

**ÜÇ BOYUTLU BLUME-EMERY-GRIFFITHS MODELİN FAZ
GEÇİŞLERİNİN CELLULAR AUTOMATON İLE SİMÜLASYONU**

Nurgül SEFEROĞLU

**DOKTORA TEZİ
FİZİK**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**OCAK 2007
ANKARA**

**ÜÇ BOYUTLU BLUME-EMERY-GRIFFITHS MODELİN FAZ
GEÇİŞLERİNİN CELLULAR AUTOMATON İLE SİMÜLASYONU**

Nurgül SEFEROĞLU

**DOKTORA TEZİ
FİZİK**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**OCAK 2007
ANKARA**

Nurgül SEFEROĞLU tarafından hazırlanan ÜÇ BOYUTLU BLUME-EMERY-GRIFFITHS MODELİN FAZ GEÇİŞLERİNİN CELLULAR AUTOMATON İLE SİMÜLASYONU adlı bu tezin Doktora tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.

Prof. Dr. Bülent KUTLU

Tez Yöneticisi

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

Başkan : Prof. Dr. Ziya B. GÜVENÇ

Üye : Prof. Dr. Bülent KUTLU

Üye : Prof. Dr. Bora ALKAN

Üye : Prof. Dr. Abdullah GÜNEN

Üye : Prof. Dr. Süleyman ÖZÇELİK

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.

Nurgül SEFEROĞLU

**ÜÇ BOYUTLU BLUME-EMERY-GRIFFITHS MODELİN FAZ
GEÇİŞLERİNİN CELLULAR AUTOMATON İLE SİMÜLASYONU
(Doktora Tezi)**

Nurgül SEFEROĞLU

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

Ocak 2007

ÖZET

Bu çalışmada, 3-boyutta, ferromanyetik bilineer etkileşmeli BEG modelin, Creutz cellular automaton algoritması temel alınarak geliştirilen ısıtma algoritması kullanılarak simülasyonu gerçekleştirildi. Hesaplamalar, $-3 < D/J < 3$ ve $-2 \leq K/J \leq 0$ parametre bölgesinde $L=12,16,18$ ve 24 kenar uzunluğuna sahip basit kübik örgüler üzerinde yapıldı. Modelin faz yapısının tespit edilmesi amacıyla, termodinamik niceliklerinin sıcaklıkla değişimleri ile düzen parametresi olasılık dağılımı($P(m)$) incelendi. Hesaplamalar sonunda, modelin faz sınırlarına yakın belirli D/J ve K/J parametre değerlerinde, çeşitli ardışık ve tekrarlayan faz geçişlerine sahip olduğu ortaya kondu. Bununla birlikte, sürekli faz geçişlerinde, sonlu örgü ölçekleme teorisi kullanılarak statik kritik üsler(ν , β , γ ve α) tespit edildi. Sonuç olarak, 3-d BEG modelin tüm ardışık ve tekrarlayan faz geçişlerinde evrensel davrandığı tespit edildi.

Bilim Kodu : 202.1.147

Anahtar Kelimeler : Blume-Emery-Griffiths(BEG) model, Creutz cellular automaton, Ardışık ve tekrarlayan faz geçişleri, 3-d.

Sayfa Adedi : 103

Tez Yöneticisi : Prof. Dr. Bülent KUTLU

**THE SIMULATION OF THE PHASE TRANSITIONS OF THE THREE-
DIMENSIONAL BLUME-EMERY-GRIFFITHS MODEL ON A CELLULAR
AUTOMATON
(Ph.D Thesis)**

Nurgül SEFEROĞLU

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

ABSTRACT

In this study, Blume-Emery-Griffiths model with the ferromagnetic bilinear interaction is simulated using the heating algorithm which is improved from the Creutz cellular automaton. The simulations have been made in the $-3 < D/J < 3$ and $-2 \leq K/J \leq 0$ parameter regions on a simple cubic lattices with linear dimensions $L=12, 16, 18$ and 24 . The temperature variations of the thermodynamic quantities and the probability distribution of the order parameter ($P(m)$) are investigated to obtain the phase diagrams of the model. The calculations show that the model exhibits the re-entrant and double re-entrant phase transitions for certain values of D/J and K/J parameters near the phase boundary. In addition, the static critical exponents (ν , β , γ and α) are estimated by analyzing the data within the framework of finite-size scaling theory. It is obtained that 3-d BEG model exhibits the universality behavior of the three-dimensional Ising model for all the continuous transition.

Science Code : 202.1.147

Keywords : Blume-Emery-Griffiths(BEG) model, Creutz cellular automaton, Re-entrant phase transition, 3-d.

Page Number : 103

Adviser : Prof. Dr. Bülent KUTLU

TEŞEKKÜR

Çalışmalarım boyunca değerli yardım ve katkılarıyla beni yönlendiren Sayın Prof. Dr. Bülent KUTLU'ya; gösterdikleri anlayıştan dolayı Sayın Tarhan ERENBİLGE ve Sayın Hesna ERDEM'e; uyumlu ve anlayışlı davranışlarından dolayı sevgili Aycan ÖZKAN'a ve tüm çalışma arkadaşlarıma teşekkür ederim.

Tüm tez çalışmam süresince desteğini esirgemeyen, inanılmaz sabır ve hoşgörü gösteren eşime sonsuz teşekkür ederim.

Ayrıca Gazi Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Birimine (BAP:05/2003-07) ve DPT'ye(2001K120590) sağladıkları desteklerden dolayı teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET	iv
ABSTRACT	v
TEŞEKKÜR.....	vi
İÇİNDEKİLER	vii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ.....	ix
ŞEKİLLERİN LİSTESİ.....	x
SİMGELER VE KISALTMALAR	xv
1. GİRİŞ	1
2. FAZ GEÇİŞLERİ VE SPİN MODELLERİ	6
2.1. İkinci Derece Faz Geçişleri	6
2.2. Birinci Derece Faz Geçişleri.....	8
2.3. Spin Modelleri	11
2.3.1. Spin-1/2 Ising modeli	11
2.3.2. Spin-1/2 Ising modeli ve örgü gazı	12
2.3.3. Spin-1 Ising modeli.....	15
2.4. Termodinamik Nicelikler.....	20
2.4.1. İkinci derece faz geçişlerinde kritik davranış	23
2.4.2. Birinci derece faz geçişlerinde kritik davranış	24
2.5. Sonlu Örgü Ölçekleme Bağıntıları.....	25
3. MODEL	28
3.1. Cellular Automaton	28
3.2. Spin-1 Ising Modelde Creutz Cellular Automaton Algoritmaları	29

	Sayfa
3.2.1. Standart algoritma.....	33
3.2.2. Soğutma algoritması	35
3.2.3. Isıtma algoritması.....	36
4. BULGULAR VE TARTIŞMA	38
4.1. Ferromanyetik Bilineer Etkileşmeli BEG Modelin Taban Durumu ve Faz Tanımları	39
4.1.1. Taban durum konfigürasyonlarının tespit edilmesi	39
4.1.2. Ferromanyetik bilineer etkileşmeli BEG modelde faz tanımları	42
4.2. Ferromanyetik Bölgede ve F-S Faz Sınırı Civarındaki Hesaplamalar	45
4.2.1. İkinci derece $Q \rightarrow F$ faz geçişleri	46
4.2.2. Ardışık $Q \rightarrow F \rightarrow Q$ faz geçişleri	54
4.2.3. Tekrarlayan $Q \rightarrow F \rightarrow Q \rightarrow F$ faz geçişleri	58
4.2.4. Birinci derece $Q \rightarrow F$ faz geçişleri	66
4.2.5. $k=-0,5$ için (d,t) faz diyagramı	69
4.3. S-SQ ve F-SQ Faz Sınırları Civarındaki Hesaplamalar.....	71
4.3.1. Ardışık $Q \rightarrow F \rightarrow Q \rightarrow SQ$ faz geçişleri.....	75
4.3.2. Ardışık $Q \rightarrow F \rightarrow SQ$ faz geçişleri	82
4.3.3. $Q \rightarrow SQ$ faz geçişleri	88
5. SONUÇLAR	91
KAYNAKLAR	95
ÖZGEÇMİŞ	102

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 2.1. Termodinamik niceliklerin ilgili kritik üslerle karakterizasyonunu veren ifadeler	23
Çizelge 2.2. Kritik üs değerleri	24

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.1. İkinci derece faz geçişlerinde, düzen parametresi olasılık dağılımı $P(m)$ 'nin farklı sıcaklık bölgelerinde değişimi.....	7
Şekil 2.2. İkinci derece faz geçişlerinde, $P(m)$ olasılık dağılımı ve serbest enerjinin ($F(m)$) kritik nokta civarındaki değişiminin şematik gösterimi	8
Şekil 2.3. Birinci derece faz geçişlerinde, $P(m)$ olasılık dağılımı ve serbest enerjinin($F(m)$) faz geçiş noktası civarındaki değişiminin şematik gösterimi	9
Şekil 2.4. Spin-1/2 Ising model için a) Ferromanyetik taban durumları, b) Antiferromanyetik taban durumları	12
Şekil 2.5. $d=2$ boyutta örgü gazı konfigürasyonu	13
Şekil 2.6. Spin-1 Ising model için a) Ferromanyetik taban durumları, b) Antiferromanyetik taban durumları	15
Şekil 2.7. Blume Capel modelin standart ve soğutma algoritması kullanılarak elde edilen (kT_c/J , D/J) faz diyagramı	30
Şekil 2.8. $L=24$ örgü boyunda basit kübik örgüde a) standart algoritma b) soğutma algoritması ile hesaplanan düzen parametrelerin sıcaklıkla değişimi	32
Şekil 2.9. Soğutma algoritmasının genel yapısı	36
Şekil 4.1. $J = -1$, $K = D = 0$ parametre seti için taban durum konfigürasyonun belirlenmesinde göz önüne alınan birkaç spin düzenlenmesi ve H_l enerji değişimi	41
Şekil 4.2. Karışık düzende A ve B alt örgüleri	42
Şekil 4.3. 3-boyutta BEG modelin (d, k) faz uzayında taban durum Konfigürasyonları	43
Şekil 4.4. BEG modelin cellular automaton ile simülasyonu sonucunda tespit edilen faz geçiş türleri.....	44
Şekil 4.5. $d=0, -0,25, -0,5, -1$ ve $-1,5$ değerlerinde (k, t) faz diyagramları ...	46

Şekil	Sayfa
Şekil 4.6. $L=18'$ 'de, $k = 0$ ve $d = 2, 1, 0, -0,25, -0,5, -1, -1,5$ parametrelerinde a) m ve q düzen parametreleri b) Manyetik alınganlık c) İç enerji d) Öz ısı niceliklerinin sıcaklıkla değişimleri.....	47
Şekil 4.7. $L=18'$ 'de, $d=0$ ve $k=0$ 'da oluşan ikinci derece $Q \rightarrow F$ faz geçişinde, kritik sıcaklık civarında $P(m)$ olasılık dağılımının değişim	48
Şekil 4.8 $L=12, 16, 18$ ve $24'$ 'de hesaplanan Binder kümülanının sıcaklıkla değişimi a) $d=-0,25$ ve $k=0$ b) $d=-1$ ve $k=-0,60$	50
Şekil 4.9. Binder kümülanının sonlu örgü ölçeklemesi a) $d=-0,25, k=0$ b) $d=-1, k=-0,60$	51
Şekil 4.10. Düzen parametresi m 'nin sonlu örgü ölçeklemesi a) $d=-0,25, k=0$ b) $d=-1, k=-0,60$	52
Şekil 4.11. Manyetik alınganlık χ 'nin sonlu örgü ölçeklemesi a) $d=-0,25, k=0$ b) $d=-1, k=-0,60$	53
Şekil 4.12. $d=-0,25$ ve $k=0$ parametre seti için öz ısı C 'nin sonlu örgü ölçeklemesi a) $T < T_c$ b) $T > T_c$	53
Şekil 4.13. $L=18'$ 'de $d = -0,25$ için $k = -0,95, -0,94, -0,93, -0,90, -0,80, -0,40$ parametre değerlerinde a) m düzen parametresi b) q düzen parametresi c) Manyetik alınganlık niceliklerinin sıcaklıkla değişimleri.....	55
Şekil 4.14. $L=18'$ 'de $d = -0,25$ için $k = -0,95, -0,94, -0,93, -0,90, -0,80, -0,40$ parametre değerlerinde a) İç enerji b) Öz ısı niceliklerinin sıcaklıkla değişimleri.....	56
Şekil 4.15. $d=-0,25$ $k=-0,93$ 'de görülen ardışık $Q \rightarrow F \rightarrow Q$ faz geçişindeki yüksek sıcaklıktaki $Q \rightarrow F$ faz geçişine ait $P(m)$ olasılık dağılımının kritik sıcaklık civarındaki değişimi.....	57
Şekil 4.16. $d=-0,25, k=-0,93$ için görülen ardışık $Q \rightarrow F \rightarrow Q$ faz geçişindeki düşük sıcaklıktaki $F \rightarrow Q$ faz geçişine ait $P(m)$ olasılık dağılımının kritik sıcaklık civarındaki değişimi.....	58

Şekil	Sayfa
Şekil 4.17. $L=18'$ 'de $d = -1$ için $k = -0,68, -0,67, -0,66, -0,64, -0,60, -0,50$ parametre değerlerinde a) m düzen parametresi b) q düzen parametresi c) Manyetik alınganlık niceliklerinin sıcaklıkla değişimleri.....	59
Şekil 4.18. $d = -1, k = -0,66$ değerinde görülen tekrarlayan $Q \rightarrow F \rightarrow Q \rightarrow F$ faz geçişindeki yüksek sıcaklıktaki $Q \rightarrow F$ faz geçişine ait $P(m)$ olasılık dağılımının kritik sıcaklık civarındaki değişimi.....	61
Şekil 4.19. $d = -1, k = -0,66$ 'da görülen tekrarlayan $Q \rightarrow F \rightarrow Q \rightarrow F$ faz geçişindeki düşük sıcaklıktaki birinci derece $Q \rightarrow F$ faz geçişine ait $P(m)$ olasılık dağılımının faz geçiş sıcaklığı civarındaki değişimi	62
Şekil 4.20. $d = -1, k = -0,66$ 'da görülen tekrarlayan $Q \rightarrow F \rightarrow Q \rightarrow F$ faz geçişindeki yüksek sıcaklıkta görülen ikinci derece $Q \rightarrow F$ faz geçişine ait a) Binder kümülanlarının sonlu örgü ölçeklemesi b) m düzen parametresinin sonlu örgü ölçeklemesi	63
Şekil 4.21. $d = -1, k = -0,66$ 'da görülen tekrarlayan $Q \rightarrow F \rightarrow Q \rightarrow F$ faz geçişindeki yüksek sıcaklıkta görülen ikinci derece $Q \rightarrow F$ faz geçişine ait a) Manyetik alınganlığın sonlu örgü ölçeklemesi b) Öz ısının $T > T_{c1}$ için sonlu örgü ölçeklemesi	64
Şekil 4.22. $d=-1, k=-0,67$ için Binder kümülanlarının sonlu örgü ölçeklemesi a) $T_{c2}(\infty)$ kritik sıcaklığında oluşan $F \rightarrow Q$ faz geçişine ait b) $T_{c1}(\infty)$ kritik sıcaklığında oluşan $Q \rightarrow F$ faz geçişine ait	65
Şekil 4.23. $d=-1, k=-0,67$ için m düzen parametresinin sonlu örgü ölçeklemesi a) $T_{c2}(\infty)$ kritik sıcaklığında oluşan $F \rightarrow Q$ faz geçişine ait b) $T_{c1}(\infty)$ kritik sıcaklığında oluşan $Q \rightarrow F$ faz geçişine ait	66
Şekil 4.24. $d = -2,5$ için a) m ve q düzen parametreleri b) Manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişimi.....	68
Şekil 4.25. $d = -2,5$ için a) İç enerji b) Öz ısının sıcaklıkla değişimi.....	68
Şekil 4.26. $d = -2,5$ ve $k = -0,14$ için düzen parametresi olasılık dağılımı $P_L(m)$ 'nin faz geçiş sıcaklığı civarında değişimi.....	69

Şekil	Sayfa
Şekil 4.27. $k=-0,5$ için (d,t) uzayında faz diyagramı	71
Şekil 4.28. $d = 0, 1$ ve 2 için elde edilen (k, t) faz diyagramları	72
Şekil 4.29. $d=0$ için a) m ve q düzen parametrelerinin b) Manyetik alinganlığın sıcaklıkla değişimi.....	73
Şekil 4.30. $d=0$ için a) İç enerjinin b) Öz ısının sıcaklıkla değişimi	74
Şekil 4.31. $L=18$ 'de $d = 0$ için $k = -1,01, -1,02, -1,03, -1,04$ ve $-1,08$ parametre değerlerinde alt örgü düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişimi	75
Şekil 4.32. $d=0$ için $k=-1,01, -1,02, -1,03, -1,04$ ve $-1,08$ parametre değerlerinde a) Manyetik alinganlığın b) Öz ısının sıcaklıkla değişimi.....	77
Şekil 4.33. $k = -1,04$ için $L=16, 18$ ve 24 kenar uzunluğuna sahip basit kübik örgülerde, düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişimleri.....	78
Şekil 4.34. $d=0$ ve $k=-1,01$ için a) $T_{c2}(\infty)$ 'de oluşan $F \rightarrow Q$ faz geçişine ait Binder kümülantının sıcaklıkla değişimi b) $T_{c1}(\infty)$ 'de oluşan $Q \rightarrow F$ faz geçişine ait Binder kümülantının sıcaklıkla değişimi c) $F \rightarrow Q$ faz geçişine ait Binder kümülantının ölçeklemesi d) $Q \rightarrow F$ faz geçişine ait Binder kümülantının ölçeklemesi	80
Şekil 4.35. $d=0$ ve $k = -1,01$ için düşük sıcaklıkta $T_{c2}(\infty)$ 'de oluşan $F \rightarrow Q$ faz geçişine ait a) m düzen parametresinin sonlu örgü ölçeklemesi b) Manyetik alinganlığın sonlu örgü ölçeklemesi	81
Şekil 4.36. $d=0$ ve $k=-1,01$ için yüksek sıcaklıkta $T_{c1}(\infty)$ 'de oluşan $Q \rightarrow F$ faz geçişine ait a) m düzen parametresinin sonlu örgü ölçeklemesi b) Manyetik alinganlığın sonlu örgü ölçeklemesi	82
Şekil 4.37. $L=18$ 'de $d=0$ için F -SQ faz sınırına yakın k değerlerinde düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişimi a) $k=-1$ ve $k=-1,16$ b) $k=-1,2$ c) $k=-1,28$ d) $k=-1,3$	84
Şekil 4.38. $L=18$ 'de $d=1$ için F -SQ faz sınırına yakın birkaç k değerinde manyetik alinganlığın sıcaklıkla değişimi	85

Şekil	Sayfa
Şekil 4.39. $L=18$ 'de $d=1$ için F-SQ faz sınırına yakın birkaç k değerinde a) İç enerji b) Öz ısının sıcaklıkla değişimi	85
Şekil 4.40. $d=1$ hattında $k = -1,3$ için farklı örgülerde düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişimleri	86
Şekil 4.41. $d=2$ ve $k=-1,34$ için yüksek sıcaklıktaki $Q \rightarrow F$ faz geçişine ait a) m düzen parametresinin sonlu örgü ölçeklemesi b) Manyetik alinganlığın sonlu örgü ölçeklemesi.....	87
Şekil 4.42. $d=2$ ve $k=-1,34$ için yüksek sıcaklıktaki $Q \rightarrow F$ faz geçişine ait öz ısının ölçeklemesi a) $T < T_{c1}$, b) $T > T_{c1}$	88
Şekil 4.43. $d = 1$ için $k = -1,4, -1,8$ ve -2 parametre değerlerinde alt örgü düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişimi.....	89
Şekil 4.44. $d=1$ için $k=-1,4, -1,8$ ve -2 parametre değerlerinde a) İç enerji b) Öz ısının sıcaklıkla değişimi.....	90

SİMGELER VE KISALTMALAR

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

Simgeler	Açıklama
T	Sıcaklık
T_c	Kritik Sıcaklık
T_t	Geçiş Sıcaklığı
d	Uzay boyutu
C	Öz ısı
α, α'	Öz ısı kritik üsleri
m	Manyetizasyon
β, β'	Manyetizasyon kritik üsleri
χ	Manyetik alınganlık
γ, γ'	Manyetik alınganlık kritik üsleri
ξ	Korelasyon uzunluğu
ν	Korelasyon uzunluğu kritik üssü
∞	Sonsuz
ε	İndirgenmiş sıcaklık
g_L	Binder kümülanı
q	Kuadrapol moment
J	Bilineer etkileşme parametresi
K	biquadratik etkileşme parametresi
D	Kristal alan parametresi
k_B	Boltzman sabiti
z	En yakın komşu sayısı
$\langle \rangle$	Beklenen değer veya ortalama

Kısaltmalar**Açıklama****BEG**

Blume Emery Griffiths

BC

Blume Capel

CA

Cellular Automaton

CCA

Creutz Cellular Automaton

BA

Bethe Yaklaşımı

MFA

Ortalama Alan Yaklaşımı

MC

Monte Carlo

TPCA

İki-parçacık küme yaklaşımı

RG

Renormalizasyon grup teorisi

CVM

Kümesel değişim metodu

MCRG

Monte Carlo renormalizasyon grup teorisi

1. GİRİŞ

Faz geçişleri, sıcaklık, basınç, manyetik alan veya elektrik alanı gibi sürücü parametrelerin etkisi sonucunda, sistemin sahip olduğu fazın değişmesi olayıdır. Faz geçişleri, sistemin makroskobik büyüklüklerinde görülen süreksizlik ve ani değişimlerle karakterize edilir. Faz geçiş olgusunun incelenmesi ve sistemin faz geçiş noktası civarındaki termodinamik davranışının ortaya konması amacıyla çeşitli mikroskobik modeller geliştirilmiştir. Ising model ferromanyetik sistemlerde faz geçişlerinin anlaşılması amacıyla önerilen en basit modeldir. Spin-1/2 Ising modelin, 2-boyutta dış manyetik alanın olmadığı durumdaki analitik çözümü Onsager tarafından gerçekleştirilmiş[1], diğer durumlarda ise modelin tam çözümü yapılamamıştır. Üç spin durumlu Ising model, spin-1 Ising model olarak bilinir ve spin-1/2 Ising modelden daha geniş uygulama alanına ve zengin bir faz diyagramına sahiptir. Bilineer (J), biquadratik (K) etkileşme enerjili ve kristal alan parametrelili (D) spin-1 Ising model Blume-Emery-Griffiths (BEG) model olarak bilinmektedir[2]. Model, en yakın komşular ve ikinci en yakın komşular arasındaki etkileşmelerin alınması ve (J, K, D) parametre setinin farklı değerlerine bağlı olarak farklı faz yapısına sahip yeni sistemlerin tanımlanmasına imkan vermektedir. BEG model, ilk olarak $\text{He}^3\text{-He}^4$ karışımlarındaki faz yapılarının ortaya konmasında uygulanmıştır. Daha sonra, katı-sıvı-gaz karışımları[3-4], mikroemulsiyonlar[5], yarı-iletken alaşımlar[6] gibi karışık faz yapılarına sahip olan fiziksel sistemlerin faz yapılarının araştırılmasında geniş bir uygulama alanı bulmuştur.

BEG modelin Bethe örgü ve bal beteği örgüde[7-9] tam çözümü bulunmakla birlikte, 2 boyutta farklı örgülerde ve 3-boyutta tüm parametre uzayında tam çözümü yapılamamıştır. Bu nedenle, modelin farklı yöntemlerle incelenmesi, ortaya konan sonuçların doğruluğunun test edilmesi açısından büyük önem taşımaktadır.

Bu çalışmada, 3-boyutta, ferromanyetik bilineer etkileşmeli BEG modelin faz yapısının ortaya konması amacıyla cellular automaton modeli kullanılmıştır.

