *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems*, 9(2), 289-297.
52. Parisi, G. and Ruiz-Lorenzo, J. J. (1996). Scaling above the upper critical dimension in Ising models. *Physical Review B*, 54(6), 3698-3701.
53. Martins, P. H. L. and Plascak, J. A. (2004). Probability distribution of the order parameter. *Brazilian Journal of Physics*, 34(2A), 433-437.

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı, adı : DOĞRUER, Semih
 Uyuğu : T.C.
 Doğum tarihi ve yeri : 22.07.1987, Ankara
 Medeni hali : Bekar
 Telefon : 0 (506)963 47 66
 E-mail : dogruersemih@gmail.com



Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet Tarihi
Yüksek Lisans	Gazi Üniversitesi/Fizik Ana Bilim Dalı	Devam Ediyor
Lisans	Gazi Üniversitesi / Fizik	2015
Lise	Ankara Selçuklu Anadolu Lisesi	2004

İş Deneyimi

Yıl	Yer	Görev
-	-	-

Yabancı Dil

İngilizce

Yayınlar

1. Doğruer, S. (2019, 20 Aralık). *Yedi Boyutlu Ising Modelinde Düzen Parametresi İhmaliyet Dağılımı İçin Sonlu Örgü Ölçekleme Bağıntısı*. 25. Yoğun Madde Fiziği Ankara Toplantısı, Hacettepe Üniversitesi, Ankara.

Hobiler

Voleybol, Fitness, Maket Modelcilik.



GAZİ GELECEKTİR..