Cellular automaton(CA) doğal sistemler için matematiksel bir modeldir. CA'da uzay ve zaman kesikli değerlere sahiptir ve sonsuza kadar genişletilebilen düzenli bir hücre örgüsünden oluşur. Mikroskobik seviyede her bir konum kristal örgüdeki spin bileşeni gibi kesikli ölçülebilirliklere veya atom tiplerine karşılık gelen noktaları temsil edebilir. Bu yüzden dinamik Ising model ve diğer spin sistemleri basit bir CA'dır. Daha genel olarak makroskobik seviyede bir CA'da, her hücre birçok molekül içeren bir bölgeyi temsil edebilir ve onun değeri birkaç mümkün farklı fazdan birine karşılık gelebilir. Ising modelin ve çeşitli fiziksel problemlerin CA olarak simülasyonu Vichniac tarafından önerilmiştir[10]. Vichniac'ın Ising model için önerdiği kural Pomeau ve Herrmann tarafından Q2R cellular automaton olarak geliştirilmiştir[11,12]. Q2R algoritmasında sistemi tanımlayan Hamiltoniyen spin-spin etkileşme enerjisinden oluşmaktadır. Q2R algoritması ile toplam enerjinin korunduğu mikrokantonik bir küme oluşturulmakta, yani simülasyon süresince herhangi bir spin değişiminde iç enerjinin korunduğu konfigürasyonlar üretilmektedir. Ancak, bu algoritmada iç enerji bütün simülasyon süresince sabit kaldığından dolayı öz ısının iç enerjinin dalgalanmalardan hesaplanması mümkün olmamaktadır. Bu kısıtlama iç enerji ve spine eşlenik momentuma karşılık gelen kinetik enerjinin toplamının korunduğu Creutz algoritması ile ortadan kalkmaktadır[13]. Creutz algoritmasında herhangi bir spin değişimi sonucunda Ising enerji ve kinetik enerji birlikte değişmekte, ancak toplam enerji sabit kalmaktadır. Bunun sonucu olarak, Creutz algoritması kullanılarak üretilen konfigürasyonlardan, iç enerjiye bağlı termodinamik nicelikleri hesaplamak mümkün olabilmektedir. Diğer taraftan bu algoritma, yaygın Monte Carlo yöntemlerinden on kat daha hızlı çalışmakta ve yüksek kalitede sayı üretmesine ihtiyaç duymamaktadır. Bu algoritma kullanılarak dış alanın yokluğunda iki, üç ve daha yüksek boyutlarda en yakın komşu etkileşmeler için yapılan Ising model hesaplamaları, Creutz CA (CCA)'ın Ising modeli taklit etmekte oldukça başarılı olduğunu göstermiştir[16]. Bu algoritmanın farklı

varyasyonları dış alan[14], ikinci-derece en yakın komşu etkileşme[15], dört spin etkileşme enerjisi[17] içeren Ising model problemlerine uygulanmış ve diğer yöntemlerle yapılan hesaplamaları destekleyen sonuçlar vermiştir. Ayrıca, Creutz algoritmasını temel alan bir algoritma iki boyutlu Blume Capel model için oluşturularak (standart algoritma) belli bir parametre aralığında modelin ikinci derece faz geçiş bölgesindeki davranışı test edilmiş ve sonuçların Ising model kritik davranışı ile uyumlu olduğu gösterilmiştir[18]. Benzer şekilde, algoritmanın ikinci derece faz geçişlerinin incelenmesindeki başarısı, 2-boyutlu spin-1 Ising modelin cellular automaton ile simülasyonlarıyla da ortaya konmuştur[19,20]. Son yıllarda yapılan çalışmalarda, 3-boyutlu BC modelin faz yapısı incelenerek, standart algoritmanın birinci derece faz geçişlerinde ortaya çıkan yarı kararlı durumların elde edilmesinde uygun olmadığı tespit edilmiş ve standart algoritmanın temeline dayanan soğutma algoritması adı verilen yeni bir algoritma geliştirilmiştir[21-23].

Çalışma kapsamında, 3-boyutta, ferromanyetik bilineer etkileşmeli Blume-Emery-Griffiths (BEG) modelin (J , K , D) parametre uzayında sahip olduğu faz yapılarının incelenmesi ve yeni faz bölgelerinin olup olmadığının ortaya konması amaçlanmıştır. Bu amaç doğrultusunda, soğutma algoritması kullanılarak yapılan çalışmalarda, belirli (J , K , D) parametre değerlerinde ortaya çıkan tekrarlanan faz geçişlerinin elde edilmesinde algoritmanın yetersiz kaldığı tespit edilerek, hesaplamalarda tez kapsamında geliştirilen ısıtma algoritması kullanılmıştır[24].

Literatürde yer alan ortalama alan yaklaşımı(MFA) ile yapılan çalışmalarda[25], 3-boyutta $K < 0$ parametre bölgesinde, BEG modelin oldukça zengin bir faz yapısına ve global faz diyagramının çeşitli ardışık ve tekrarlayan faz geçişleri(re-entrant ve double re-entrant) ile ferrimanyetik faz içeren bölgelere sahip olduğu bildirilmektedir. Renormalizasyon grup teorisi(RG)[26], Monte Carlo renormalizasyon grup teorisi(MCRG)[27] ve kümesel değişim metodu(CVM)[28] kullanılarak yapılan hesaplamalar

sonucunda modelin, ferrimanyetik faz bölgelerini içerdiği sonucu desteklenmektedir. Benzer şekilde, modelin faz yapısının bir özelliği olan ve FeBr_2 gibi deneysel sistemlerde görülen ardışık ve tekrarlayan davranışın ve çoklu kritik noktadaki faz yapısının araştırılması literatürde ilgi gören çalışmalar arasındadır. $-1 < K/J < 0,18$ parametre aralığında elde edilen faz diyagramlarında, ferromanyetik fazda birinci derece faz geçiş çizgisinin sonlandığı nokta olarak tanımlanan kritik son noktanın varlığı ortalama alan yaklaşımı ile yapılan hesaplamalar sonucunda ortaya konmakta, benzer sonuçlar RG[26] çalışmaları ile desteklenmektedir. Ancak, MCRG teorisi[27] ve CVM[28] ile yapılan çalışmalarda, faz diyagramının, kritik son nokta içermediği sadece üçlü kritik noktaya sahip olduğu bildirilmektedir. Son yıllarda yapılan iki-parçacık küme yaklaşımı(two-particle cluster approximation, TPCA)[29] hesaplamaları da CVM ve MCRG teorisi sonuçlarını destekler yöndedir.

Diğer taraftan, ferromanyetik bilineer etkileşmeli BEG modelin tüm (J, K, D) parametre uzayında sahip olduğu faz diyagramı Bethe yaklaşımı hesaplamaları sonucu ortaya konmuştur[30]. Bu çalışmada, çeşitli ardışık ve tekrarlayan faz geçişlerinin varlığı bildirilmektedir. Aynı zamanda, ardışık ve tekrarlayan faz geçişleri, basit kübik örgüde belirli parametre değerlerinde yapılan Monte Carlo simülasyonları ile doğrulanmaktadır[30]. Bu çalışma sonucunda, tekrarlayan faz geçişlerindeki en düşük sıcaklıkta görülen geçiş hariç diğer tüm ardışık ve tekrarlayan faz geçişlerinin sürekli olduğu bildirilmektedir. Ancak, Bethe yaklaşımı ile ortaya konan bu sonuçların ortalama alan yaklaşımı[25] ve TPCA[29] kullanılarak yapılan çalışmalar ile uyuşmadığı görülmektedir. Bu çalışmalarda, tekrarlayan faz geçişlerindeki en düşük sıcaklıktaki geçişlerin birinci derece faz geçişleri olmaları ile birlikte orta geçişlerinde birinci derece faz geçişleri olabileceği ortaya konmaktadır.

Bu çalışmada, 3-boyutta BEG modelin $-3 < D/J < 3$ ve $-2 \leq K/J \leq 0$ parametre bölgesinde sahip olduğu faz yapısının ortaya konması

hedeflenmektedir. Hesaplamalar, $-3 < D/J < 3$ ve $-2 \leq K/J \leq 0$ parametre bölgesinde $L=12, 16, 18$ ve 24 kenar uzunluğuna sahip basit kübik örgüler üzerinde ısıtma algoritması kullanılarak yapılmıştır. Tüm hesaplamalarda, periyodik sınır şartları kullanılarak, spin başına ve $1,000,000$ cellular automaton zaman adımı üzerinden ortalamalar alınmıştır. Modelin faz yapısının tespit edilmesi amacıyla, düzen parametreleri (m ve q), manyetik alınganlık(χ), iç enerji(U) ve öz ısı(C) niceliklerinin sıcaklıkla değişimleri ile m düzen parametresi olasılık dağılımı($P(m)$) incelenmiştir. Ayrıca ikinci derece faz geçişlerinin olduğu (J, K, D) parametre setlerinde sonlu örgü ölçekleme teorisi ile ν, β, γ ve α kritik üsleri tespit edilerek modelin evrensellik sınıfı belirlenmiştir.

2. FAZ GEÇİŞLERİ VE SPİN MODELLERİ

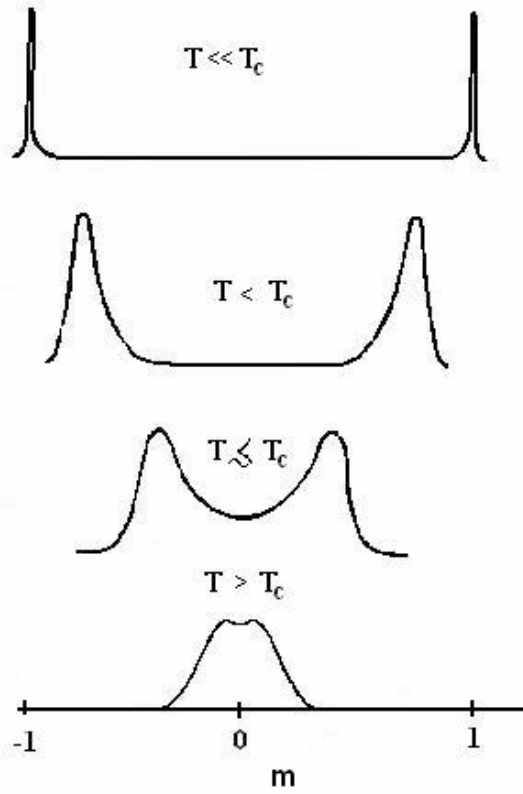
Doğada bir çok sistem, belirli şartlar altında bir faz geçişi gösterir. Faz geçişleri, sıcaklık, basınç, manyetik veya elektrik alanı gibi sürücü parametrelerin etkisi sonucunda, sistemin sahip olduğu fazın değişmesi olayıdır. XIX. yüzyılda, karbondioksitte sıvı ve buhar fazın birbirinden ayırt edilemez duruma geldiği özel bir noktanın tespit edilmesinden sonra, Pierre Curie tarafından demirdeki ferromanyetik geçişin varlığının ortaya konması ile faz geçişleri olayı dikkate değer bir çalışma alanı olmuştur. Fiziksel sistemlerin anlaşılmasında, sistemdeki faz yapısının bilinmesi büyük önem taşımaktadır. Sistemdeki faz geçiş derecesi, geçiş noktasında termodinamik potansiyel ve türevlerinin davranışı ile ilgilidir. n-inci derece faz geçişi, termodinamik potansiyelin n-inci derece türevinde ortaya çıkan sürekli ve süreksiz davranış ile karakterize edilir.

2.1. İkinci Derece Faz Geçişleri

İkinci derece faz geçişlerinde, termodinamik potansiyelin birinci derece türevleri sürekli davranış sergilerken, ikinci derece türevlerinden en az birinde süreksizlik ortaya çıkar. Fe, Ni gibi manyetik malzemelerde, kritik sıcaklıkta paramanyetik fazdan ferromanyetik faza geçiş ikinci derece bir faz geçiştir. Bu tür sistemlerde, paramanyetik ve ferromanyetik fazı karakterize eden düzen parametresi manyetizasyondur. Manyetizasyon ve iç enerjide görülen sürekli davranışa, manyetik alınganlık ve öz ısıda görülen ıraksama eşlik eder. Sistemdeki bu tür ıraksamalar kritik üslerle karakterize edilir. İkinci derece faz geçişlerinin karakteristik bir diğer özelliği ise, korelasyon uzunluğunun faz geçiş noktasında sonsuza gitmesidir. Simülasyon çalışmalarının sonlu sistemlerde yapılabilmesi zorunluluğu, ikinci derece faz geçişlerinde beklenen sonsuz korelasyon uzunluğunun örgü boyu ile sınırlanmasını beraberinde getirmektedir. Bunun sonucu olarak, sonsuz

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

Faz geiş derecesini tayin etmek için çoęunlukla kullanılan metotlardan bir dięeri, düzen parametresi olasılık dağılımının incelenmesidir[31-33]. Şekil 2.1’de, ikinci derece faz geişlerinde, düzen parametresi olasılık dağılımı $P(m)$ ’nin farklı sıcaklık bölgelerinde deęişimi verilmektedir[31].



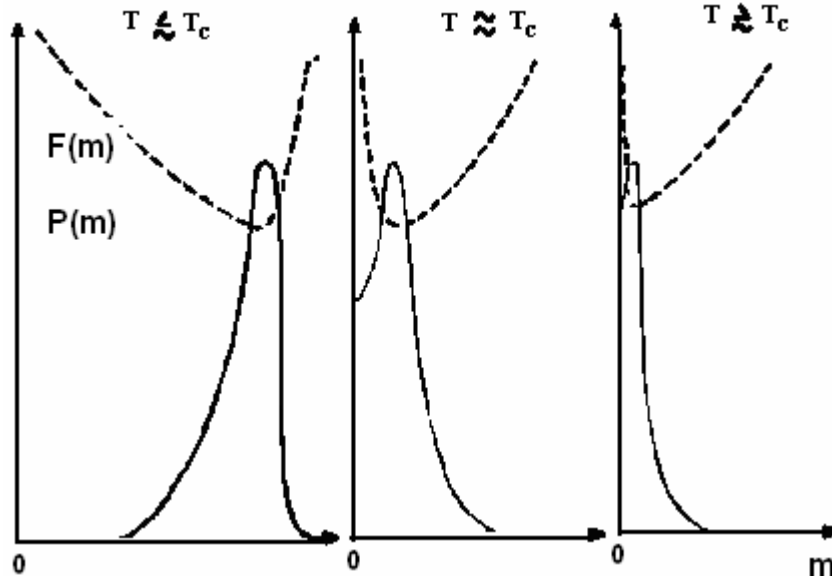
Şekil 2.1. İkinci derece faz geişlerinde, düzen parametresi olasılık dağılımı $P(m)$ ’nin farklı sıcaklık bölgelerinde deęişimi[31].

Şekilde görüldüğü gibi, düşük sıcaklıkta, düzeni gösteren iki pik, sıcaklık arttıkça birbirine yaklaşır. Faz geiş noktasında, yükseklikleri birbirine eşit iki pik görülürken, faz geiş noktasını geçtiğinde ($T > T_c$), $P(m)$ olasılık dağılımı $m=0$ civarında tek pik halini alır. Bu durum ise sistemdeki düzensizliğe karşılık gelmektedir.

Düzen parametresi olasılık dağılımı ile serbest enerji arasındaki fonksiyonel ilişki,

$$F(m) = -k_B T \ln P(m) \quad (2.1)$$

ifadesi ile verilir[31]. Şekil 2.2’de, m düzen parametresine sahip sonlu bir sistemde $P(m)$ olasılık dağılımı ve düzen parametresinin bir fonksiyonu olarak serbest enerjinin değişimi $[0, m]$ aralığında şematik olarak verilmektedir. Düzen parametresinin $\pm m$ değerleri için, $P(m)$ olasılık dağılımının tamamı $m=0$ çizgisine göre yansımaları alınarak elde edilebilir. Şekle göre, faz geçiş noktası civarında $P(m)$ tek pike sahiptir ve bu tür faz birinci derece faz geçişlerinin karakteristiği olan yarı kararlı (metastable) durumlar ortaya çıkmamaktadır.



Şekil 2.2. İkinci derece faz geçişlerinde, $P(m)$ olasılık dağılımı ve serbest enerjinin ($F(m)$) kritik nokta civarındaki değişiminin şematik gösterimi[31].

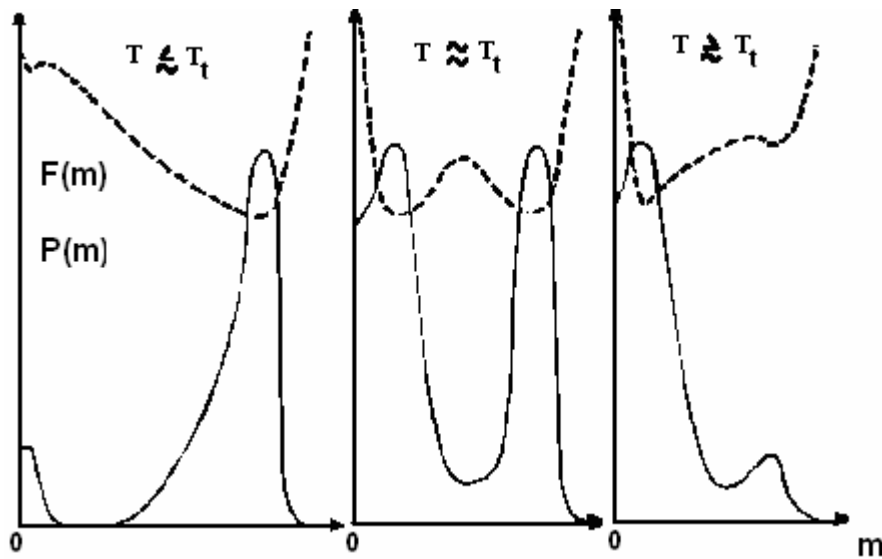
2.2. Birinci Derece Faz Geçişleri

Termodinamik limitte, termodinamik potansiyelin birinci türevlerinden en az birinde görülen süreksiz davranış, faz geçişinin birinci derece olduğunu gösterir. Termodinamik potansiyelin ikinci derece türevlerinde ise tipik δ -

fonksiyonu tekilliği gözlenir. H_2O 'da görülen buz-su, su-buhar geçişleri birinci derece faz geçişleridir.

Birinci derece faz geçişlerinde, düzen parametresi ve iç enerjide görülen süreksizlik, manyetik alınganlık ve öz ısıda δ -fonksiyonu tekilliğinin ortaya çıkmasına neden olur. Diğer taraftan, düzen parametresi ve iç enerjinin sıcaklıkla değişiminin S-şekli yapısında olduğu durum da, birinci derece faz geçişinin bir göstergesidir[34-37]. Birinci derece faz geçişleri için ayırt edici bir özellik faz geçiş noktasında yarı kararlı durumların ortaya çıkmasıdır. Ayrıca, faz geçiş noktasında oluşan bu yarı kararlı durumların S-şekli yapısının oluşmasına neden olduğu bilinmektedir[37].

Birinci derece faz geçişlerinde, geçiş bölgesinde yarı kararlı durumların oluşması sonucunda, bu bölgede serbest enerji iki minimumlu bir yapıya sahiptir. Bu minimumlardan biri, sistemin düzensiz durumda, diğeri ise düzenli durumda sahip olduğu serbest enerjiyi tanımlar. Şekil 2.3'de, birinci derece faz geçişlerinde düzen parametresi olasılık dağılımı $P(m)$ ve serbest enerji $F(m)$ 'nin fonksiyonel formu görülmektedir[31].



Şekil 2.3. Birinci derece faz geçişlerinde, $P(m)$ olasılık dağılımı ve serbest enerjinin($F(m)$) faz geçiş noktası civarındaki değişiminin şematik gösterimi[31].

Düzen parametresi olasılık dağılımı $P(m)$, yarı kararlı durumların olduğu faz geçiş bölgesinde iki pike sahiptir ve $T \sim T_c$ noktasında $P(m)$ olasılık dağılımındaki iki pikin yüksekliği birbirine eşittir. Buna göre, birinci derece faz geçişlerinde, geçiş noktasında, her iki faz bir arada (co-existence) eşit olasılıkla bulunur. Benzer davranış serbest enerji olasılık dağılımında da görülmektedir. Geçiş bölgesinde $F(m)$ iki minimuma sahiptir.

Bilgisayar simülasyonlarının sonlu büyüklükteki örgülerde gerçekleşmesi nedeniyle hem birinci derece hem de ikinci derece faz geçişlerinde geçiş noktasında sonlu pikler görülür[31,38]. Bu durumda, pik yüksekliği örgü boyuna bağlı olarak artar ve tepe noktası örgü büyüklüğüne bağlı olarak kayar. Pik yüksekliğinin değişmesi ve tepe noktasındaki kaymalar, sistemdeki faz geçiş derecesi ve kritik üstler hakkında bilgi verir. Birinci derece faz geçişlerinde, manyetik alınganlık ve öz ısı, yüksekliği hacim ile değişen, hacim büyüdükçe darlaşarak sonsuz hacim limitinde δ -fonksiyonuna dönüşen bir fonksiyon şeklindedir. Birinci derece faz geçişlerinde ortaya çıkan tekilliklerin, ikinci derece faz geçişlerinde olduğu gibi kritik üstlerle karakterize edilmesi söz konusu değildir. Birinci derece faz geçişlerinde, termodinamik büyüklüklerdeki tekil davranışlar, sistem hacmi ile ilişkilidir[32-33,39-45].

Faz geçiş olgusunun incelenmesi ve sistemin faz geçiş noktası civarındaki davranışının ortaya konması amacıyla çeşitli mikroskobik modeller geliştirilmiştir. Faz geçişlerinin, sistem parçacıkları arasındaki etkileşimlerin bir sonucu olduğu göz önüne alındığında, oluşturulacak mikroskobik modelde parçacıklar arasındaki etkileşmelerin göz önüne alınması yeterlidir. Faz geçişlerinin incelenmesi amacıyla yapılan pek çok çalışmada böyle bir yapı ele alınarak, Ising model, Heisenberg model, XY model gibi spin modelleri ortaya konmuştur. Ferromanyetik sistemlerin faz yapılarının incelenmesi amacıyla konan en basit spin modeli olan spin-1/2 Ising model ve tez çalışması kapsamında incelenen, spin-1/2 Ising modelden daha geniş bir

uygulama alanına ve zengin bir faz yapısına sahip olan spin-1 Ising model takip eden bölümde açıklanmaktadır.

2.3. Spin Modelleri

Fiziksel sistemlerin faz yapılarının anlaşılması kuramsal ve deneysel çalışmalar açısından büyük önem taşır. Faz geçişi olayının incelenmesi ve sistemin faz geçiş noktasındaki davranışlarının ortaya konması amacıyla çeşitli modeller geliştirilmiştir. Özellikle, düzenli-düzensiz geçişlerin değişik modellerde gerçekleşmesi sağlanarak bu modellerin kritik davranışları incelenmiştir. Ising model, manyetik sistemlerde görülen faz geçişinin anlaşılması amacıyla önerilen en basit modeldir. Ferromanyetik ve antiferromanyetik sistemlerin bu model ile karakterizasyonundan sonra, daha karmaşık faz yapılarına sahip sistemlerin faz yapılarının anlaşılması amacıyla farklı spin modelleri ortaya konmuştur.

Spinin n -boyutlu birim vektörlerle tanımlandığı model, genel olarak $O(n)$ modeli olarak bilinir ve $n=1$ Ising modeli, $n=2$ XY modeli, $n=3$ klasik Heisenberg modeli şeklinde tanımlanır. $n \rightarrow \infty$ limitinde ise küresel modeller elde edilir. İlgilenilen modele göre, S_i spin değişkeni kesikli veya sürekli değerler alır. Spin-1/2 Ising modelinde, $S_i = \pm 1$ olmak üzere iki farklı değere sahiptir. $S_i = \pm 1, 0$ olmak üzere üç durumlu Ising modeli spin-1 Ising modeli olarak bilinir.

2.3.1. Spin-1/2 Ising modeli

Ising modeli manyetik faz geçişlerinin incelenmesi amacıyla oluşturulan ilk modeldir. Modelin, 2-boyutta, dış manyetik alanın olmadığı durumdaki analitik çözümü Onsager tarafından gerçekleştirilmiştir[1], diğer durumlarda ise modelin tam çözümü yapılamamıştır. Ising modelinde, örgü noktası diye adlandırılan ve d -boyutta periyodik olarak dizilen N tane noktadan meydana

gelen bir sistem ele alınır. Her bir örgü noktasında, bir S_i spin değişkeni ($i=1, 2, \dots, N$) bulunur ve $S_i = +1$ (spin-yukarı) veya $S_i = -1$ (spin-aşağı) değerlerini alır. Verilen bir $\{S_i\}$ seti, tüm sistemdeki bir konfigürasyonu göstermek üzere, sistemin hamiltoniyeni,

$$H_i\{S_i\} = -\sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j - h \sum_i S_i \quad (2.2)$$

şeklinde ifade edilir. Burada J_{ij} , i . ve j . spinleri arasındaki etkileşme sabiti, h dış manyetik alandır. İfadedeki ilk toplam, en yakın komşu çiftleri üzerinden, ikinci toplam tüm örgü üzerinden alınır. Genel olarak $J_{ij} = J$ olduğu durum alınır. $J > 0$ ise tüm spinler aynı yöne yönelme eğilimi gösterir ve sistem ferromanyetik düzendedir. $J < 0$ durumunda ise, antiferromanyetik etkileşme mevcuttur. Şekil 2.4'de, ferromanyetik ve antiferromanyetik durumlar için, modelin taban durumları verilmiştir.

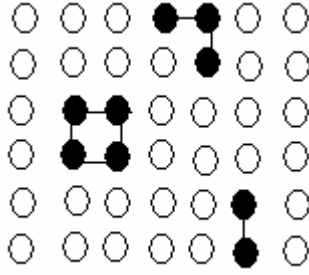


Şekil 2.4. Spin-1/2 Ising model için a) Ferromanyetik taban durumları, b) Antiferromanyetik taban durumları.

2.3.2. Spin-1/2 Ising modeli ve örgü gazı

Ferromanyetik sistemlerin yanı sıra, bir örgü gazı veya ikili alaşımlarda Ising modele eşdeğer olarak çözülebilmektedir[46-48]. Bir örgü gazı sisteminde, moleküllerin konumları rasgele değildir ve her bir atom örgünün bir noktasına yerleştirilir. Örgü üzerinde her bir noktada sadece bir molekül yer alabilir.

Şekil 2.5'de iki-boyutta bir örgü gazı konfigürasyonu görülmektedir. Burada, moleküller içi dolu halkalar ile, boşluklar ise içi boş halkalar ile gösterilmiştir.



Şekil 2.5. d=2 boyutta örgü gazı konfigürasyonu.

Molekül çiftlerinin $\phi(r)$ potansiyeli ile etkileştiği bir akışkanda, çift potansiyeli için en alışılmış örnek $\phi(r) = 4\epsilon[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6]$ ifadesi ile verilen Lennard-Jones potansiyelidir. Ancak, faz geçişleri potansiyelin ayrıntılarına bağlı değildir, potansiyelin kısa mesafe itici ve bir çekici kuyu olması yeterlidir. Bu yüzden, ϕ_{ij} , i-nci ve j-nci örgü noktalarına yerleşmiş atomlar arasındaki potansiyel enerji olmak üzere,

$$\phi_{ij} = \begin{cases} \infty & i=j \text{ ise} \\ -\phi & i \text{ ve } j \text{ en yakın komşu ise} \\ 0 & \text{diğer durumlar} \end{cases} \quad (2.3)$$

şeklinde ifade edilebilir ve bu potansiyel bir kare kuyu potansiyeli formundadır.

Örgünün her bir i noktasında atomun olup olmaması σ_i değişkeni ile temsil edilsin ve örgü noktası boş ise $\sigma_i = 0$, dolu ise $\sigma_i = +1$ olsun. Ayrıca, atomların kinetik enerjilerinin ihmal edilerek sadece en yakın komşu etkileşmelerinin olduğu durum göz önüne alınırsa, verilen bir $\{\sigma_i\}$ seti için enerji aşağıdaki ifade ile verilir,

$$E = -\phi \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j \quad (2.4)$$

Sistemin büyük kanonik üleşim fonksiyonu,

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp[(n\mu - E)/kT] \quad (2.5)$$

ifadesi ile verilir. İfadede $n = \sum_i \sigma_i$ ve μ kimyasal potansiyeldir.

Örgü gazı modelindeki σ_i değişkenleri ile Ising modeldeki S_i değişkenleri arasındaki,

$$\sigma_i = (1 + S_i)/2 \quad (2.6)$$

ifadesi gönüne alındığında, örgü gazında i-nci noktanın boş (dolu) olması durumu Ising modelde i-nci noktanın -1(spin-aşağı) (+1(spin-yukarı)) durumuna karşılık gelir. Buna göre, Eş.2.4'de verilen enerji ifadesi, Eş.2.6 ifadesi kullanılarak, spin değişkenine bağlı olarak,

$$E = -\frac{\phi}{4} \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - \frac{\phi}{4} \sum_{\langle ij \rangle} (S_i + S_j) + C \quad (2.7)$$

formunu alır. Burada, C, S_i 'den bağımsız bir sabittir. z her bir örgü noktasının en yakın komşularının sayısı olmak üzere, $\sum_{i,j} (S_i + S_j) = z \sum_i S_i$ dir ve bu toplam Eş.2.7'de kullanılacak olursa,

$$E = -\frac{\phi}{4} \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - \frac{1}{4} z \phi \sum_i S_i + C \quad (2.8)$$

ifadesi elde edilir. Buna göre, Eş.2.5 ile verilen örgü gazı üleşim fonksiyonu,

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \exp \left[\frac{\phi}{4kT} \sum_i S_i S_j + \frac{(2\mu + z\phi)}{4kT} \sum_i S_i \right] + C \quad (2.9)$$

olarak elde edilir. Burada, $\frac{\phi}{4} = J$ ve $(z\phi + 2\mu)/4 = h$ alınarak

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \exp \left[\frac{J}{kT} \sum_i S_i S_j + \frac{h}{kT} \sum_i S_i \right] \quad (2.10)$$

ifadesi ile verilen Ising model üleşim fonksiyonuna özdeş hale getirilebilir.

2.3.3. Spin-1 Ising modeli

Spin-1 Ising modelin hamiltoniyeni,

$$H_I = \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + K \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 S_j^2 + L \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^2 S_j + S_i S_j^2) + D \sum_i S_i^2 + h \sum_i S_i \quad (2.11)$$

ifadesi ile verilir. İfadedeki $\langle ij \rangle$ en yakın komşu çiftleri, J bilineer etkileşme sabiti, K bikuadratik etkileşme sabiti, D kristal alan etkileşme sabiti, L dipol-kuadrupol etkileşme parametresi ve h dış manyetik alandır. S_i spin değışkeni, +1, -1, 0 olmak üzere üç duruma sahiptir. Ferromanyetik ve antiferromanyetik durumlar için modelin taban durumları Şekil 2.6'da verilmektedir.

+ + - - 0 0	+ - 0 - 0 - 0 +
+ + - - 0 0	- + + 0 - 0 + 0
(a)	(b)

Şekil 2.6. Spin-1 Ising model için a) Ferromanyetik taban durumları, b) Antiferromanyetik taban durumları.

Model ilk olarak $\text{He}^3\text{-He}^4$ karışımlarındaki faz ayrılması ve süper akışkanların faz yapılarının incelenmesi amacıyla ortaya konmuştur[2]. Daha sonra katı-sıvı-gaz karışımları[3,4], mikroemulsiyonlar[5], yarı-iletken

alaşımlar[6] gibi karışık faz yapılarına sahip olan fiziksel sistemlerin faz yapılarının araştırılmasında geniş bir uygulama alanı bulmuştur.

Üç spin durumu ile tanımlanabilen pek çok fiziksel sistemin spin-1 Ising model ile modellenmesi mümkündür. Örneğin, He^3 - He^4 karışımlarında, He^4 bileşenleri $S_i=\pm 1$, He^3 bileşenleri ise $S_i=0$ durumu ile temsil edilebilir. Benzer şekilde, ikili ve üçlü alaşımların termodinamik özelliklerinin incelendiği modelde, spin değişkeninin $S_i=\pm 1, 0$ üç durumu, ikili alaşımlarda, alaşımdaki atomlardan ikisini ve sistemdeki boşlukları; üçlü alaşımlarda ise üç tür atomu temsil eder. Böyle bir sistem, N örgü noktasına ve her bir örgü noktasında bir moleküle sahip olan bir örgü gazı modeli ile ilişkilendirilebilir. Buna göre, $(\text{AB})_{1-x}\text{C}_{2x}$ veya $\text{A}_{1-x-y}\text{B}_x\text{C}_y$ formunda alınan üçlü alaşımların modellenmesinde, A atomunun $S_i = +1$, B atomunun $S_i = -1$ ve C atomunun $S_i = 0$ ile temsil edildiği durumda, A, B, C atomlarının temsil edildikleri spin değişkenleri ile i. hücreyi işgal etme olasılıkları $P_A(S_i)$, $P_B(S_i)$ ve $P_C(S_i)$ arasındaki ilişkiler[6],

$$P_A(S_i) = S_i(S_i + 1)/2 \quad (2.12)$$

$$P_B(S_i) = S_i(S_i - 1)/2 \quad (2.13)$$

$$P_C(S_i) = 1 - S_i^2 \quad (2.14)$$

ifadeleri ile ilişkilendirilebilir. Buna göre i. hücrenin A atomu tarafından işgal edilmesi durumunda, olasılıklar $P_A(1)=1$, $P_B(1)=0$, $P_C(1)=0$ değerini almaktadır. Böyle bir sistemin bir örgü gazı hamiltoniyeni ile tanımlanması mümkündür. Buna göre, hamiltoniyen,

$$\begin{aligned}
H = & J_{AA} \sum_{i,j} P_A(S_i)P_A(S_j) + J_{BB} \sum_{i,j} P_B(S_i)P_B(S_j) - J_{AB} \sum_{i,j} [P_A(S_i)P_B(S_j) + P_B(S_i)P_A(S_j)] \\
& - J_{AC} \sum_{i,j} [P_A(S_i)P_C(S_j) + P_C(S_i)P_A(S_j)] - J_{BC} \sum_{i,j} [P_B(S_i)P_C(S_j) + P_C(S_i)P_B(S_j)] \\
& - J_{CC} \sum_{i,j} P_C(S_i)P_C(S_j) - \mu_A \sum_i P_A(S_i) - \mu_B \sum_i P_B(S_i) - \mu_C \sum_i P_C(S_i) \quad (2.15)
\end{aligned}$$

formunda verilir. Eş.2.12, Eş.2.13 ve Eş.2.14 eşitlikleri yerine yazılarak, benzer terimler bir araya getirilirse,

$$J = (J_{AA} + J_{BB}) / 4 + J_{AB} / 2 \quad (2.16)$$

$$K = (J_{AA} + J_{BB}) / 4 - J_{AB} / 2 - J_{AC} / 2 + J_{AC} + J_{BC} - J_{CC} \quad (2.17)$$

$$L = (J_{AA} - J_{BB}) / 4 + (J_{AC} - J_{BC}) / 2 \quad (2.18)$$

$$h = z(J_{BC} - J_{AC}) + \mu_B - \mu_A \quad (2.19)$$

$$D = z(2J_{CC} - J_{BC} - J_{AC}) - \mu_B - \mu_A + 2\mu_C \quad (2.20)$$

olmak üzere,

$$H_I = J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + K \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 S_j^2 + L \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^2 S_j + S_i S_j^2) + D \sum_i S_i^2 + h \sum_i S_i \quad (2.21)$$

en genel BEG model Hamiltoniyen ifadesi elde edilir.

Blume-Capel (BC) modeli

Modelin hamiltoniyeni,

$$H_I = J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + D \sum_i S_i^2 + h \sum_i S_i \quad (2.22)$$

ifadesi ile verilir. BC model, 2- ve 3-boyutta ortalama alan yaklaşımı[49], etkin alan teorii[50-52], seri açılım metodu[53], self-consistent Ornstein-Zernike(SCOZ) yaklaşımı[54,55], renormalizasyon grup teorii[56], kümesel değişim metodu[57-59], Monte Carlo[34,60-63] ve cellular automaton[18,21-23] gibi çeşitli simülasyon ve yaklaşım yöntemleri kullanılarak incelenmiştir. BC model, ikinci derece faz geçişinin sonlandığı ve birinci derece faz geçişinin başladığı nokta olarak tanımlanan üçlü kritik noktaya sahiptir. 2-boyutta modelin sahip olduğu üçlü kritik noktanın değeri, Monte Carlo hesaplamaları ile $D/J = 1,98$ olarak verilmektedir[63]. Ayrıca, modelin cellular automaton ile simülasyonu ile $0 \leq D/J \leq 1,5$ parametre aralığında ikinci derece faz geçişine, $1,5 < D/J \leq 2$ parametre aralığında birinci derece faz geçişine sahip olduğu belirtilmektedir[18].

Modelin 3-boyutta üçlü kritik nokta değeri seri açılım metodu[53,64], etkin alan teorii[50] ve cellular automaton[21] ile $D/J=2,82$, kümesel değişim metodu[57] ile $D/J=2,817$ ve self-consistent Ornstein-Zernike yaklaşımı[54] ile $D/J=2,845$ olarak verilmektedir.

Blume-Emery-Griffiths (BEG) Model

Bilineer (J), bikuadratik (K) etkileşme enerjili ve kristal alan parametrelili (D) spin-1 Ising model Blume-Emery-Griffiths (BEG) model olarak bilinir[3]. Modelin hamiltoniyeni,

$$H_I = J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + K \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 S_j^2 + D \sum_i S_i^2 \quad (2.23)$$

ifadesi ile verilir. Genel olarak, $J < 0$ ise ferromanyetik, $J > 0$ ise antiferromanyetik bir durum sergiler. İfadedeki S_i spin değişkeni, +1, -1, 0

olmak üzere üç duruma sahiptir ve $\langle ij \rangle$ en yakın komşular üzerinden alınan toplamları gösterir.

BEG model, ilk olarak $\text{He}^3\text{-He}^4$ karışımlarındaki süperakışkan düzen ve faz ayrımının tanımlanması amacıyla ortaya konmuştur. Daha sonra, üç farklı durum ile karakterize edilebilen, katı-sıvı-gaz karışımları, mikroemülsiyonlar, yarıiletken alaşımlar gibi fiziksel sistemlerin faz yapılarının araştırılması, ardışık ve tekrarlayan faz geçişleri, kritik davranış ve çoklu kritik davranışın araştırılmasında temel bir model olmuştur.

Modelin 2-boyutta Bethe örgü ve bal betegi örgülerdeki tam çözümü bulunmakla birlikte[7-9], 2 boyutta farklı örgülerde ve 3-boyutta tüm parametre uzayında tam çözümü yapılamamıştır. Model, ortalama alan yaklaşımı [2-4,25,66,67], renormalizasyon grup teknikleri[26,67,68], etkin alan teorisi[69-71], Monte Carlo metotları[30,72-74], kümesel değişim metodu [28,75-78] gibi farklı yaklaşım ve simülasyon yöntemleri ile incelenmiştir. Bu metotlardan başka, Monte Carlo renormalizasyon grubu (MCGR)[27], transfer matris metodu[79], cellular automaton[19-24], Bethe yaklaşımı[30], seri açılım metodu[53] gibi tekniklerle de modelin faz yapısının araştırılması literatürde geniş bir yer tutmaktadır.

Literatürde yer alan ortalama alan yaklaşımı ile yapılan çalışmalarda[25], 3-boyutta $K < 0$ parametre bölgesinde, BEG modelin oldukça zengin bir faz yapısına sahip olduğu ve global faz diyagramının çeşitli ardışık ve tekrarlayan faz geçişleri ile ferrimanyetik faz içeren bölgelere sahip olduğu bildirilmektedir. Renormalizasyon grup teorisi[26], Monte Carlo renormalizasyon grup teorisi[27] ve kümesel değişim metodu[28] kullanılarak yapılan hesaplamalar sonucunda modelin, ferrimanyetik faz bölgelerini içerdiği sonucu desteklenmektedir. Benzer şekilde, modelin faz yapısının bir özelliği olan ve FeBr_2 gibi deneysel sistemlerde görülen ardışık ve tekrarlayan faz geçişi davranışının ve çoklu kritik noktadaki faz yapısının araştırılması literatürde ilgi gören çalışmalar arasındadır. $-1 < K/J < 0,18$

parametre aralığında elde edilen faz diyagramlarında, ferromanyetik fazda birinci derece faz geçiş çizgisinin sonlandığı nokta olarak tanımlanan kritik son noktanın varlığı ortalama alan yaklaşımı ile yapılan hesaplamalar sonucunda ortaya konmakta, benzer sonuçlar renormalizasyon grup teorisi çalışmaları ile desteklenmektedir. Ancak, Monte Carlo renormalizasyon grup teorisi[27] ve kümesel değişim metodu[28] ile yapılan çalışmalarda, faz diyagramının, kritik son nokta içermediği sadece üçlü kritik noktaya sahip olduğu bildirilmektedir. Son yıllarda yapılan iki-parçacık küme yaklaşımı(TPCA)[29] hesaplamaları da kümesel değişim metodu ve Monte Carlo renormalizasyon grup teorisi sonuçlarını destekler yöndedir.

Diğer taraftan, ferromanyetik bilineer etkileşmeli BEG modelin tüm (J, K, D) parametre uzayında sahip olduğu faz diyagramı Bethe yaklaşımı hesaplamaları sonucu ortaya konmuştur[30]. Bu çalışmada, çeşitli ardışık ve tekrarlayan faz geçişlerinin varlığı bildirilmektedir. Aynı zamanda, ardışık ve tekrarlayan faz geçişleri, basit kübik örgüde belirli parametre değerlerinde yapılan Monte Carlo simülasyonları ile doğrulanmaktadır[30]. Bu çalışma sonucunda, ardışık ve tekrarlayan faz geçişlerindeki en düşük sıcaklıkta görülen geçiş hariç diğer tüm tekrarlayan faz geçişlerinin sürekli olduğu bildirilmektedir. Ancak, Bethe yaklaşımı ile ortaya konan bu sonuçların ortalama alan yaklaşımı[25] ve iki-parçacık küme yaklaşımı[29] kullanılarak yapılan çalışmalar ile uyuşmadığı görülmektedir. Ortalama alan yaklaşımı ve iki-parçacık küme yaklaşımı çalışmaları, tekrarlayan faz geçişlerindeki en düşük sıcaklıktaki geçişlerin birinci derece faz geçişleri olmaları ile birlikte orta geçişlerinde birinci derece faz geçişleri olabileceği bildirilmektedir.

2.4 Termodinamik Nicelikler

d-boyutta N örgü noktasına yerleştirilen S_i spin değişkeninden oluşan bir sistemin enerjisi,

$$H\{S_i\} = H_0\{S_i\} + H_1\{S_i\} \quad (2.24)$$

formundadır. Burada, $H_0\{S_i\}$, spinler arasındaki etkileşmelerden, $H_1\{S_i\}$ ise manyetik alan ile spinler arasındaki etkileşmeden gelen katkıyı göstermektedir. Buna göre, termodinamik nicelikler, enerjisi $H\{S_i\}$ olan tüm mümkün $\{S_i\}$ spin konfigürasyonları üzerinden yazılacak ortalama fonksiyonu yardımı ile elde edilebilir. Böyle bir sistem için, ortalama fonksiyonu,

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \exp(-H\{S_i\}/k_B T) \quad (2.25)$$

ifadesi ile verilir. İfadedeki toplam, mümkün olan tüm spin konfigürasyonları, $\{S_i\}$, üzerinden alınır. S_i spin değişkeni, T sıcaklık, k_B Boltzman sabitidir. Sistemin serbest enerjisi, ortalama fonksiyonunun logaritması ile elde edilir ve

$$F = -k_B T \ln Z \quad (2.26)$$

formundadır. Termodinamik büyüklükler, serbest enerjinin sıcaklık ve dış manyetik alana göre türevlerinden elde edilebilir. Spin başına manyetizasyon, m manyetik alan ve N toplam spin sayısı olmak üzere,

$$m = \frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial h} \quad (2.27)$$

olarak tanımlanır ve Eş.2.25 ve Eş.2.26 ifadeleri kullanıldığında spin başına manyetizasyon için,

$$m = \frac{1}{N} \sum_i S_i \quad (2.28)$$

olarak elde edilir. Benzer şekilde, spinlerin dalgalanmasının bir ölçüsü olan manyetik alınganlık,

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial h} = \frac{1}{Nk_B T} \langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 \quad (2.29)$$

ifadesi ile tanımlanır. Spin-spin korelasyon fonksiyonu,

$$\Gamma(x_i) = \langle S(x_i)S(0) \rangle - \langle S(0) \rangle^2 \quad (2.30)$$

şeklinde tanımlanır ve korelasyon fonksiyonun manyetik alınganlık ile ilişkisi,

$$\chi = \frac{1}{k_B T} \sum_i \Gamma(x_i) \quad (2.31)$$

şeklinde dir. Termodinamik büyüklüklerden diğer bir grup ise, T sıcaklık parametresine göre alınan türevlerden elde edilir. Sistemin iç enerjisi, hamiltoniye nin beklenen değeri olarak tanımlanır ve serbest enerjinin T sıcaklık parametresine göre türevi cinsinden,

$$U = -T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{F}{T} \right) \quad (2.32)$$

$$= \langle H \rangle$$

olarak bulunur. Serbest enerjinin ikinci türevi ise enerjideki dalgalanmanın bir ölçüsü olan öz ısıyı tanımlar. Öz ısının iç enerji ile olan ilişkisi,

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} \quad (2.33)$$

$$= \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2$$

olarak verilir.

2.4.1. İkinci derece faz geçişlerinde kritik davranış

Termodinamik niceliklerin kritik nokta civarındaki davranışları, $\varepsilon = (T - T_c)/T_c$ ifadesi ile verilen indirgenmiş sıcaklığın üstel fonksiyonu olarak verilebilir. Termodinamik niceliklerin, kritik nokta civarındaki davranışlarını tanımlayan bu üslere “kritik üs” adı verilir. Çizelge 2.1’de termodinamik nicelikler ve ilgili kritik üsler arasındaki ilişkiler özetlenmiştir. Tanımlanan kritik üsler, α , β , γ ve ν değerleri genel olarak, kritik sıcaklığın altında ve üstünde aynı değerleri alırlar(Çizelge 2.2).

Çizelge 2.1. Termodinamik niceliklerin ilgili kritik üslerle karakterizasyonunu veren ifadeler.

Kritik üs	Nicelik	İlişki
β	Manyetizasyon	$M \sim (-\varepsilon)^\beta \quad \varepsilon \rightarrow 0^-$ $M \sim (\varepsilon)^{\beta'} \quad \varepsilon \rightarrow 0^+$
γ	Manyetik alınganlık	$k_B T \chi \sim (\varepsilon)^{-\gamma} \quad \varepsilon \rightarrow 0^+$ $k_B T \chi \sim (-\varepsilon)^{-\gamma'} \quad \varepsilon \rightarrow 0^-$
α	Öz ısı	$C \sim (\varepsilon)^{-\alpha} + b^+ \quad \varepsilon \rightarrow 0^+$ $C \sim (-\varepsilon)^{-\alpha'} + b^- \quad \varepsilon \rightarrow 0^-$
ν	Korelasyon uzunluğu	$\xi \sim (\varepsilon)^{-\nu} \quad \varepsilon \rightarrow 0^+$ $\xi \sim (-\varepsilon)^{-\nu'} \quad \varepsilon \rightarrow 0^-$

Termodinamik niceliklerin kritik davranışını veren üstel ifadelerde kullanılan bu üsler evrensel bir özellik taşır. Termodinamik niceliklerin davranışlarının aynı kritik üslerle tanımlandığı farklı fiziksel sistemler, bir evrensellik sınıfı içindedirler. Bu sistemlere en yaygın örnek olarak, ferromanyetik sistemleri modelleyen Ising spin sistemleri ile ikili alaşımlar gösterilebilir.

Faz geçişlerinin tanımlarında, kritik üsleri dolayısıyla evrensellik sınıfını belirleyen, sistemin hamiltoniyeni veya örgü uzunluğu değildir. Sistemin evrensellik sınıfı, sistemin uzaysal boyutu ve spin boyutu gibi global özelliklere bağlıdır.

Çizelge 2.2. Kritik üs değerleri[80-82].

Fiziksel büyüklük	χ	M	C		ξ
Kritik üs	γ, γ'	$\beta(T \leq T_c)$	$\alpha(T < T_c)$	$\alpha(T < T_c)$	ν
Deneyssel manyetik sistem	1,30~1,37	0,33	0	$\geq 0,1$	0,63~0,65
2d Ising modeli[1]	7/4	1/8	0	0	1
3d Ising modeli	$\cong 1,25$	$\cong 0,312$	$\cong 0,1$	$\cong 0,1$	$\cong 0,638$

2.4.2. Birinci derece faz geçişlerinde kritik davranış

Birinci derece faz geçişleri sonlu korelasyon uzunluğu ile karakterize edilir. Birinci derece faz geçişlerinde, geçiş noktasına yaklaştıkça, korelasyon uzunluğu ikinci derece faz geçişlerinin aksine sonlu bir değere yakınsar. Bununla birlikte, termodinamik niceliklerde gözlenen tekil davranışların ikinci derece faz geçişlerinde olduğu gibi kritik üstlerle karakterize edilmesi söz konusu değildir. Monte Carlo[32-33,41-42], transfer-matris metodu[44] ve renormalizasyon grubu metodu[45] gibi çeşitli metotlarla yapılan çalışmalarda, birinci derece faz geçişlerinde sonlu örgü etkisinin sistem hacmine bağlı olduğu bildirilmektedir. Manyetik alınganlık ve öz ısı niceliklerinin faz geçiş noktasındaki pik yükseklikleri L^d sistem hacmi ile artmaktadır.

2.5. Sonlu Örgü Ölçekleme Bağınıtları

Simülasyon çalışmalarının sonlu örgülerde yapılabilmesi zorunluluğu, sonlu örgülerde yapılan ölçümlerden sistemin sonsuz büyük olduğu durumdaki davranışını öngörmek için yöntemlerin geliştirilmesine neden olmuştur. Bu açıdan, sonlu örgü ölçeklemesi dikkate değer bir başarı göstermektedir. Sonlu örgü ölçekleme teorisinin temeli, sonlu örgülerde termodinamik niceliklerin kritik davranışlarının, sistemin L lineer büyüklüğü ve korelasyon uzunluğu arasındaki oran ile kontrol edilmesi esasına dayanır[83].

Termodinamik limitte, kritik noktada sonsuz olan korelasyon uzunluğu sonlu örgülerde L örgü büyüklüğü ile sınırlı kalmaktadır. L ve L' büyüklüğündeki iki sistemin karşılaştırılması durumunda, $b=L/L'$ olmak üzere, hacim başına serbest enerji olan $f = F / kTV$,

$$f(h', \varepsilon') = b^d f(h, \varepsilon), \quad (2.34)$$

$$f(h, \varepsilon) = b^{-d} f(b^{D_h} h, b^{D_\varepsilon} \varepsilon) \quad (2.35)$$

şeklinde ifade edilir. Korelasyon uzunluğunun kritik davranışı $\xi \sim \varepsilon^{-\nu}$ ve sonlu örgülerde $\xi \sim L$ olduğu göz önüne alınırsa,

$$\varepsilon' = b^{1/\nu} \varepsilon \quad (2.36)$$

ilişkisi elde edilir. Benzer şekilde, manyetizasyon için kritik noktada, $m \sim h^{1/\delta}$ ve $m \sim \varepsilon^\beta$ ile verilen ifadeler kullanılarak,

$$h' = b^{\delta\beta/\nu} h \quad (2.37)$$

elde edilir. Böylece serbest enerji($b \rightarrow L$),

$$f(h, \varepsilon) = L^{-d} f(L^{\delta\beta/\nu} h, L^{1/\nu} \varepsilon) \quad (2.38)$$

şeklinde elde edilir.

Sonlu örgü ölçekleme teorisine göre, kritik sıcaklıktaki kaymalar,

$$T_c(L = \infty) - T_c(L) \sim L^{-1/\nu} \quad (2.39)$$

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

$$\begin{aligned} m(h, \varepsilon) &= \partial f / \partial h \\ &= \frac{\partial}{\partial h} (L^{-d} f(L^{\delta\beta/\nu} h, L^{1/\nu} \varepsilon)) \\ &= L^{d+\delta\beta/\nu} f'(L^{\delta\beta/\nu} h, L^{1/\nu} \varepsilon) \end{aligned} \quad (2.40)$$

formundadır. Widom ve Rushbrooke bağıntıları ($\delta\beta = \nu(2 + d - \eta)/2$ ve $\beta = -\nu(2 - d - \eta)/2$) kullanılarak manyetizasyon için sonlu örgü ölçekleme bağıntısı,

$$m(h, \varepsilon) = L^{-\beta/\nu} f'(L^{\delta\beta/\nu} h, L^{1/\nu} \varepsilon) \quad (2.41)$$

şeklinde elde edilir.

Manyetik alınganlık ve öz ısı için sonlu örgü ölçekleme bağıntıları, benzer biçimde,

$$kT\chi(h,\varepsilon) = \frac{\partial^2 f}{\partial h^2} = L^{\gamma/\nu} f''(L^{\delta\beta/\nu} h, L^{1/\nu} \varepsilon) \quad (2.42)$$

$$C(h,\varepsilon) = \frac{\partial^2 f}{\partial \varepsilon^2} = L^{\alpha/\nu} f'(L^{\delta\beta/\nu}, L^{1/\nu} \varepsilon) \quad (2.43)$$

bağıntıları elde edilir.

g_L Binder kümülantının sonlu örgü ölçekleme teorisine göre ölçeklenmiş formu aşağıdaki şekildedir[84].

$$g_L = g(\varepsilon L^{1/\nu}) \quad (2.44)$$

g_L 'nin bu şekilde ölçeklenmesi sonucunda ν kritik üssünün değeri elde edilebilir.

3. MODEL

3.1. Cellular Automaton

Cellular Automaton (CA) doğal sistemler için matematiksel bir modeldir. Biyolojik sistemlerin simülasyonu[86,87] için “cellular space” adı ile önerilen CA’nın fizikteki uygulamaları 1980’lerin başında başlamıştır.

CA’da uzay ve zaman kesikli değerlere sahiptir ve sonsuza kadar genişletilebilen düzenli bir hücreler örgüsünden oluşur. Örgünün her bir hücresinde kesikli değerler alabilen değişkenler yer almaktadır. CA kesikli zaman adımlarında gelişir ve gelişim esnasında bir hücre değişkeninin değeri, bölgesel bir kural yardımı ile bir önceki zaman adımında ona komşu hücrelerdeki değişkenlerin değerlerine bağlı olarak oluşmaktadır.

Fiziksel bir sistem için Cellular Automaton oluştururken:

- i) Sistemin yapısına uygun düzenli bir örgü seçilir.
- ii) Örgüyü oluşturan hücrelerin sahip olabileceği durumlara karşılık gelen değişken veya değişkenler belirlenir.
- iii) Hücrelerin birbirleri ile etkileşme şeklini ve gelişmesini sağlayan bir bölgesel kural tanımlanır.

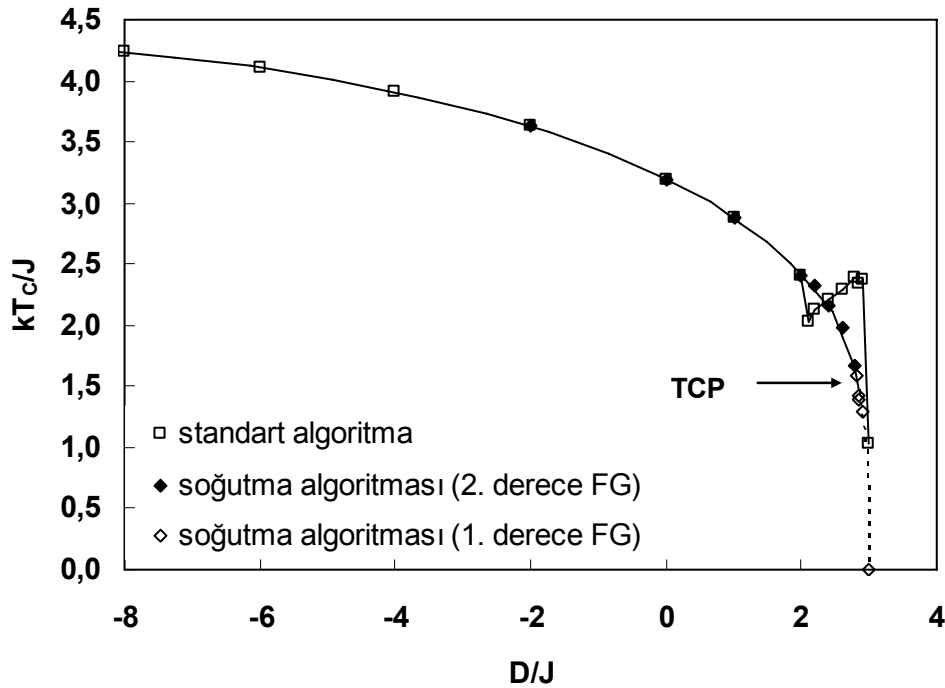
En belirgin durumlarda CA örgüsü konum uzayındadır. Mikroskobik seviyede her bir konum kristal örgüdeki spin bileşeni gibi kesikli ölçülebilirler veya atom tiplerine karşılık gelen noktaları temsil edebilir. Bu yüzden Ising model ve diğer spin sistemleri basit bir CA’dır. Daha genel olarak makroskobik seviyede her hücre birçok molekül içeren bir bölgeyi temsil edebilir ve onun değeri birkaç mümkün farklı fazdan birine karşılık gelebilir. Ising modelin ve çeşitli fiziksel problemlerin CA olarak simülasyonu Vichniac tarafından önerilmiş ve iki boyutlu kare örgüler için komşuluktaki hücrelerin sayısına ve konumuna bağlı olarak bir çok CA kuralı isimlendirilmiştir[10]. Vichniac’ın

Ising model için önerdiği kural Pomeau ve Herrmann tarafından Q2R CA olarak geliştirilmiştir[11,12]. Q2R algoritmasında sistemi tanımlayan Hamiltoniyen spin-spin etkileşme enerjisinden oluşmaktadır. Algoritmada iç enerji simülasyon boyunca korunduğundan, öz ısı hesabını dalgalanmaları kullanarak hesaplamak mümkün olmamaktadır. Bu kısıtlama iç enerji ve spine eşlenik momentuma karşılık gelen kinetik enerjinin toplamının korunduğu Creutz algoritması ile ortadan kalkmaktadır[13]. Bu algoritma kullanılarak dış alanın yokluğunda iki, üç ve daha yüksek boyutlarda en yakın komşu etkileşmeler için yapılan Ising model hesaplamaları Creutz CA (CCA)'ın Ising modeli taklit etmekte oldukça başarılı olduğunu göstermiştir[14]. Bu algoritmanın farklı varyasyonları, dış alan[15], ikinci-derece en yakın komşu etkileşme[16], dört spin etkileşmeli enerjisi[17] içeren Ising model problemlerine uygulanmış ve diğer yöntemlerle yapılan hesaplamaları destekleyen sonuçlar vermiştir. Ayrıca, Creutz algoritmasını temel alan bir algoritma iki boyutlu Blume Capel model için oluşturularak (standart algoritma) belli bir parametre aralığında modelin ikinci derece faz geçiş bölgesindeki davranışı test edilmiş ve sonuçların Ising model kritik davranış ile uyumlu olduğu gösterilmiştir[18]. Benzer şekilde, algoritmanın ikinci derece faz geçişlerinin incelenmesindeki başarısı, 2-boyutlu spin-1 Ising modelin cellular automaton ile simülasyonlarıyla da ortaya konmuştur[19,20]. Son yıllarda yapılan çalışmalarda, 3-boyutlu BC modelin faz yapısı incelenerek, birinci derece faz geçişlerinin ortaya konmasında ve üçlü-kritik noktanın tespit edilmesinde standart algoritmanın başarılı sonuçlar vermediği tespit edilmiş ve standart algoritmanın temeline dayanan soğutma algoritması adı verilen yeni bir algoritma geliştirilmiştir[21-23].

3.2. Spin-1 Ising Modelde Creutz Cellular Automaton Algoritmaları

Standart algoritma, ilk olarak, iki boyutlu Blume Capel (BC) modelin cellular automaton ile simülasyonun gerçekleştirilmesi amacıyla ortaya konmuştur. Standart algoritma kullanılarak, iki boyutlu ferromanyetik BC modelde yapılan hesaplamalar sonucunda[18], modelin, MC hesaplamaları ile uyumlu

olarak[63], $D/J = 2$ değerinde birinci derece faz geçişine, $0 \leq D/J \leq 1,5$ parametre aralığında ikinci derece faz geçişine sahip olduğu bildirilmiştir. Aynı zamanda, ikinci derece faz geçiş bölgesinde, modelin davranışının, 2-boyutlu Ising model kritik üsleri ile karakterize edildiği sonucu ortaya konmuştur. Blume Capel modelde, üçlü kritik noktanın değeri Monte Carlo hesaplamalarında $D/J=1,98$ olarak verilmektedir[63]. Standart algoritma ile modelin simülasyonu sonucunda, üçlü kritik noktanın $D/J=1,5$ ve $D/J=2$ değerleri arasında olduğu belirtilmektedir. Benzer şekilde, algoritmanın ikinci derece faz geçişlerinin incelenmesindeki başarısı, 2-boyutlu spin-1 Ising modelin cellular automaton ile simülasyonlarıyla da ortaya konmuştur[19, 20]. Son yıllarda yapılan çalışmalarda, 3-boyutlu BC modelin faz yapısı incelenerek, standart algoritmanın birinci derece faz geçişlerinde oluşan yarı kararlı durumların elde edilmesinde uygun olmadığı tespit edilerek ve standart algoritmanın temeline dayanan soğutma algoritması adı verilen yeni bir algoritma geliştirilmiştir(21-23). Şekil 2.7’de, modelin her iki algoritma kullanılarak elde edilen $(kT_c/J, D/J)$ faz diyagramı görülmektedir.

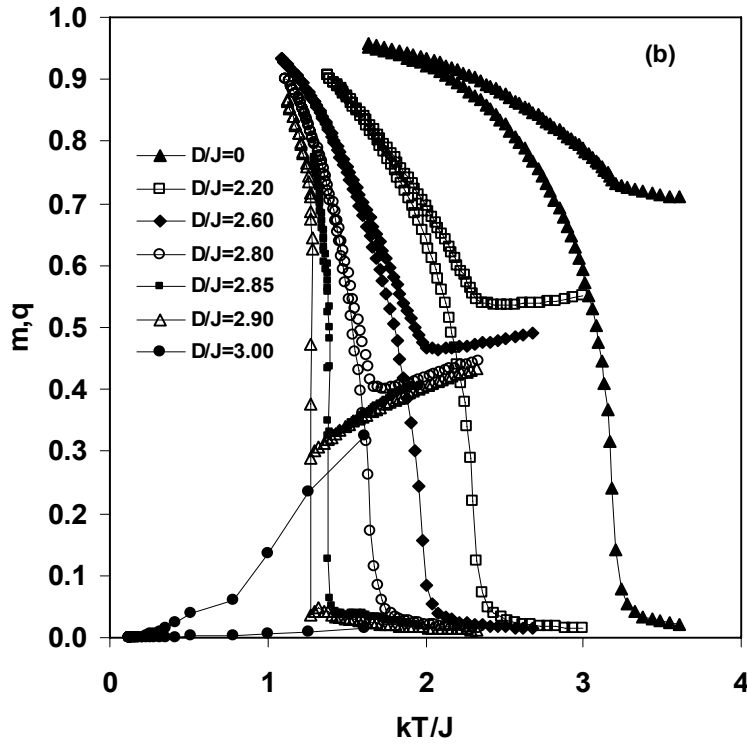
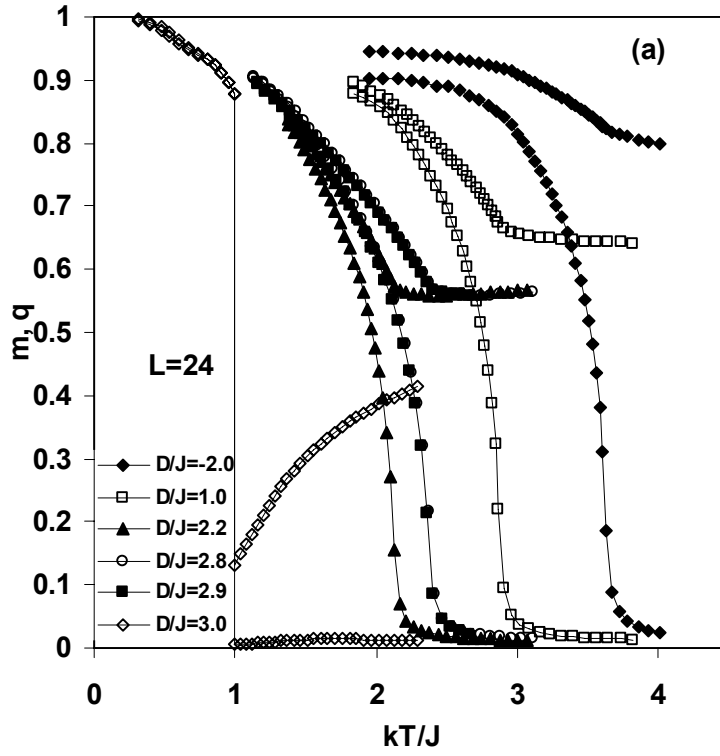


Şekil 2.7. Blume Capel modelin standart ve soğutma algoritması kullanılarak elde edilen $(kT_c/J, D/J)$ faz diyagramı[21].

Buna göre, standart algoritma ile $D/J < 3$ parametre değerlerinde, soğutma algoritması ile $D/J \leq 2,8$ parametre değerlerinde ikinci derece faz geçişi elde edilmiştir. Birinci derece faz geçişleri ise, standart algoritma ile $D/J = 3$, soğutma algoritması ile $2,81 < D/J < 3$ parametre değerlerinde görülmüştür. Buna göre, soğutma algoritması ile yapılan hesaplamalar sonucunda, modelin, literatürle uyumlu olarak, $D/J = 2,82$ parametre değerinde üçlü kritik noktaya sahip olduğu sonucu bildirilmiştir[21-23].

Standart algoritma birinci derece faz geçişlerinin karakteristik özelliği olan, faz geçiş noktasında yarı kararlı durumların oluşmasına imkan vermemektedir. Şekil 2.8'de, standart algoritma ile hesaplanan düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişimleri verilmiştir[21]. Burada, $D/J=3$ parametre değerine kadar, düzen parametrelerinin sürekli, $D/J=3$ için süresiz bir değişim gösterdiği görülmektedir. Soğutma algoritması ile yapılan hesaplamalarda ise birinci derece faz geçişinin $2,81 < D/J < 3$ parametre aralığında görüldüğü ve bu parametre aralığında düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişimlerinin S-şekli yapısında olduğu bildirilmiştir (Şekil 2.8.b).

Birinci derece faz geçişlerinde sonlu sistemlerde iki-faz bölgesinde (co-existence) görülen S-şekli yapısının varlığı, Creuzt Cellular automaton algortimasını temel alan soğutma algortiması yanı sıra, mikrokanonik moleküler dinamik[88] ve mikrokanonik Monte Carlo simülasyonları[34-36] ile de gözlenmiştir. Bunun aksine, kanonik Monte Carlo simülasyonlarında iki-faz bölgesinin kaybolduğu ve sıcaklık önceden tanımlandığı için, birinci derece faz geçişlerinde geçiş bölgesinin tespitinin zor olduğu bildirilmektedir[32,33].



Şekil 2.8. $L=24$ örgü boyunda basit kübik örgüde a) standart algoritma b) soğutma algoritması ile hesaplanan düzen parametrelerin sıcaklıkla değişimi[21].

Diğer taraftan spin-1 Ising modelin cellular automaton ile simülasyonunun gerçekleştirilmesi amacıyla ortaya konan standart algoritma ve soğutma algoritması Creutz algoritması temeline dayanmaktadır. Her iki algoritmada ve mikrokantonik simülasyonlarda sıcaklık giriş parametresi olmayıp, enerjiden elde edilmektedir. Bu da yarı kararlı durumların oluşmasına imkan vermektedir[21].

3.2.1. Standart algoritma

Örgüdeki her bir hücrede üç değişken bulunur ve her bir hücredeki değişkenlerin alacağı değer, bir önceki zaman adımıdaki kendi değerleri ve en-yakın komşularındaki değişkenlerin değerlerinden deterministik bir Cellular Automaton kuralı ile belirlenir. Her bir hücrede bulunan üç değişkenden ilki, B_i Ising spinidir; "0", "1", "2" değerlerini alabilir. Eş.2.21'de verilen Hamiltoniyen ifadesinde $S_i = B_i - 1$ 'dir.

Hücredeki ikinci değişken, spine eşlik eden momentum değişkenidir. Momentuma karşılık gelen kinetik enerji H_k , (0,m) aralığında herhangi bir spin değişimi için Ising spin enerjisindeki değişime eşit olan tamsayı değerlerini almaktadır. Kinetik enerjinin alabileceği üst sınır değeri, (J, K, D) parametre setine göre değişir. Toplam enerji, $H(H = H_I + H_K)$ tüm zaman adımlarında korunur.

Hücredeki üçüncü değişken ise "parite" dir ve CA' nın zamanla dama tahtası üzerinde gelişimini sağlamakta, böylece Ising modelin "CA" ile simülasyonunu mümkün kılmaktadır. Gelişim süresince, dama tahtasının siyah (=1) hücrelerine kural uygulanıp rengi beyaza (=0) çevrilir. Beyaz hücrelerin ise, sadece rengi siyaha çevrilir. Rengi siyaha çevrilen hücrelerin spini $\frac{1}{2}$ olasılıkla diğer iki halden birine çevrilir ve Ising enerjisindeki dH_i enerji değişimi hesaplanır. Eğer enerji değişimi bu hücrenin momentum değişkenine aktarılabilir veya momentum değişkeninden alınabilecek bir değer ve toplam enerji korunuyor ise spin değişimi gerçekleştirilir. Buna

uygun olarak momentum değiştirilir. Aksi halde spin ve momentum değiştirilmez. Bu işlem, örgüdeki bütün siyah hücrelere aynı zaman adımında uygulanmaktadır. Hücredeki üçüncü değişkenden dolayı, iki zaman adımı sonunda, örgüdeki her spin değişkenine değişim şansının verilebilmektedir.

Standart algoritmada, her bir hücrenin spin değişkeni ve parite değeri atandıktan sonra, kinetik enerji değeri, hücredeki ikinci değişken ile rasgele olarak aktarılır. Bu konfigürasyon için spin ve momentum değişim kuralı, belli bir zaman adımı uygulanarak termodinamik niceliklerin denge ortalamaları hücre başına ve zaman adımı başına hesaplanır. Verilen bir toplam enerji değerinde sistemin sıcaklığı aşağıdaki şekilde tanımlanan kinetik enerji ortalama değerlerinden elde edilir.

$$\langle H_k \rangle = \frac{\sum_{n=0}^m n e^{-nJ/kT}}{\sum_{n=0}^m e^{-nJ/kT}} \quad (2.45)$$

Termodinamik niceliklerin spin başına ve zaman adımı başına ortalama değerleri,

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i \quad (2.46)$$

$$U = H_1 / H_0 \quad (2.47)$$

Burada, H_1 , spin sisteminin hamiltoniyeni, H_0 , spin sisteminin taban durumda sahip olduğu Ising enerjisidir.

Manyetik alınganlık ve öz ısı nicelikleri ise,

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial h} = N(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2) / kT \quad (2.48)$$

$$C = \partial H_1 / \partial T = N(\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2) / (kT)^2 \quad (2.49)$$

şeklinde elde edilir.

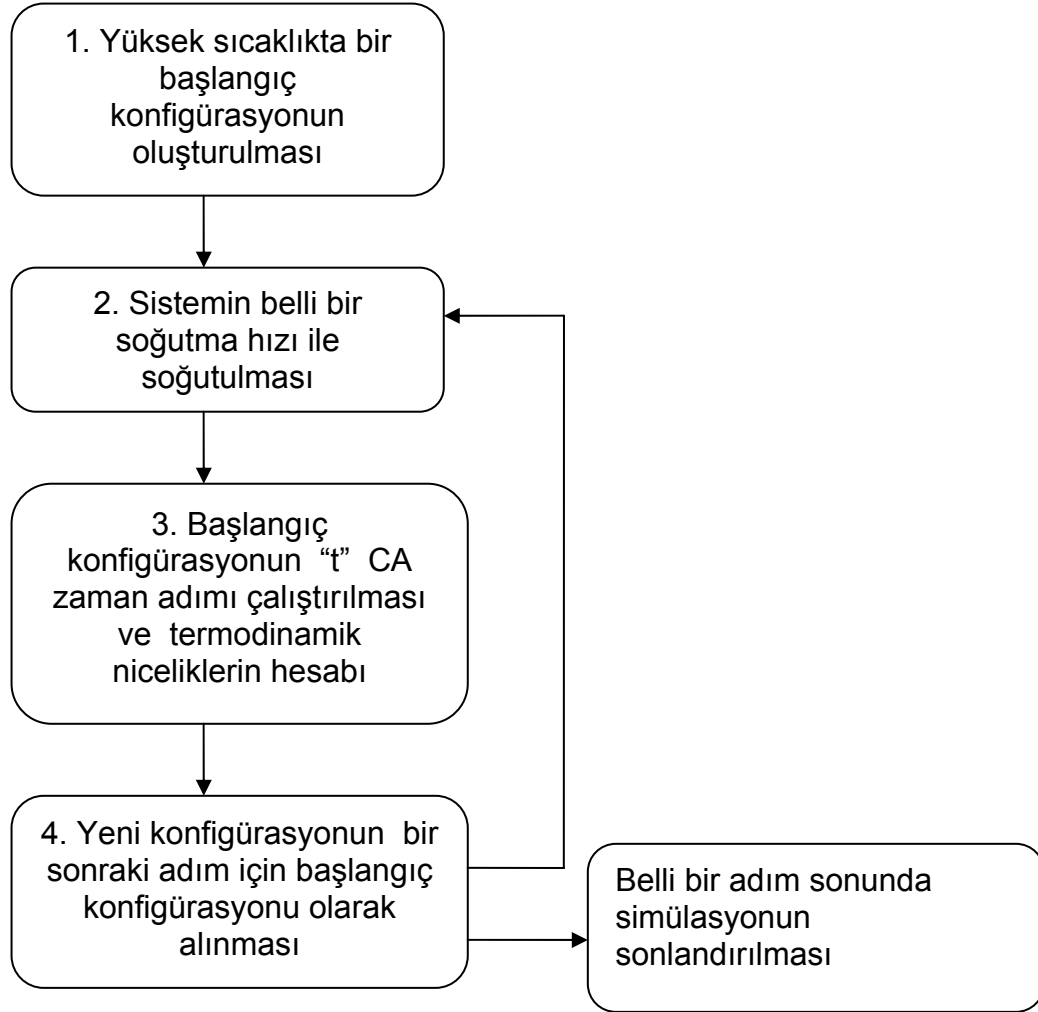
3.2.2. Soğutma algoritması

Soğutma algoritmasının genel yapısı Şekil 2.9'da verilmiştir. Algoritma, başlangıç prosedürü ve ölçümlerin alınması olmak üzere iki temel bölümden oluşmaktadır.

Başlangıç prosedürü: Hesap yapılacak olan etkileşme parametrelerine göre taban durumu belirlendikten sonra, örgünün her bir hücresine, bu taban durumuna uygun olarak spin değişkenleri yerleştirilir. Her bir hücreye, ikinci değişken yoluyla $|dH_1|$ kadar kinetik enerji verilir. Hücredeki üçüncü değişken olan parite yardımı ile gelişimin sağlanması ve spin ve momentum değişim kuralları standart algoritmadaki gibidir. Bu kurallar 20000 CA adımı için uygulanarak, işlem sonunda, yüksek sıcaklıkta düzensiz yapıda bir konfigürasyon elde edilir.

Ölçümlerin alınması: Başlangıç prosedürü sonunda elde edilen konfigürasyon, soğutma işlemi için başlangıç konfigürasyonu olarak alınır. Bu başlangıç konfigürasyonunda algoritma, belli bir CA adımı çalıştırılır. Soğutma işlemi, bu CA zaman adımı sonunda, örgüdeki her bir hücrenin sahip olduğu kinetik enerji (H_k), s.h soğutma hızı olmak üzere, (s.h)x H_k kadar azaltılarak gerçekleştirilir. Bu işlem sonunda elde edilen konfigürasyon,

bir sonraki soğutma işlemi için başlangıç olarak alınır. Her bir toplam enerjide, belli bir CA zaman adımı, sistemin denge durumuna getirilebilmesi için atılır ve termodinamik ölçümlerin denge ortalamaları hücre başına ve zaman adımı başına hesaplanır.



Şekil 2.9. Soğutma algoritmasının genel yapısı.

3.2.3. Isıtma algoritması

Isıtma algoritması, soğutma algoritmasına benzer bir yapıya sahiptir. Başlangıç prosedürü sonunda, düşük sıcaklıkta düzenli bir konfigürasyon yapısı elde edilir. Soğutma algoritmasından farklı olarak, hücre başına düşen

kinetik enerji, ikinci deęişken yoluyla belli sayıdaki hücreye rasgele olarak aktarılır. Bu konfigürasyon belli bir CA adımı için çalıştırılır. Bu işlem sonunda elde edilen son konfigürasyon ısıtma işlemi için başlangıç konfigürasyonu olarak alınır ve her toplam enerjiye karşılık gelen sonuç konfigürasyon bir sonraki için başlangıç teşkil eder. Isıtma işlemi boyunca enerji spin sisteminden ikinci deęişken (demon) yardımıyla verilir.

4. BULGULAR VE TARTIŞMA

Bu çalışmada, ferromanyetik bilineer etkileşmeli Blume-Emery-Griffiths (BEG) modelin 3-boyutta faz yapısı cellular automaton simülasyonları ile incelendi. Simülasyon çalışmalarında, tez kapsamında geliştirilen Creutz Cellular Automaton algoritmasını temel alan ısıtma algoritması kullanıldı. Isıtma algoritması ile çok düşük sıcaklıklarda oluşturulan bir konfigürasyondan başlayarak, sistemin belli bir oranda ısıtılması sonucunda, yüksek sıcaklıklarda bir yapı elde edilir. Böylece ısıtma algoritması, BEG modelde, çok düşük sıcaklıklara inilerek gözlenebilen tekrarlayan faz geçişlerinin elde edilmesinde soğutma algoritmasına göre avantajlar sağlamaktadır.

Hesaplamalar $-3 < D/J < 3$ ve $-2 \leq K/J \leq 0$ parametre bölgesinde $L=12, 16, 18$ ve 24 kenar uzunluğuna sahip basit kübik örgüler üzerinde ısıtma algoritması kullanılarak yapıldı. Modelin faz yapısının tespit edilmesi amacıyla, düzen parametreleri (m ve q), manyetik alınganlık, iç enerji ve öz ısı niceliklerinin sıcaklıkla değişimleri ile m düzen parametresi olasılık dağılımı($P(m)$) incelendi. Çalışma kapsamında, faz geçişi türlerinin belirlenmesi ve faz diyagramlarının elde edilmesinde, $L=18$ kenar uzunluğuna sahip basit kübik örgüde yapılan hesaplamalar, evrensellik sınıfının belirlenmesi amacıyla yapılan sonlu örgü ölçekleme analizlerinde ise $L=12, 16, 18$ ve 24 kenar uzunluğuna sahip örgülerde yapılan hesaplamalar kullanılmıştır. Tüm hesaplamalarda, periyodik sınır şartları kullanılarak, spin başına ve $1\,000\,000$ cellular automaton zaman adımı üzerinden ortalamalar alınmıştır. Hesaplamalarda iki farklı ısıtma hızı kullanılmıştır. Isıtma hızı, hücre başına $0,02H_k$ ve $0,08H_k$ olmak üzere iki farklı değerde alınmıştır.

$D/J \leq 0$ için $(k, t = k_B T / zJ)$ ($z=6$, komşu sayısı) faz diyagramlarının oluşturulmasında, sıcaklık değerleri $d = D/J$ ve $k = K/J$ parametre değerlerinde $L=18$ için hesaplanan manyetik alınganlık pik değerlerinden,

$D/J \geq 0$ için, öz ısı pik değerlerinden tespit edilen sonlu örgü kritik sıcaklık değerleri kullanılmıştır. Manyetik alınganlık ve öz ısı niceliklerinden sıcaklığın belirlenmesindeki hata, pik genişliğinin yarısı alınarak tespit edilmiştir. Diğer taraftan sonlu örgü ölçeklemesi analizlerinde, $L=12, 16, 18$ ve 24 için hesaplanan Binder kümülanının sıcaklıkla değişim grafiklerinden tespit edilen sonsuz örgü kritik sıcaklık değerleri kullanılmıştır. Bu sıcaklıkların belirlenmesindeki hata ise Binder eğrilerinin kesiştikleri aralığın yarısı alınarak tespit edilmiştir.

4.1. Ferromanyetik Bilineer Etkileşmeli BEG Modelin Taban Durumu ve Faz Tanımları

4.1.1. Taban durum konfigürasyonlarının tespit edilmesi

Basit kübik örgüde, modelin sahip olduğu taban durum konfigürasyonlarının tespit edilmesinde aşağıda belirtilen işlem uygulanmıştır.

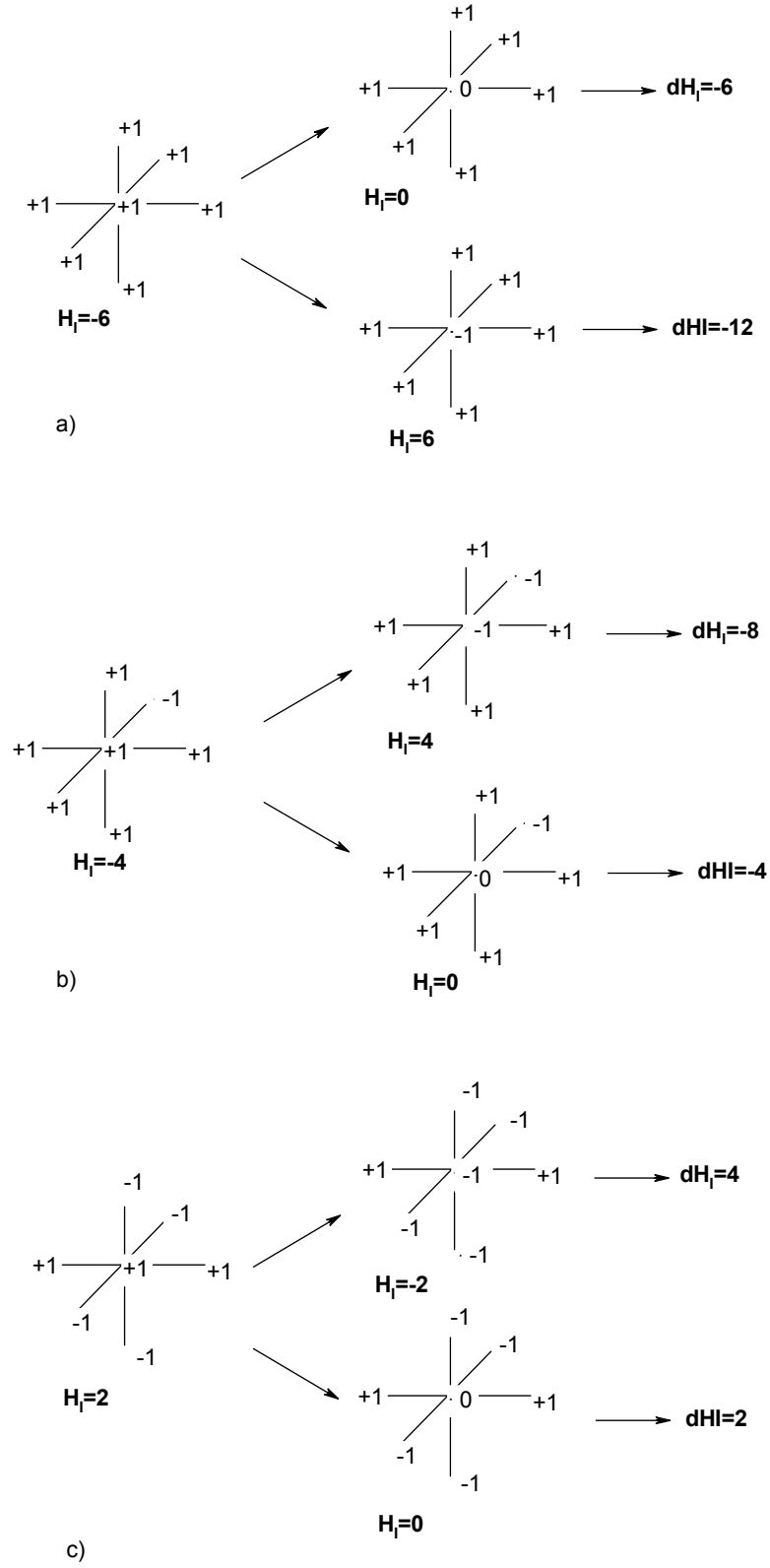
Basit kübik örgüde, örgü üzerindeki her bir hücrenin en yakın komşu sayısı 6'dır. Buna göre, merkezde bir spin ve 6 komşusunun bulunabileceği tüm spin konfigürasyonları belirlenir. Her bir konfigürasyon için, merkezdeki spinin komşuları ile etkileşimi göz önüne alınarak t zamanındaki H_i^t enerjisi hesaplanır. Daha sonraki adımda, merkezdeki spinin, diğer iki spin durumuna değişmesi halinde sahip olacağı H_i^t değeri iki durum için hesaplanarak, spin değişiminde iç enerjideki değişim, $dH_i = H_i^{t+1} - H_i^t$ ifadesi ile belirlenir.

i) $dH_i > 0$ ise, dışarıdan verilecek bir kinetik enerjiye ihtiyaç duyulmaksızın merkezdeki spin değişimi gerçekleşir.

ii) $dH_i < 0$ ise, merkezdeki spinin değişimi dışardan verilecek bir kinetik enerji ile gerçekleşir.

iii) $dH_i = 0$ ise, merkezdeki spin kendiliğinden diğer spin durumlarından birine değişir.

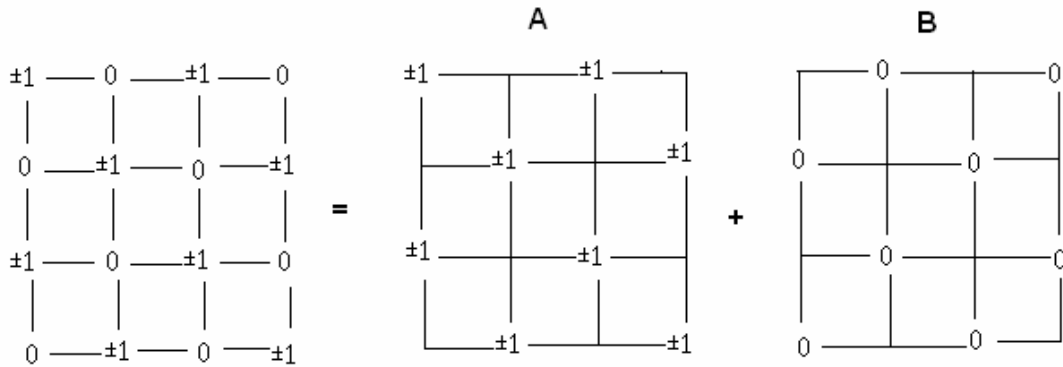
Buna göre, dH_i 'nin negatif ve $|dH_i|$ 'nin en büyük değerine sahip spin konfigürasyonu, modelin göz önüne alınan etkileşme parametre değerleri için taban durumundaki konfigürasyonunu verir. Şekil 4.1'de $J = -1$, $K = D = 0$ parametre seti için taban durum konfigürasyonun belirlenmesinde göz önüne alınan birkaç spin düzenlenmesi verilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi, tüm spinlerin "+1" olması durumunda merkezdeki spinin "0" durumuna değişmesi için dışardan 6 birim, "-1" durumuna değişmesi durumunda ise dışardan 12 birimlik enerjiye ihtiyaç duyulmaktadır(Şekil 4.1.a). Şekil 4.1.b'de verilen konfigürasyon için, merkezdeki spinin dışarıya 8 birim enerji vererek "-1" durumuna değişmesi veya 4 birim enerji vererek "0" durumuna değişmesi mümkündür. Diğer taraftan, Şekil 4.1.c'de verilen konfigürasyon kararlı bir yapıdadır ve merkezdeki spinin "+1" durumundan "-1" veya "0" durumuna değişmesi için dışardan enerji alması gerekmektedir. Ancak bu konfigürasyon, Şekil 4.1.a'da verilen konfigürasyondan daha az kararlıdır. Buna göre, $J = -1, K = D = 0$ parametre seti için en kararlı spin düzenlenmesi tüm spinlerin "+1" değerini aldığı durumdur.



Şekil 4.1. $J = -1$, $K = D = 0$ parametre seti için taban durum konfigürasyonun belirlenmesinde göz önüne alınan birkaç spin düzenlenmesi ve H_i enerji değişimi.

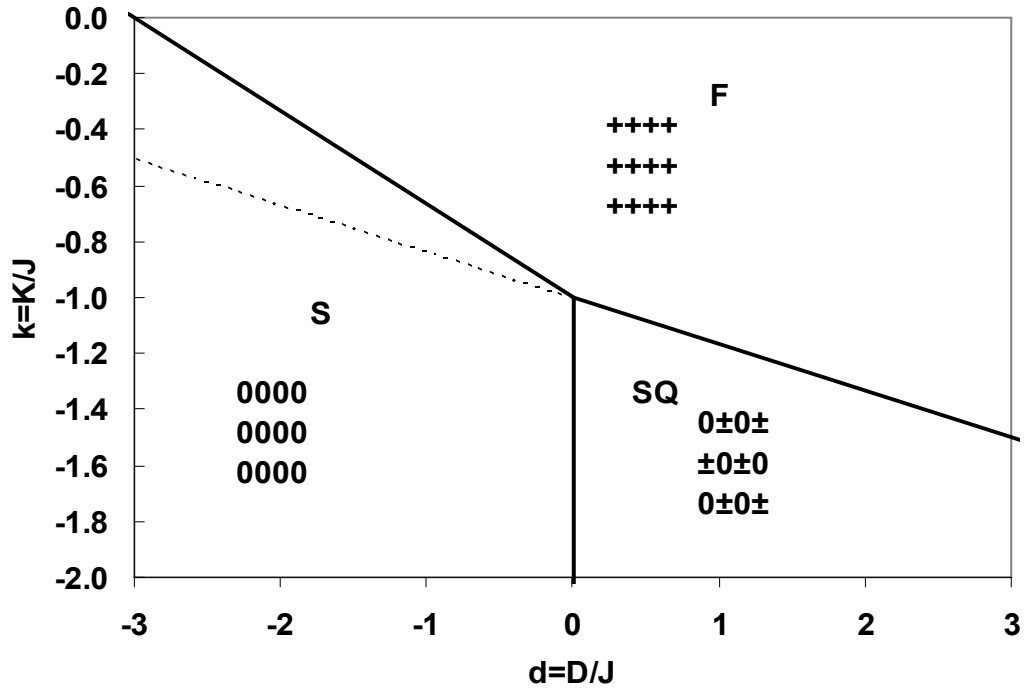
4.1.2. Ferromanyetik bilineer etkileşmeli BEG modelde faz tanımları

3-boyutta BEG model, taban durumda (d,k) faz uzayında, spin düzenlenmelerine göre ferromanyetik(F), sıfır faz(S) ve karışık (stagger quadrupolar, SQ) faz olmak üzere üç farklı faz bölgesine sahiptir. Ferromanyetik düzen(F), örgü noktalarında yer alan tüm spin değişkenlerinin “+1” veya “-1” değerini alması ile tanımlanırken, sıfır düzen(S), “0” değerini alması durumu ile tanımlanır. Karışık düzenin(stagger quadrupolar, SQ) anlaşılabilmesi için örgü, iç içe geçmiş iki alt örgü şeklinde düşünülebilir. SQ düzende, A alt örgüsünde rasgele olarak, $S_i = \pm 1$ ve B alt örgüsünde $S_i = 0$ veya eş değer olarak, A alt örgüsünde $S_i = 0$ ve B alt örgüsünde rasgele olarak, $S_i = \pm 1$ 'dir(Şekil 4.2).



Şekil 4.2. Karışık düzende A ve B alt örgüleri.

Şekil 4.3’de, modelin 3-boyutta $d = D/J$ ve $k = K/J$ olmak üzere (d,k) faz uzayında $-3 < d < 3$ ve $-2 \leq k \leq 0$ parametre bölgesinde sahip olduğu taban durumları görülmektedir. Şekilde görülen sürekli çizgiler Bethe yaklaşımı hesaplamaları[30] ile verilen faz sınırlarını, kesikli çizgi Bölüm 4.1’de belirtildiği şekilde modelin taban durum konfigürasyonlarının belirlenmesi sonucunda tespit edilen F ile S fazın ayrıldığı sınırı göstermektedir. Buna göre, tespit edilen F ile SQ fazın ayrıldığı $k = -1 - d/6$ çizgisi ve S ile SQ fazın ayrıldığı sınır çizgisi Bethe yaklaşımı sonuçları ile uyumlu içindedir. Ancak F ile S fazın ayrıldığı sınırın farklı olduğu görülmektedir.



Şekil 4.3. 3-boyutta BEG modelin (d, k) faz uzayında taban durum konfigürasyonları.

BEG model aşağıdaki ifadelerde verilen iki düzen parametresine sahiptir.

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i \quad (4.1)$$

$$q = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i^2 \quad (4.2)$$

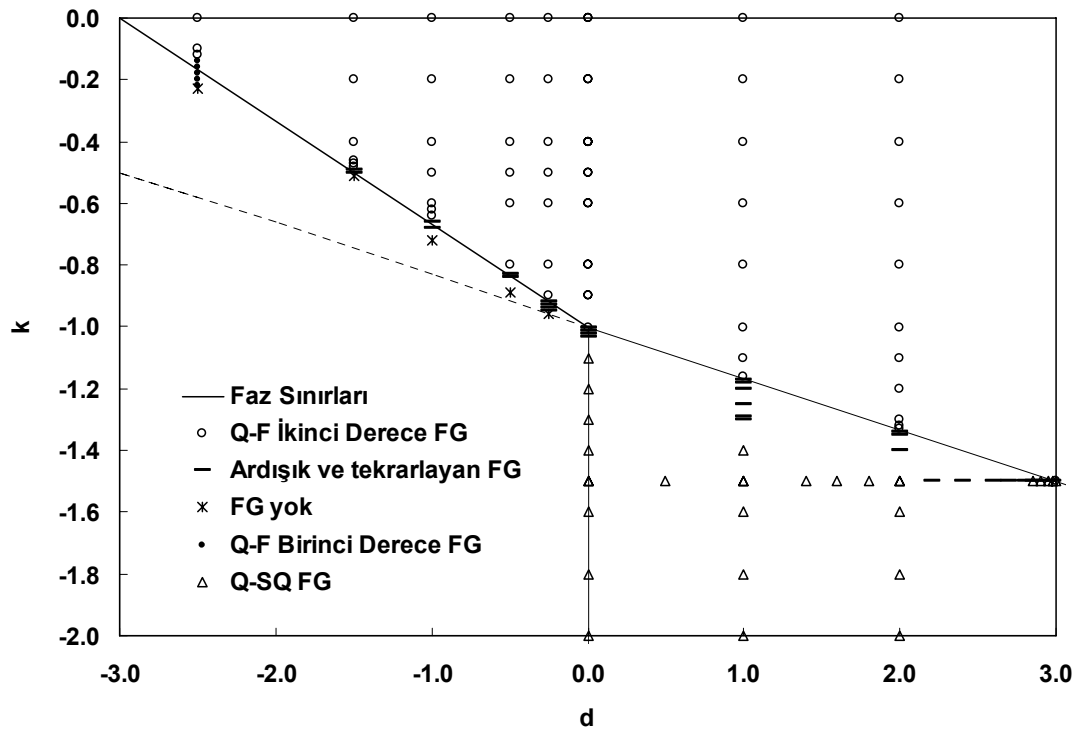
Burada, m düzen parametresi, manyetizasyona karşılık gelirken, q kuadrupolar moment olarak adlandırılır ve sistemdeki “0”dan farklı durumdaki spinlerin sayısının bir ölçüsüdür. Karışık faz bölgesinde, faz yapısının karakteristik özelliklerini belirlemek amacıyla, A ve B alt örgüleri için m_A ve m_B ile q_A ve q_B düzen parametreleri Eş. 4.1 ve Eş.4.2’e göre hesaplanmıştır.

Belli bir (d, k) parametre setinde, $T \neq 0$ için sistemin sahip olduğu üç farklı faz[30],

- i) Kuadrapolar faz (Q), $m_A = m_B = 0$ ve $q_A = q_B$
- ii) Ferromanyetik faz (F), $m_A = m_B \neq 0$ ve $q_A = q_B$
- iii) Karışık faz (SQ), $m_A = m_B = 0$ ve $q_A \neq q_B$

şeklinde tanımlanır.

BEG modelin 3-boyutta $-3 < d < 3$ ve $-2 \leq k \leq 0$ parametre bölgelerinde ısıtma algoritması kullanılarak cellular automaton ile simülasyonu sonucunda, $L=18$ için düzen parametreleri, manyetik alınganlık, iç enerji ve öz ısının sıcaklıkla değişimleri ve $P(m)$ olasılık dağılımının incelenmesi ile tespit edilen faz geçiş türleri Şekil 4.4'de görülmektedir.



Şekil 4.4. BEG modelin cellular automaton ile simülasyonu sonucunda tespit edilen faz geçiş türleri.

Şekilden görüldüğü gibi, model, d ve k parametre değerlerine bağlı olarak ikinci derece faz geçişleri, çeşitli ardışık ve tekrarlayan faz geçişleri ve birinci derece faz geçişlerinin olduğu zengin bir faz yapısına sahiptir. Takip eden bölümlerde, tespit edilen faz geçiş türleri ayrıntılı olarak anlatılmaktadır.

4.2. Ferromanyetik Bölgede ve F-S Faz Sınırı Civarındaki Hesaplamalar

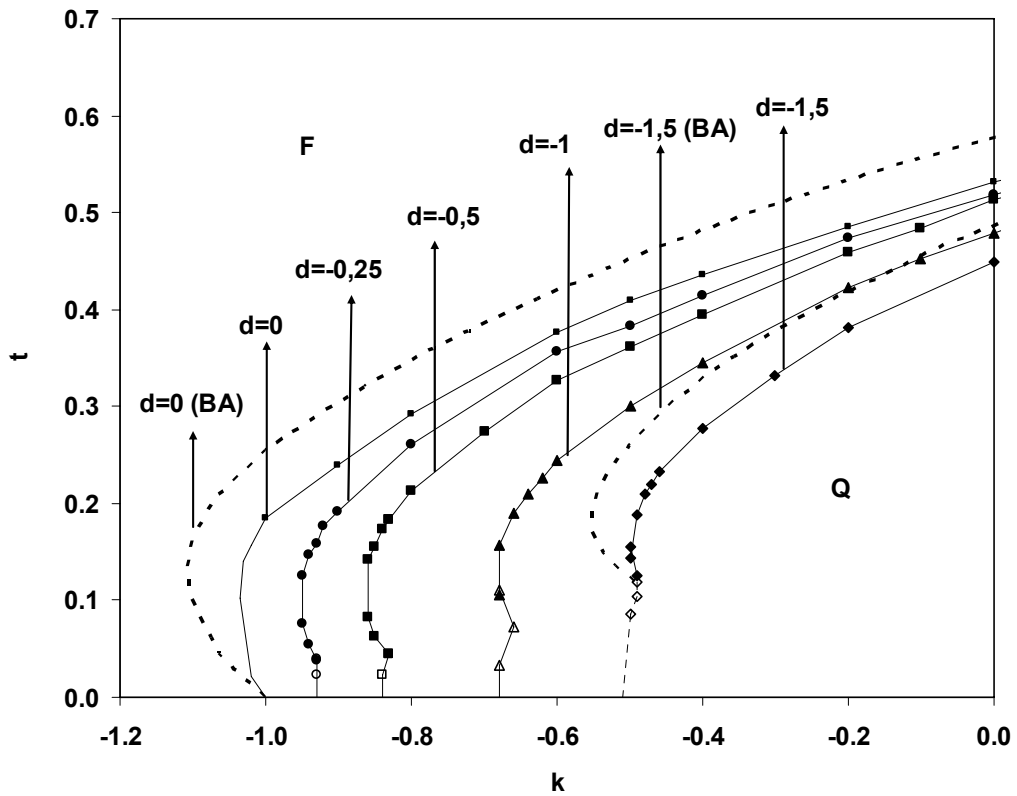
Çalışmaların bu aşamasında, taban durumda, F-S ve F-SQ faz sınırlarının üzerinde yer alan yani ferromanyetik düzenin olduğu bölgede ve özellikle F-S faz sınırı civarında, modelin faz geçişi özelliklerinin ortaya konması amacıyla $d = 2, 1, 0, -0,25, -0,5, -1, -1,5$ ve $-2,5$ doğruları boyunca çeşitli k değerleri için hesaplanan düzen parametreleri, manyetik alınganlık, iç enerji ve öz ısının sıcaklıkla değişimleri ve m düzen parametresi olasılık dağılımı $P(m)$ 'nin davranışı incelendi. Düzen parametresi olasılık dağılımı $P(m)$,

$$P(m) = \frac{N_m}{N_{CCAS}} \quad (4.3)$$

ifadesine göre elde edilmiştir[89]. Burada, N_m , m değerinin oluşma zaman adımı sayısı, N_{CCAS} , toplam Creutz cellular automaton zaman adımı sayısını göstermektedir.

$d = 0, -0,25, -0,5, -1$, ve $-1,5$ için farklı k değerlerinde $L=18$ için elde edilen manyetik alınganlık piklerinden tespit edilen kritik sıcaklıklar kullanılarak oluşturulan (k, t) faz diyagramları Şekil 4.5'de verilmektedir. Şekilde, kapalı ve açık semboller, sırasıyla, ikinci derece ve birinci derece faz geçişlerini; kesikli ve ince kesikli çizgiler ise, $d=0$ ve $d=-1,5$ parametre değerlerinde Bethe yaklaşımı hesaplamaları[30] sonucu verilen ikinci derece ve birinci derece faz geçişlerini göstermektedir. $d=0$ için, $k \geq -1$ parametre değerlerinde sadece ikinci derece $Q \rightarrow F$ faz geçişi oluşmaktadır.

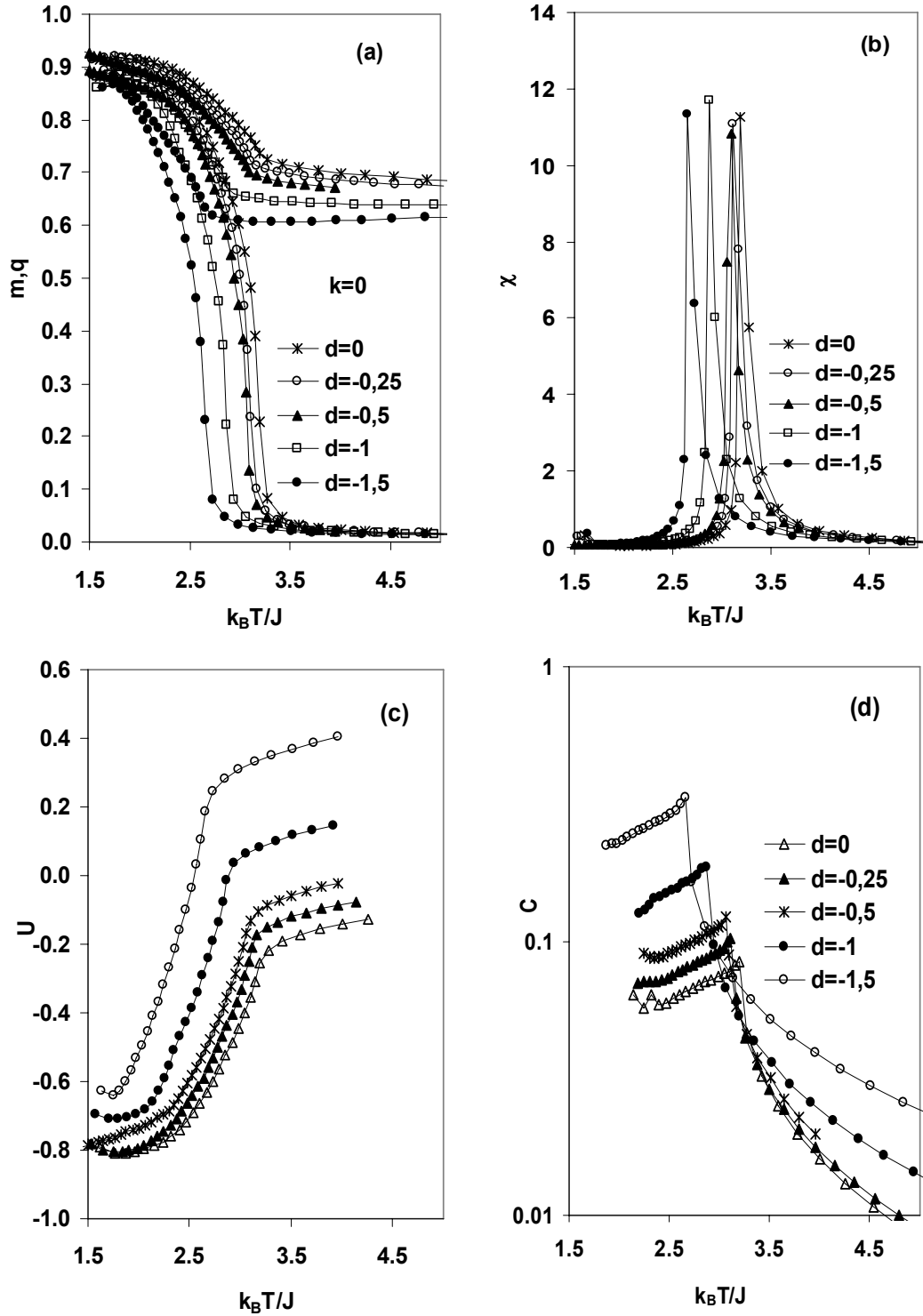
Ardışık $Q \rightarrow F \rightarrow Q$ ve tekrarlayan $Q \rightarrow F \rightarrow Q \rightarrow F$ faz geçişleri $d=-0,25$, $-0,5$, -1 ve $-1,5$ için belirli k değerlerinde görülmektedir. Diğer taraftan, $d \leq -2,5$ için, sadece $Q \rightarrow F$ faz geçişleri oluşmaktadır. $d=0$ ve $-1,5$ için oluşturulan faz diyagramlarının Bethe yaklaşımı sonuçları[30] ile benzer davranış gösterdiği görülmektedir. Bu sonuçlara göre, $d < 0$ parametre bölgesinde, model üçlü kritik noktalara, yani faz geçişinin ikinci dereceden birinci dereceye dönüştüğü noktalara sahiptir.



Şekil 4.5. $d=0$, $-0,25$, $-0,5$, -1 ve $-1,5$ değerlerinde (k, t) faz diyagramları.

4.2.1. İkinci derece $Q \rightarrow F$ faz geçişleri

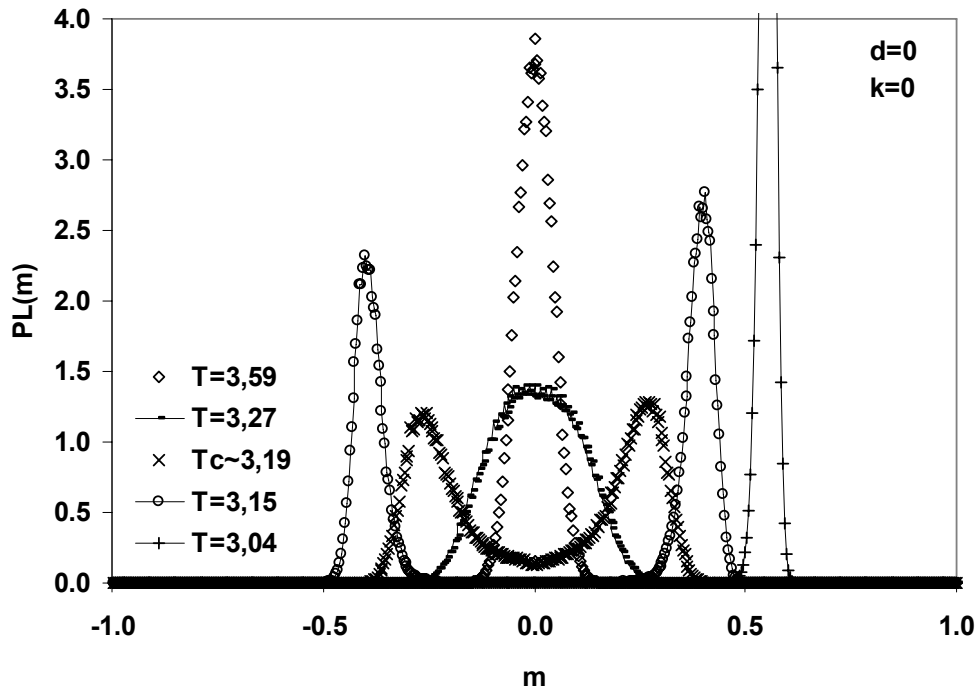
Şekil 4.6'da $L=18$ kenar uzunluğuna sahip basit kübik örgüde, F-S ve F-SQ faz sınırlarının üzerinde bulunan ferromanyetik bölgede, $k = 0$ için $d = 2, 1, 0, -0,25, -0,5, -1$ ve $-1,5$ parametre değerlerinde hesaplanan düzen parametreleri m ve q , manyetik alınganlık, iç enerji ve öz ısı niceliklerinin sıcaklıkla değişimleri görülmektedir.



Şekil 4.6. $L=18$ 'de, $k=0$ ve $d=2, 1, 0, -0.25, -0.5, -1, -1.5$ parametrelerinde
a) m ve q düzen parametreleri b) Manyetik alınganlık c) İç enerji
d) Öz ısı niceliklerinin sıcaklıkla değişimleri.

Şekil 4.6..a'da verilen m ve q düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişimleri incelendiğinde, yüksek sıcaklıkta görülen kuadrapolar fazdan($m = 0, q \neq 0$), düşük sıcaklıkta ferromanyetik faza($m \neq 0, q \neq 0$) bir geçiş olduğu görülmektedir. Bunun yanı sıra, m düzen parametresinin sürekli değişimine manyetik alınganlığın kritik sıcaklıkta gösterdiği karakteristik davranışı eşlik etmektedir (Şekil 4.6.b). Benzer davranışlar, iç enerji ve enerjideki dalgalanmanın bir ölçüsü olan öz ısının sıcaklıkla değişimlerinde de görülmektedir(Şekil 4.6.c ve Şekil 4.6.d).

$P(m)$ olasılık dağılımları da, F-S ve F-SQ sınırlarının üzerinde bulunan ferromanyetik bölgede faz geçiş türünün ikinci derece olduğu yönünde bilgiler vermektedir. Şekil 4.7'de $L=18$ örgüsünde, $d=0$, $k=0$ için, kritik sıcaklık civarında, $P(m)$ olasılık dağılımının değişimi görülmektedir.



Şekil 4.7. $L=18$ 'de, $d=0$ ve $k=0$ 'da oluşan ikinci derece $Q \rightarrow F$ faz geçişinde, kritik sıcaklık civarında $P(m)$ olasılık dağılımının değişimi.

İkinci derece faz geçişlerinde, yükseklikleri birbirine eşit iki pikin varlığı faz geçişinin olduğu kritik sıcaklığı göstermektedir. Şekil 4.7'den, bu tür

davranışın $d = 0$, $k = 0$ için, $L=18$ örgü büyüklüğünde, $T_c \sim 3,19$ sıcaklık değerinde oluştuğu görülmektedir.

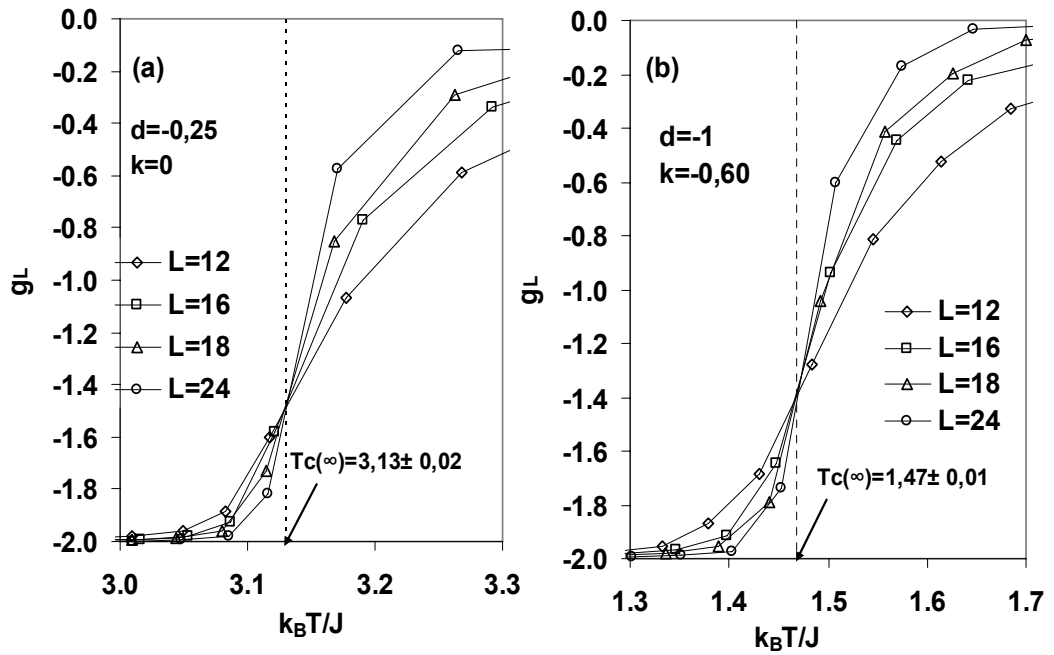
$d = 0$, $k = 0$ için, $L=18$ örgü büyüklüğünde, alınganlığın pik değerinden tespit edilen sonlu kritik sıcaklık değeri ($T_c = 3,19 \pm 0,04$) $P(m)$ olasılık dağılımından tespit edilen sonuç ile uyum içindedir. Ayrıca, bu sonuç, seri açılım metodu[53,64] ile ortaya konan $T_c = 3,192$ ve soğutma algoritması kullanılarak yapılan cellular automaton hesaplamaları[21] ile ortaya konan $T_c = 3,195$ değerleri ile uyum içindedir. Şekle göre, $P(m)$, düşük sıcaklıkta düzene karşılık gelen tek pike sahipken, faz geçiş bölgesinde iki piktir. Düzene karşılık gelen bu iki pik, sıcaklık kritik değere yaklaştıkça birbirine yaklaşmakta ve $T \sim T_c$ 'de yükseklikleri birbirine eşit iki pik görülmektedir. Kritik sıcaklığın üzerinde ise ($T > T_c$) iki pik, $m=0$ civarında tek pik halini almaktadır. Bu durum ise sistemdeki düzensizliğe karşılık gelmektedir.

Sonuç olarak, F-S ve F-SQ faz sınırlarının üzerinde ferromanyetik düzenin olduğu parametre değerlerinde, düzen parametreleri, manyetik alınganlık, iç enerji ve öz ısının sıcaklıkla değişimleri ve düzen parametresi m 'nin olasılık dağılımı $P(m)$ 'nin davranışının incelenmesi sonucunda, modelin bu bölgede ikinci derece $Q \rightarrow F$ faz geçişi sergilediği tespit edilmiştir.

Bu bölgede modelin evrensellik sınıfının ortaya konması amacıyla, Bölüm 2.5'de verilen ölçekleme bağıntıları kullanılarak α , β , γ ve ν kritik üsleri tespit edilmiştir. Öncelikle, her bir d ve k seti için sonsuz kritik sıcaklığın tespiti ve ν kritik üssünün belirlenmesi amacıyla Binder kümülantından yararlanılmıştır.

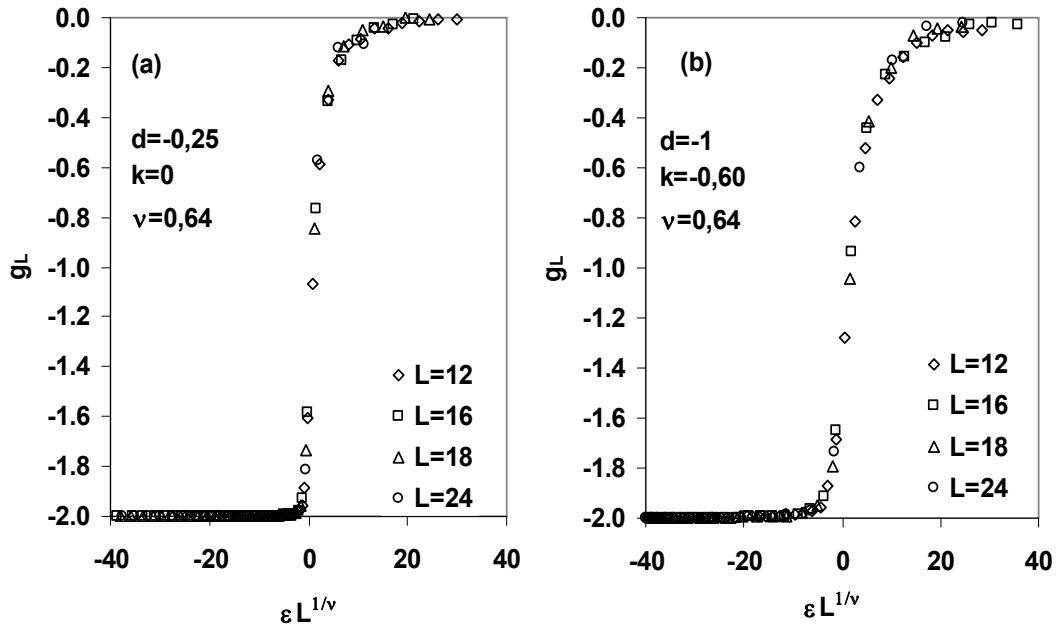
Binder kümülantı, farklı L kenar uzunluğuna sahip örgüler için, $g_L = \langle m^4 \rangle / \langle m^2 \rangle^2 - 3$ şeklinde tanımlanmıştır[84]. Şekil 4.8'de $d = -0,25$ ve $k = 0$, $d = -1$ ve $k = -0,66$ parametre setleri için, farklı örgülerde hesaplanan Binder kümülantı g_L 'nin sıcaklık ile değişim grafiğinden sonsuz örgü kritik sıcaklığın tespiti verilmektedir. Farklı örgüler için çizilen eğrilerin kesim noktası söz

konusu (d,k) seti için sonsuz kritik sıcaklık değerini vermektedir. Kritik sıcaklığın bu şekilde belirlenmesinde yapılan hata, eğrilerin kesiştiği aralığın yarısı olarak alınmıştır. Farklı (d,k) setleri için Binder kümülanlarından kritik sıcaklığın tespit edilmesinde yapılan hatanın %0,1 ile %0,5 arasında değiştiği görülmüştür. $d=-0,25$ ve $k=0$ için, $T_c=3,13\pm0,02$, $d=-1$ ve $k=-0,60$ için $T_c=1,47\pm0,01$ olarak tespit edilmiştir.



Şekil 4.8 $L=12, 16, 18$ ve 24 'de hesaplanan Binder kümülanının sıcaklıkla değişimi a) $d=-0,25$ ve $k=0$ b) $d=-1$ ve $k=-0,60$.

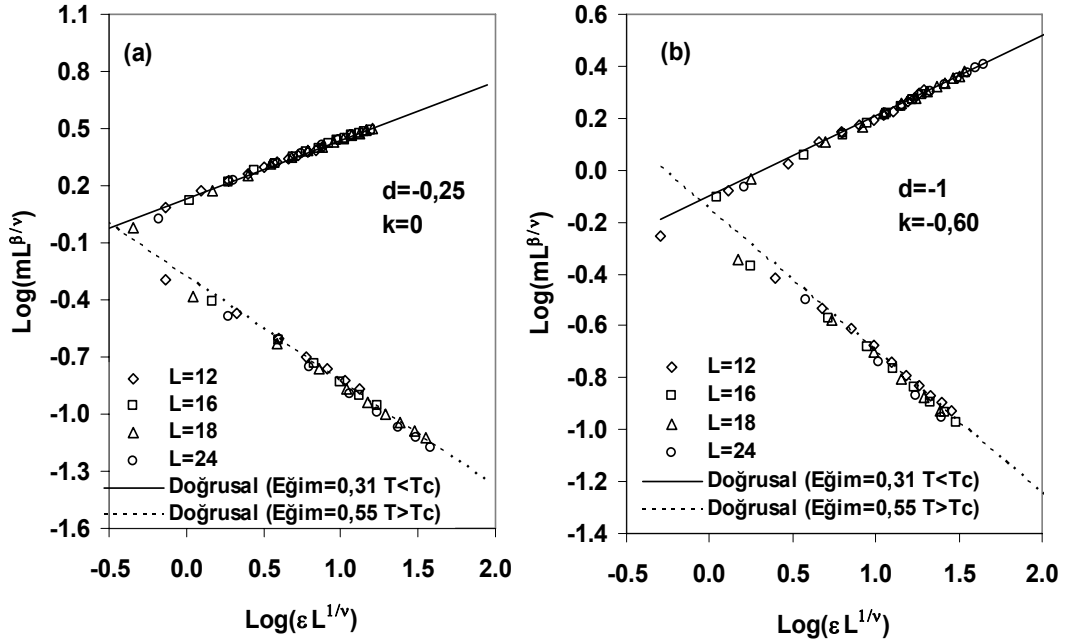
Binder kümülanının Eş.2.44'de verilen sonlu örgü ölçekleme ifadesine göre, sonsuz kritik sıcaklık $T_c(d,k)$ ve uygun ν değeri alınarak, $\varepsilon=(T-T_c)/T_c$ olmak üzere, farklı örgülerde hesaplanan g_L 'nin $\varepsilon L^{1/\nu}$ ye karşı çizilen ölçekleme grafikleri Şekil 4.9'da verilmektedir. Buna göre, farklı örgülerde hesaplanan g_L değerlerinin $\nu=0,64$ değeri için tek bir eğriye uydukları görülmektedir.



Şekil 4.9. Binder kümülantının sonlu örgü ölçeklemesi a) $d=-0,25$, $k=0$
b) $d=-1$, $k=-0,60$.

Binder kümülantının $v=0,64$ için bu davranış şeklinin, ferromanyetik taban durumuna sahip ve ikinci derece $Q \rightarrow F$ faz geçişi sergileyen tüm (d,k) setleri için aynı olduğu tespit edilmiştir.

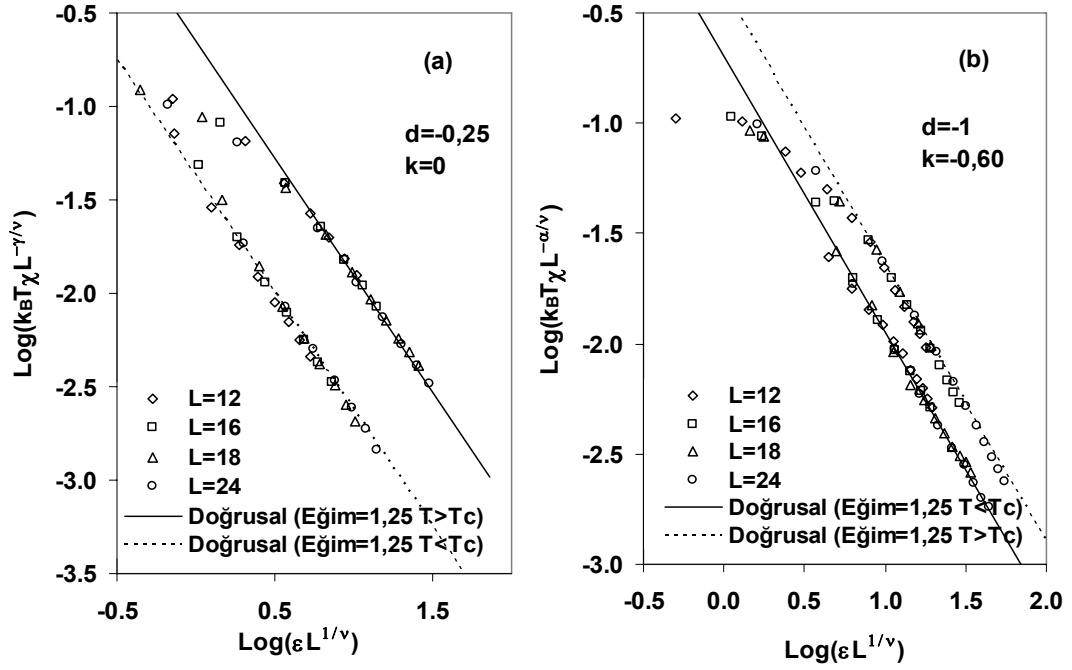
β kritik üssünün belirlenmesi amacıyla, düzen parametresi m 'nin Eş.2.41 ile verilen sonlu örgü ölçekleme bağıntısı kullanıldı. Farklı kenar uzunluğuna sahip örgülerde $mL^{\beta/v}$ 'nin $\epsilon L^{1/v}$ 'ye karşı Log-Log grafiği çizildiğinde, büyük $x=\epsilon L^{1/v}$ değerlerinde, grafiklerin eğimi β olan bir doğruya uyduğu görülür. Şekil 4.10'da, $d=-0,25$, $k=0$ ve $d=-1$, $k=-0,60$ parametre setlerinde düzen parametresi m 'nin ölçekleme grafikleri verilmiştir. Her iki parametre seti için, $\beta=0,31$ ve $v=0,64$ alınarak çizilen $\text{Log}(mL^{\beta/v})-\text{Log}(\epsilon L^{1/v})$ grafiğinde, verilerin, $T < T_c$ sıcaklık bölgesinde eğimi 0,31 ve $T > T_c$ sıcaklık bölgesinde eğimi 0,55 olan doğruya uyduğu görülmektedir. Buna göre $\beta=0,31$ ve $\beta'=0,55$ olduğu tespit edilmiştir.



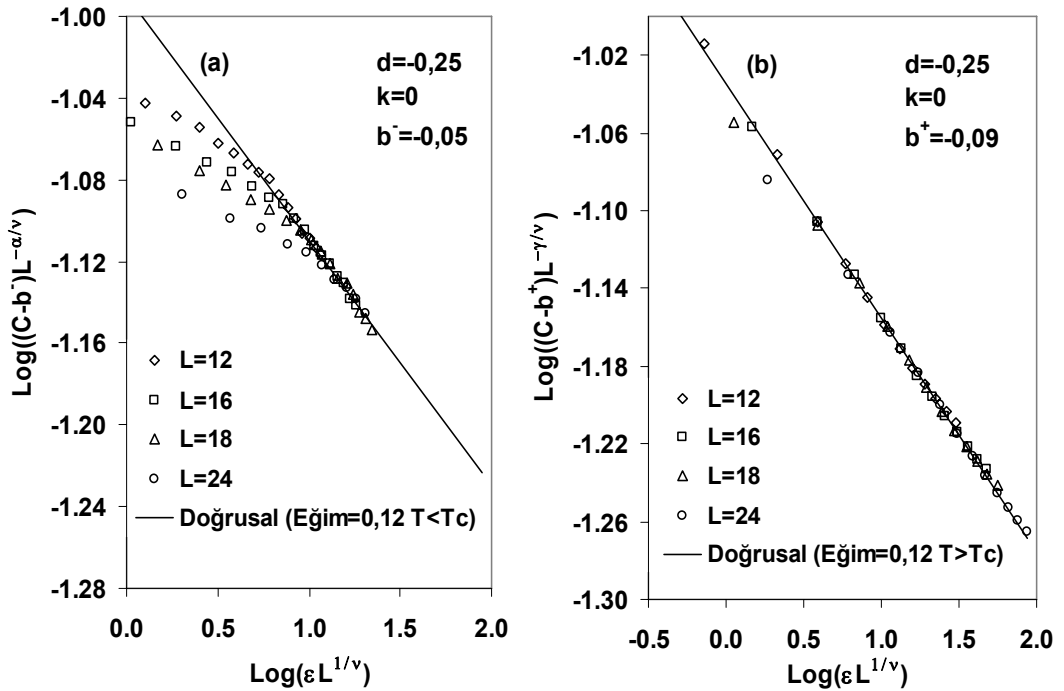
Şekil 4.10. Düzen parametresi m 'nin sonlu örgü ölçeklemesi a) $d=-0,25$, $k=0$ b) $d=-1$, $k=-0,60$.

Benzer şekilde, manyetik alınganlık için Eş.2.42 ile verilen sonlu örgü ölçekleme ifadesi kullanılarak manyetik alınganlık kritik üssü γ tespit edildi. $d=-0,25$, $k=0$ ve $d=-1$, $k=-0,66$ için, farklı kenar uzunluğuna sahip örgüler için $\gamma=1,25$ ve $\nu=0,64$ değerleri alınarak çizilen $kT\chi L^{-\gamma/\nu}$ değerinin $\epsilon L^{1/\nu}$ 'ye karşı değişimlerinin Log-Log grafikleri Şekil 4.11'de verilmektedir. Burada, $T > T_c$ için $\epsilon=(T-T_c)/T$ ve $T < T_c$ için $\epsilon=(T-T_c)/T_c$ 'dir. Manyetik alınganlık verilerinin kritik sıcaklığın altında ve üstünde eğimi 1,25 olan tek bir doğruya uyduğu görülmektedir. Buna göre $\gamma=\gamma'=1,25$ olarak tespit edilmiştir.

Diğer taraftan, öz ısının Eş.2.43'de verilen sonlu örgü ölçekleme bağıntısı kullanılarak, $\text{Log}((C-b^{\pm})L^{-\alpha/\nu})-\text{Log}(\epsilon L^{1/\nu})$ grafiği çizilmiştir. $d=-0,25$, $k=0$ için öz ısının sonlu örgü ölçeklemesi Şekil 4.12'de verilmektedir. $T < T_c$ ve $T > T_c$ için $b^{\pm}$ düzeltme terimi, verilerin uyumuna göre belirlenmiştir. $\alpha=0,12$ ve $\nu=0,64$ alınarak $\text{Log}((C-b^{\pm})L^{-\alpha/\nu})-\text{Log}(\epsilon L^{1/\nu})$ grafiği çizildiğinde, verilerin $T < T_c$ ve $T > T_c$ için eğimi 0,12 olan bir doğruya uyduğu görülmektedir.



Şekil 4.11. Manyetik alınganlık χ 'nin sonlu örgü ölçeklemesi a) $d=-0,25$, $k=0$ b) $d=-1$, $k=-0,60$.

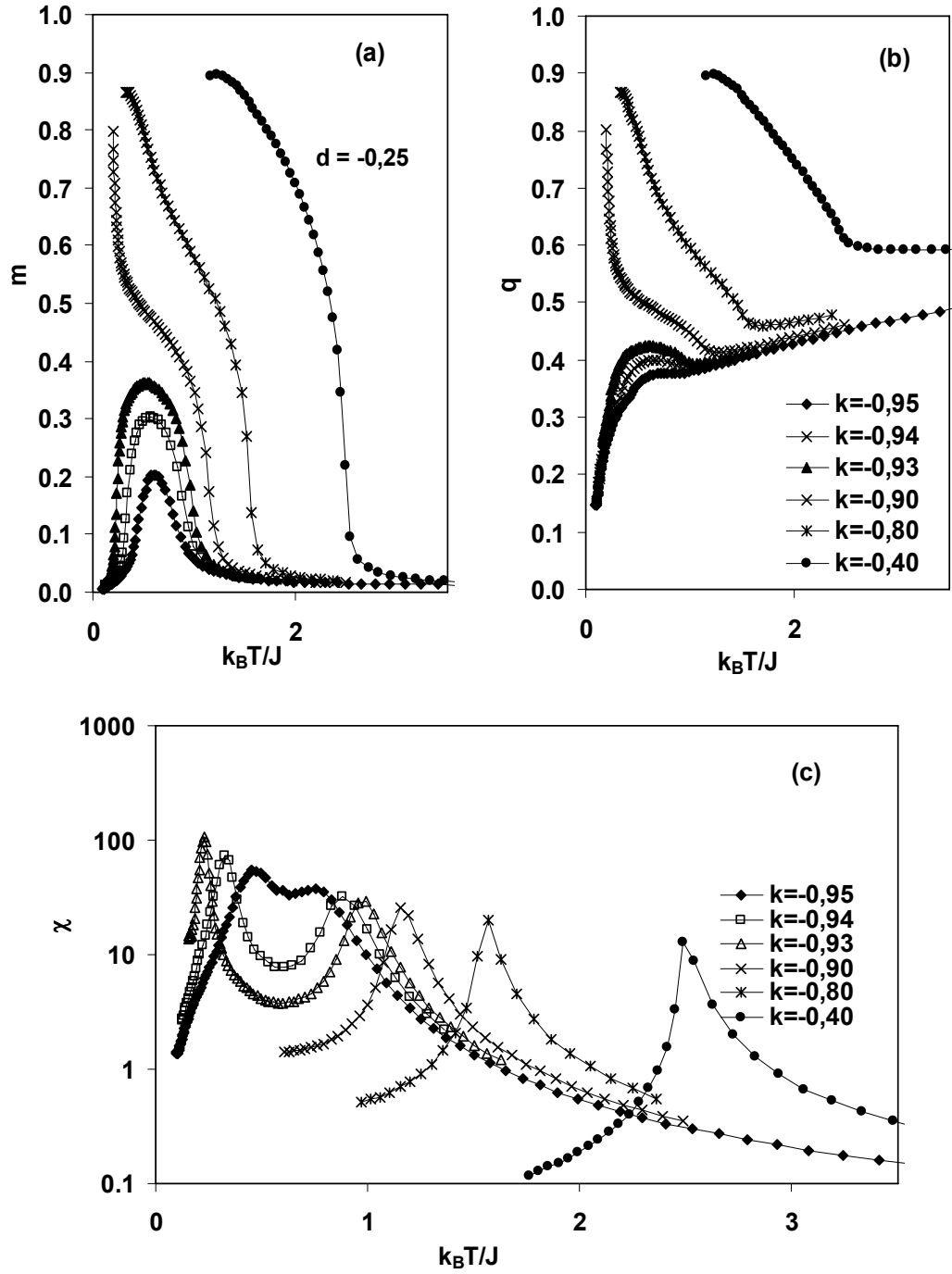


Şekil 4.12. $d=-0,25$ ve $k=0$ parametre seti için öz ısı C 'nin sonlu örgü ölçeklemesi a) $T < T_c$ b) $T > T_c$.

F-S ve F-SQ faz sınırlarının üzerinde, ferromanyetik düzenin bulunduğu (d,k) parametre setlerinde sonlu örgü ölçekleme ifadeleri kullanılarak $v=0,64$, $\beta=0,31$, $\gamma=1,25$ ve $\alpha=0,12$ olarak tespit edilmiştir. Buna göre, modelin, bu bölgedeki parametre değerlerinde, 3-boyutlu Ising model evrensellik sınıfında olduğu belirlenmiştir.

4.2.2. Ardışık $Q \rightarrow F \rightarrow Q$ faz geçişleri

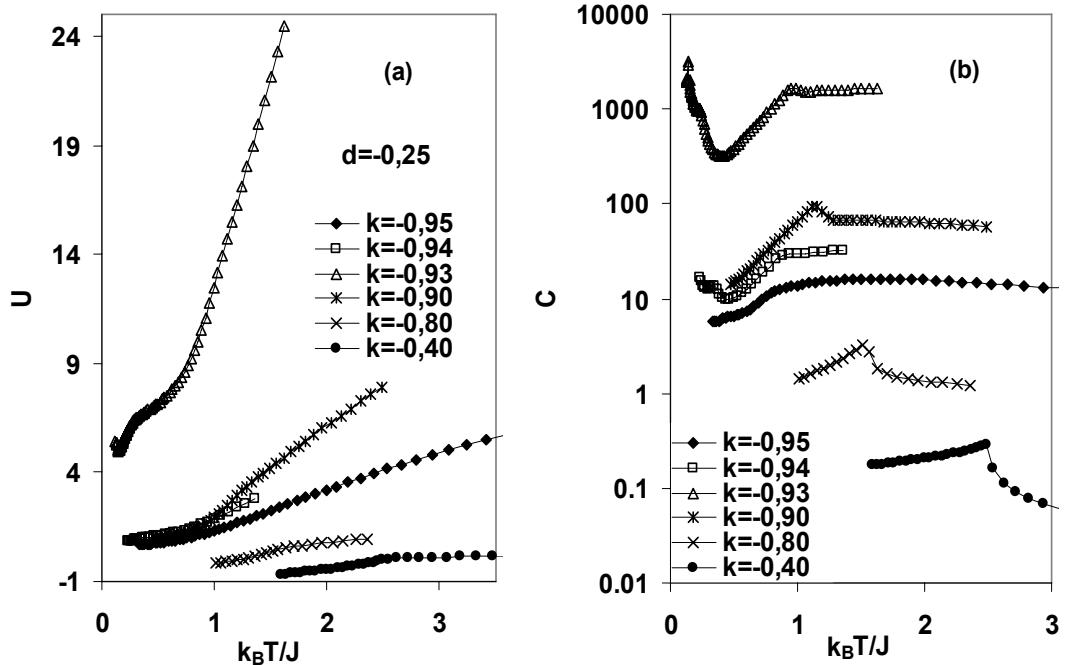
Şekil 4.13.a ve Şekil 4.13.b’de, $d=-0,25$ için farklı k değerleri için hesaplanan düzen parametrelerinin(m ve q) sıcaklıkla değişimleri verilmiştir. $k \geq -0,90$ parametre değerlerinde, sadece ikinci derece $Q \rightarrow F$ faz geçişi oluşmaktadır. Düzen parametresi m, sıcaklıkla sürekli değişim gösterirken, manyetik alınganlık ise ikinci derece faz geçişlerine ait karakteristik pik davranışı sergilemektedir(Şekil 4.13.c). $-0,95 \leq k < -0,90$ parametre aralığında ise, ardışık $Q \rightarrow F \rightarrow Q$ faz geçişleri görülmektedir. Bu parametre aralığında, yüksek sıcaklıkta, m sıfırken, q düzen parametresinin sıfırdan farklı bir değer aldığı görülmektedir. m ve q’nun bu durumu, sistemin kuadrapolar fazda(Q) olduğunun bir göstergesidir. Sıcaklığın azalması ile m ve q’nun arttığı ve belli bir değerden sonra azalmaya başladığı görülmektedir. Buna göre, sistem yüksek sıcaklıkta Q fazda iken, sıcaklığın azalmaya başlaması ile ferromanyetik bir faza geçmektedir. Sıcaklığın daha da azalması sonucunda ise m düzen parametresi sıfıra giderken, q düzen parametresinin belli bir değere gitmektedir. Bu da sistemin bu sıcaklık bölgesinde tekrar Q faza sahip olduğunu gösterir. Buna göre, $-0,95 \leq k < -0,90$ parametre aralığında, ardışık $Q \rightarrow F \rightarrow Q$ faz geçişleri olduğu ortaya konmaktadır. Bu tür faz geçişlerinde, $Q \rightarrow F$ ve $F \rightarrow Q$ faz geçişlerinde, düzen parametresinin sürekli bir değişim gösterdiği görülmektedir. Aynı zamanda, bu parametre bölgesinde, manyetik alınganlık $Q \rightarrow F$ ve $F \rightarrow Q$ faz geçişlerine ait olan iki pike sahiptir (Şekil 4.13.c). Düzen parametresi ve alınganlıkta görülen



Şekil 4.13. $L=18$ 'de $d = -0.25$ için $k = -0.95, -0.94, -0.93, -0.90, -0.80, -0.40$ parametre değerlerinde a) m düzen parametresi b) q düzen parametresi c) Manyetik alınganlık niceliklerinin sıcaklıkla değişimleri.

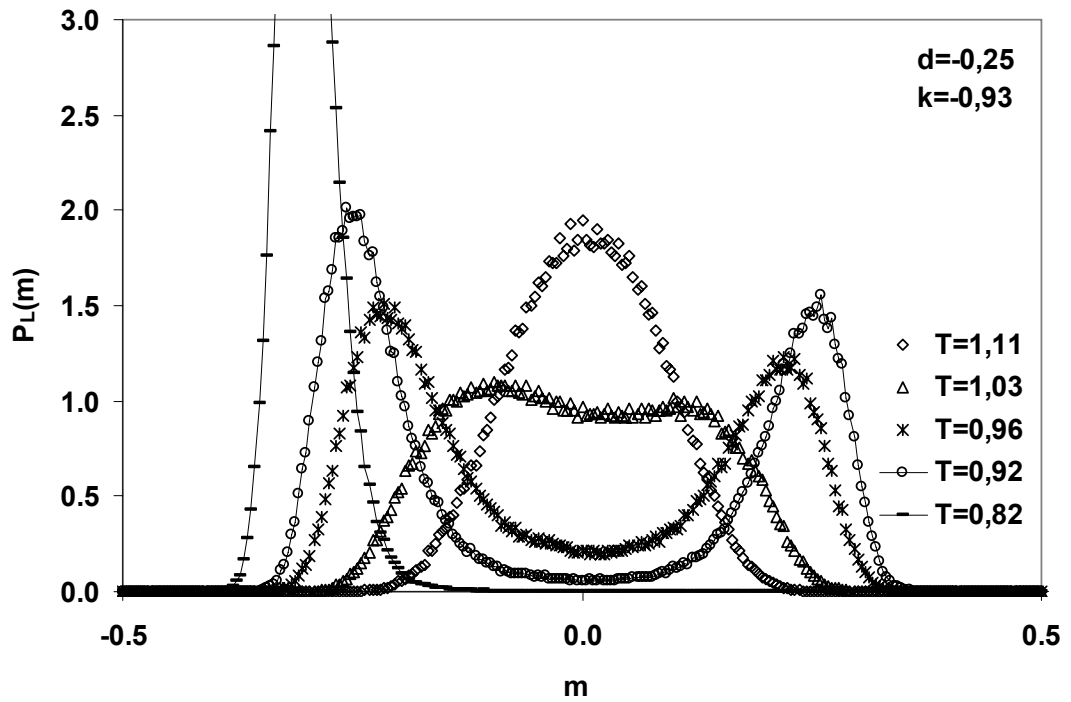
davranışlar, iç enerji ve öz ısının sıcaklıkla değişim grafiklerinde de görülmektedir(Şekil 4.14).

$d=-0,25$ ve $k=-0,93$ 'de görülen ardışık $Q \rightarrow F \rightarrow Q$ faz geçişi için, $L=18$ 'de manyetik alınganlık piklerinden kritik sıcaklık değerleri $T_{c1}=0,97\pm0,02$ ve $T_{c2}=0,23\pm0,01$ olarak tespit edilmiştir. Şekil 4.15'de T_{c1} kritik sıcaklığında oluşan $Q \rightarrow F$ faz geçişinin olduğu bölgede $P(m)$ olasılık dağılımının T_{c1} civarındaki değişimi görülmektedir. $T=1,1$ sıcaklığında, $m=0$ civarında görülen tek pik, yüksek sıcaklıkta oluşan Q faza karşılık gelmektedir. Sıcaklık azalması ile iki pikin oluşmaya başladığı görülmektedir. T_{c1} civarında ise görülen iki pik daha belirginleşmekte ve yükseklikleri birbirine yaklaşmaktadır. Faz geçişinin tamamlandığı bölgede $P(m)$, $m\sim0,25$ civarında tek pik yapısı göstermektedir. Bu da, sistemin düzen parametresi m 'nin $\sim0,25$ civarında olduğu bir düzene sahip olduğunun bir göstergesidir.

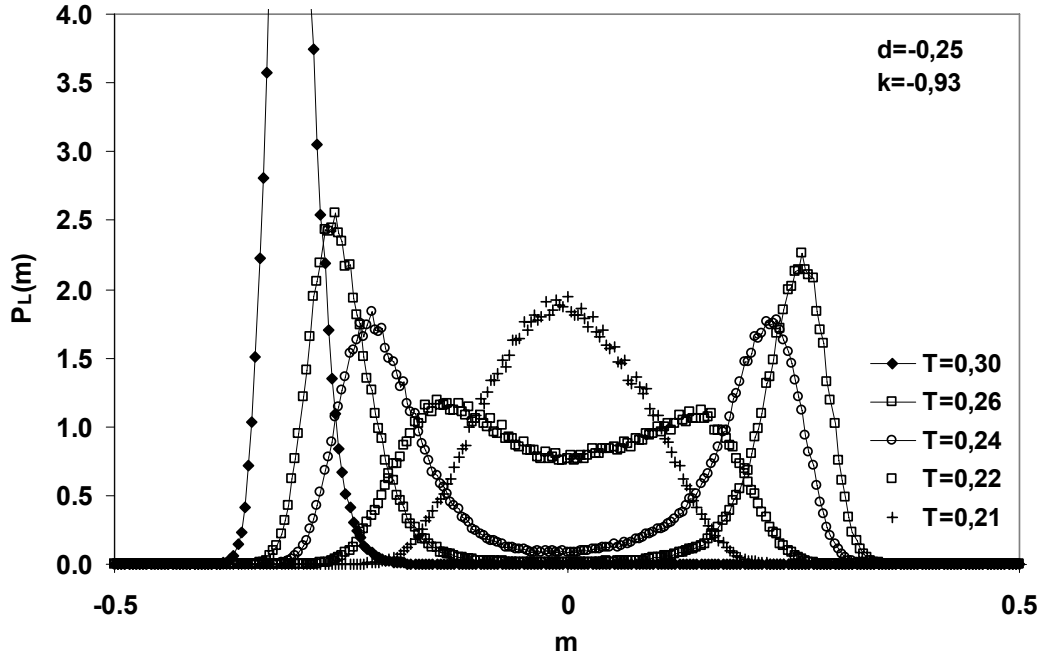


Şekil 4.14. $L=18$ 'de $d = -0,25$ için $k = -0,95, -0,94, -0,93, -0,90, -0,80, -0,40$ parametre değerlerinde a) İç enerji b) Öz ısı niceliklerinin sıcaklıkla değişimleri.

Aynı şekilde, $F \rightarrow Q$ faz geçişine ait $P(m)$ olasılık dağılımının T_{c2} civarındaki değişimi Şekil 4.16'da verilmiştir. Burada faz geçişi, ferromanyetik fazdan kuadrapolar faza doğrudur. Dolayısıyla faz geçişi bölgesi öncesi ($T=0,30$) $m \sim 0,25$ civarında görülen tek pik, faz geçişi bölgesinde iki pike dönüşmektedir. $T=0,24$ sıcaklığında iki pikin yüksekliklerinin birbirine yakın olduğu görülmektedir. Bu da manyetik alınganlık pik değerinden tespit edilen $T_{c2}=0,23 \pm 0,01$ değeri ile uyum içindedir. Kritik sıcaklık civarında görülen bu iki pik, sıcaklığın azalması ile birbirine yaklaşmakta ve $T=0,21$ 'de $m=0$ civarında oluşan tek pike dönüşmektedir. Bu durum sistemin Q faza geçtiği anlamına gelmektedir.



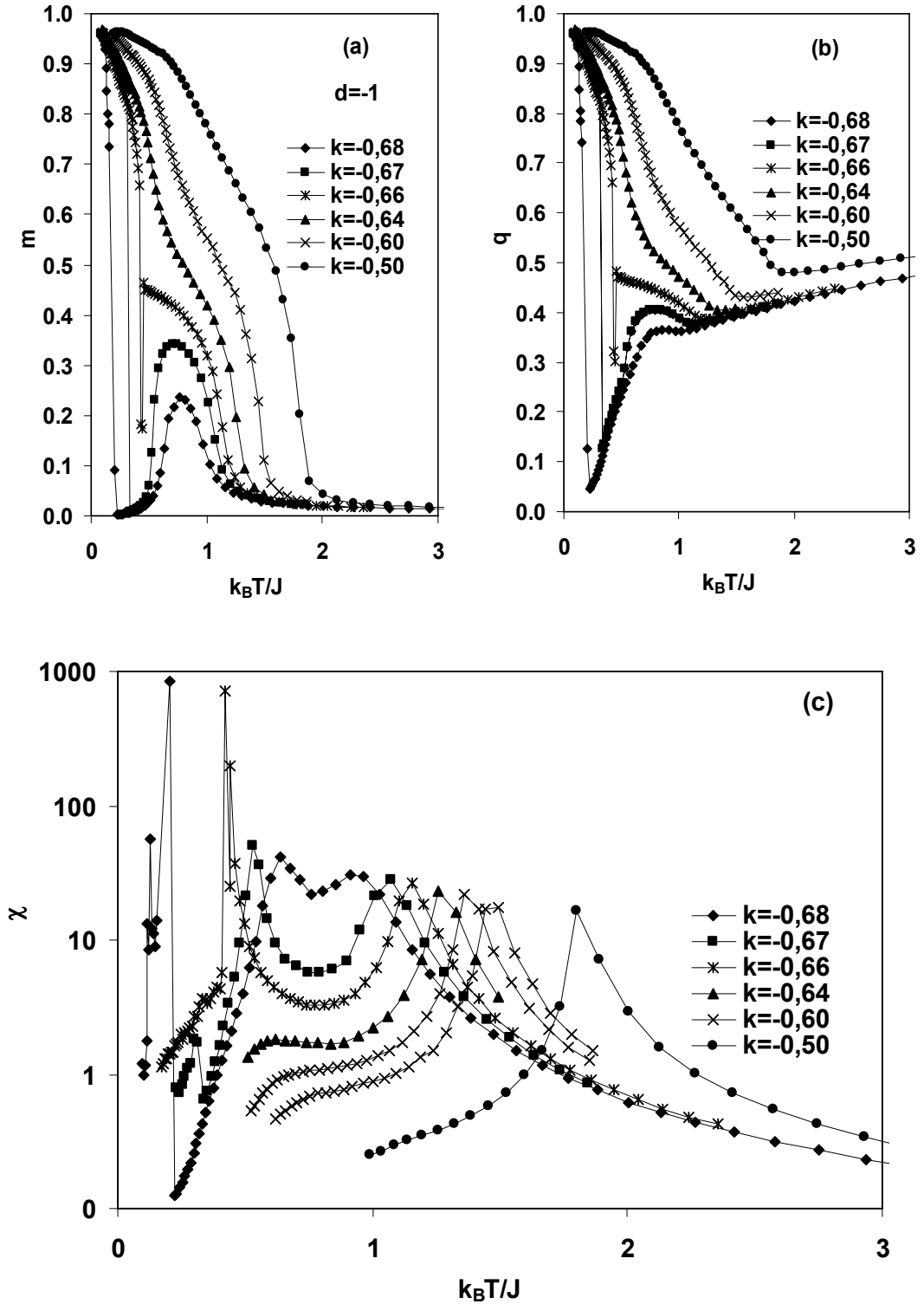
Şekil 4.15. $d=-0,25$ $k=-0,93$ 'de görülen ardışık $Q \rightarrow F \rightarrow Q$ faz geçişindeki yüksek sıcaklıktaki $Q \rightarrow F$ faz geçişine ait $P(m)$ olasılık dağılımının kritik sıcaklık civarındaki değişimi.



Şekil 4.16. $d=-0,25$, $k=-0,93$ için görülen ardışık $Q \rightarrow F \rightarrow Q$ faz geçişindeki düşük sıcaklıktaki $F \rightarrow Q$ faz geçişine ait $P(m)$ olasılık dağılımının kritik sıcaklık civarındaki değişimi.

4.2.3. Tekrarlayan $Q \rightarrow F \rightarrow Q \rightarrow F$ faz geçişleri

Şekil 4.17’de, $d = -1$ için düzen parametreleri ve manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişimi verilmiştir. Şekilden görüleceği gibi, $k > -0,66$ için ikinci derece $Q \rightarrow F$ faz geçişi oluşurken, $k = -0,66, -0,67$ ve $-0,68$ için tekrarlayan $Q \rightarrow F \rightarrow Q \rightarrow F$ faz geçişleri oluşmaktadır. Yüksek sıcaklıkta, m düzen parametresi sıfır ve q sıfırdan farklı bir değerde iken, sıcaklığın azalmaya başlaması ile, m artarak belli bir değerine ulaştıktan sonra tekrar azalmaya başlamaktadır. Bu düşük sıcaklık bölgesinde, m sıfıra giderken q belli bir değerde kalmaktadır. Daha düşük sıcaklık bölgesinde ise, sistemde yeniden bir düzenin oluştuğu, m ve q ’nun değerinin 1’e doğru arttığı görülmektedir. Buna göre, yüksek sıcaklıkta Q fazda olan sistemde, sıcaklığın azalması ile T_{c1} kritik sıcaklığında F faza, T_{c2} ’de Q faza ve T_{c3} ’de F faza bir geçiş oluşmaktadır.



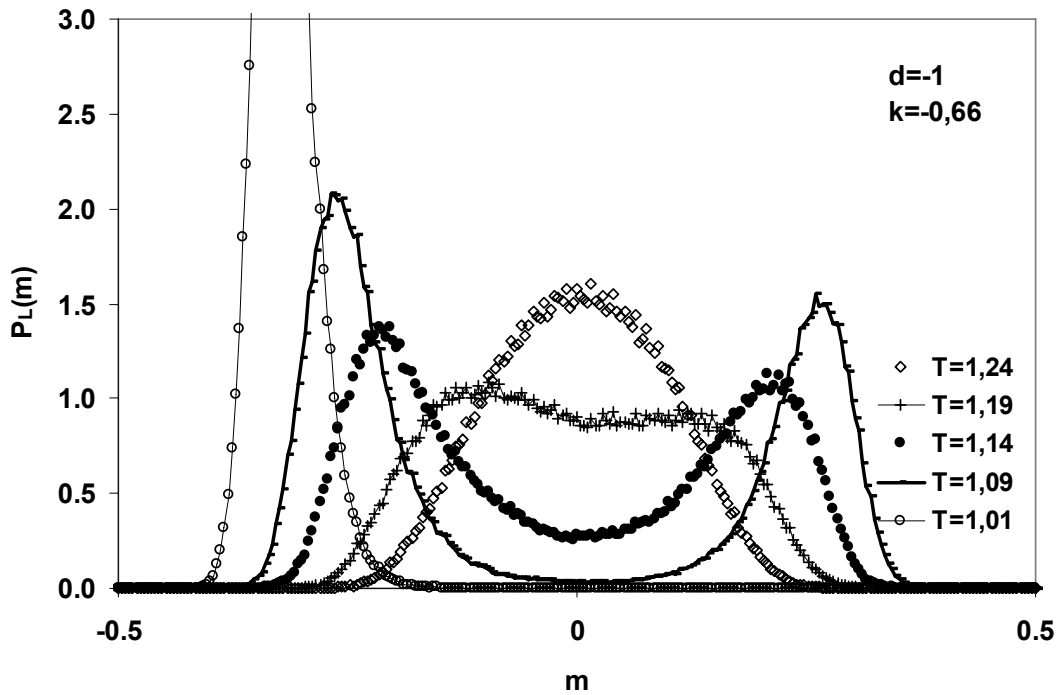
Şekil 4.17. $L=18$ 'de $d = -1$ için $k = -0,68, -0,67, -0,66, -0,64, -0,60, -0,50$ parametre değerlerinde a) m düzen parametresi b) q düzen parametresi c) Manyetik alınganlık niceliklerinin sıcaklıkla değişimleri.

$k = -0,67$ ve $k = -0,68$ 'de görülen tekrarlayan $Q \rightarrow F \rightarrow Q \rightarrow F$ faz geçişinde, sadece en düşük sıcaklıkta, T_{c3} kritik sıcaklığında görülen faz geçişinde düzen parametreleri m ve q kesikli davranış göstermektedir ve manyetik alınganlıkta bu davranışa karşılık gelen keskin bir atlama oluşmaktadır. Yüksek sıcaklıkta T_{c1} 'de görülen $Q \rightarrow F$ ve T_{c2} 'de görülen $F \rightarrow Q$ orta faz geçişinde, m ve q sıcaklıkla sürekli bir değişim göstermekte ve manyetik alınganlıkta bu faz geçişlerine ait karakteristik iki pik oluşmaktadır. $k = -0,66$ 'da, sadece, yüksek sıcaklık $Q \rightarrow F$ faz geçişinin sürekli, diğer geçişlerin süreksiz geçişler olduğu görülmektedir. Manyetik alınganlık ise, T_{c1} 'de karakteristik bir pik, T_{c2} ve T_{c3} 'de m düzen parametresindeki kesikli davranışa karşılık gelen keskin piklere sahiptir(Şekil 4.17.c).

$d = -1$, $k = -0,66$ parametre setinde görülen ardışık $Q \rightarrow F \rightarrow Q \rightarrow F$ faz geçişindeki, yüksek sıcaklıktaki Q fazdan daha düşük sıcaklıktaki F faza ikinci derece faz geçişine ait düzen parametresi m 'nin olasılık dağılımının kritik nokta civarındaki değişimi Şekli 4.18'de verilmektedir. Bu parametre değeri için manyetik alınganlık pik değerinden söz konusu geçiş için kritik sıcaklık değeri $T_{c1}=1,14 \pm 0,02$ olarak tespit edilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi, $P(m)$ 'nin kritik sıcaklık civarındaki değişimi, faz geçişinin ikinci derece olduğu yönünde bilgiler vermektedir. Yüksek sıcaklıkta Q faza karşılık gelen $m=0$ civarındaki tek pik, kritik nokta civarında iki pike dönüşmektedir. Kritik noktadan uzaklaştıkça, piklerin birbirinden uzaklaştığı ve tek pike dönüştüğü görülmektedir.

Şekli 4.19'da en düşük sıcaklıkta görülen birinci derece $Q \rightarrow F$ faz geçişine ait $P(m)$ olasılık dağılımının faz geçişi sıcaklığı civarındaki değişimi görülmektedir. $P(m)$ 'nin bu bölgede, birinci derece faz geçişlerinin karakteristik özelliğini taşıdığı görülmektedir. $P(m)$ olasılık dağılımı, faz geçiş sıcaklığında üç pik göstermektedir. Üç pikin görüldüğü sıcaklık değeri $T=0,44$ ve manyetik alınganlık pik değerinden tespit edilen faz geçiş sıcaklığı ($T_{c3}=0,43 \pm 0,02$) ile uyum içindedir. Bu piklerden ortadaki pik Q kuadrapolar

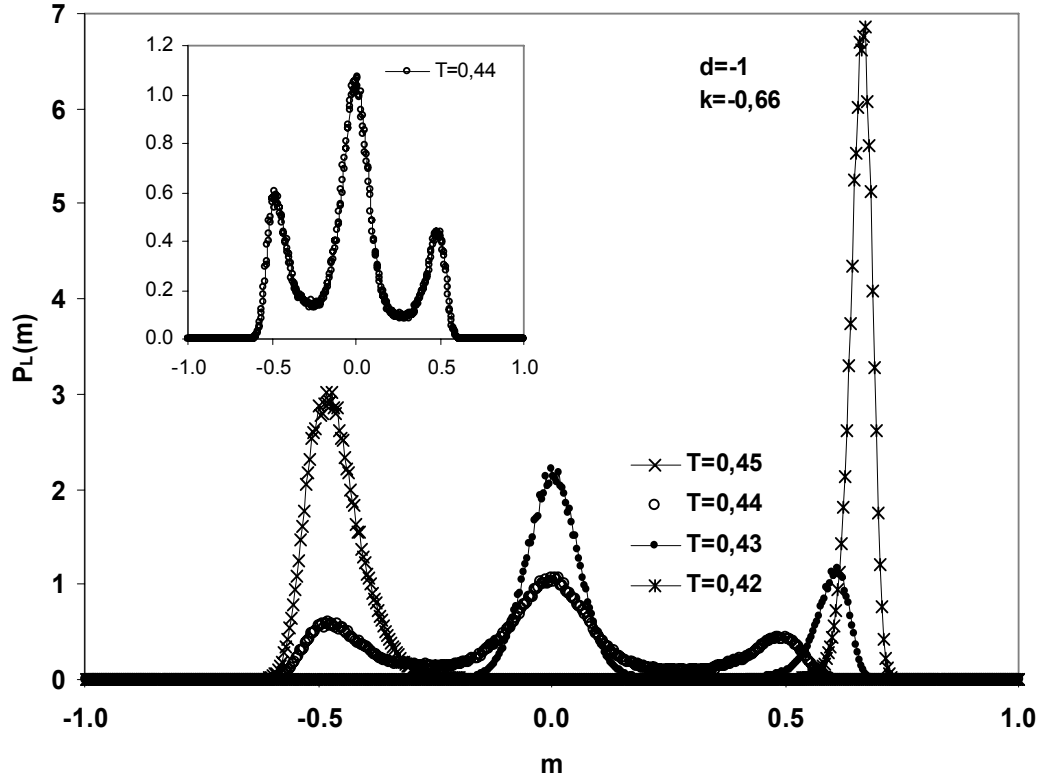
faza karşılık gelirken, diğer iki pik sistemdeki düzene karşılık gelmektedir. Faz geçişi sıcaklığının üzerinde görülen tek pik ise, sistemdeki fazın ferromanyetik düzene geçtiği anlamına gelmektedir. Faz geçiş sıcaklığında $P(m)$ 'de görülen üç pik, birinci derece faz geçişlerinde, faz geçiş sıcaklığında iki fazın bir arada bulunmasından (co-existence) kaynaklanmaktadır. Bunun aksine, ikinci derece faz geçişlerinde, sistemde iki fazın bir arada olması söz konusu değildir. Bu tür faz geçişlerinde sistem iki fazdan birinde bulunabilir.



Şekil 4.18. $d = -1$, $k = -0,66$ değerinde görülen tekrarlayan $Q \rightarrow F \rightarrow Q \rightarrow F$ faz geçişindeki yüksek sıcaklıktaki $Q \rightarrow F$ faz geçişine ait $P(m)$ olasılık dağılımının kritik sıcaklık civarındaki değişimi.

Bethe yaklaşımı sonuçlarına göre, tekrarlayan $Q \rightarrow F \rightarrow Q \rightarrow F$ faz geçişinde en düşük sıcaklıkta görülen $Q \rightarrow F$ faz geçişi dışında kalan tüm ardışık ve tekrarlayan faz geçişlerin sürekli olduğu bildirilmektedir[30]. Ancak tez çalışması kapsamında, modelin cellular automaton simülasyonu sonucunda yapılan analizler sonucunda, tekrarlayan $Q \rightarrow F \rightarrow Q \rightarrow F$ faz geçişlerindeki en düşük sıcaklıkta görülen $Q \rightarrow F$ faz geçişi yanı sıra, $F \rightarrow Q$ orta faz geçişinin birinci derece veya ikinci derece olabileceği tespit edilmiştir[24]. Bu

sonuç, ortalama alan yaklaşımı[25] ve iki-parçacık küme yaklaşımı[29] sonuçları ile benzerlik göstermektedir.

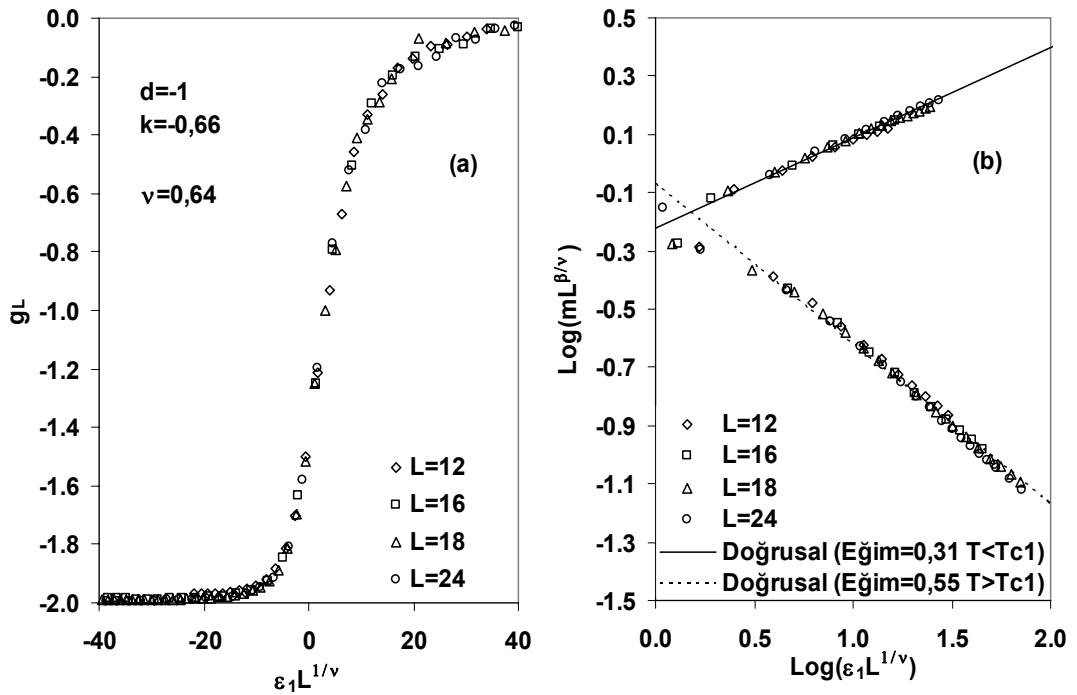


Şekil 4.19. $d = -1$, $k = -0,66$ 'da görülen tekrarlayan $Q \rightarrow F \rightarrow Q \rightarrow F$ faz geçişindeki düşük sıcaklıktaki birinci derece $Q \rightarrow F$ faz geçişine ait $P(m)$ olasılık dağılımının faz geçiş sıcaklığı civarındaki değişimi.

Tekrarlayan $Q \rightarrow F \rightarrow Q \rightarrow F$ faz geçişinde, d ve k parametre değerlerine bağlı olarak görülen ikinci derece $Q \rightarrow F$ faz geçişlerinde, α , β , γ ve ν kritik üslerinin tespitinde Bölüm 2.5'de verilen sonlu örgü ölçekleme bağıntıları kullanılmıştır. Sonlu örgü ölçekleme sonuçları, $d = -1$, $k = -0,67$ parametresinde yüksek sıcaklıkta T_{c1} 'de görülen $Q \rightarrow F$ faz geçişi ve T_{c2} 'de görülen $F \rightarrow Q$ faz geçişi için ve $d = -1$, $k = -0,66$ parametresinde yüksek sıcaklıkta T_{c1} 'de görülen $Q \rightarrow F$ faz geçişi için verilmiştir. Şekil 4.20'de, $d = -1$, $k = -0,66$ için $L=12, 16, 18$ ve 24 kenar uzunluğuna sahip basit kübik örgülerde hesaplanan Binder kümülanlarının ve düzen parametresi m 'nin, Şekil 4.21'de manyetik alınganlık ve öz ısı niceliklerinin sonlu örgü

ölçeklemesi grafikleri görülmektedir. Binder kümülanlarının kesim noktasından elde edilen kritik sıcaklık değeri $T_{c1}=1,15\pm0,01$ ve $\varepsilon_1=T-T_{c1}/T_{c1}$ olmak üzere, farklı örgülerde hesaplanan g_L değerlerinin $\varepsilon_1 L^{1/\nu}$ ye karşı grafiğinde, verilerin $\nu=0,64$ değeri için tek bir eğriye uydukları görülmektedir(Şekil 4.20.a). Buna göre, bu faz geçişine ait ν kritik üssünün değeri 0,64 olarak tespit edilmiştir.

Diğer taraftan düzen parametresi için $\nu=0,64$ ve $\beta=0,31$ değerleri alınarak $\text{Log}(mL^{1/\nu})-\text{Log}(\varepsilon_1 L^{\beta/\nu})$ grafiğinde(Şekil 4.20.b), verilerin $T<T_c$ bölgesinde eğimi 0,31, $T>T_c$ bölgesinde eğimi 0,55 olan doğrulara uyduğu görülmektedir.

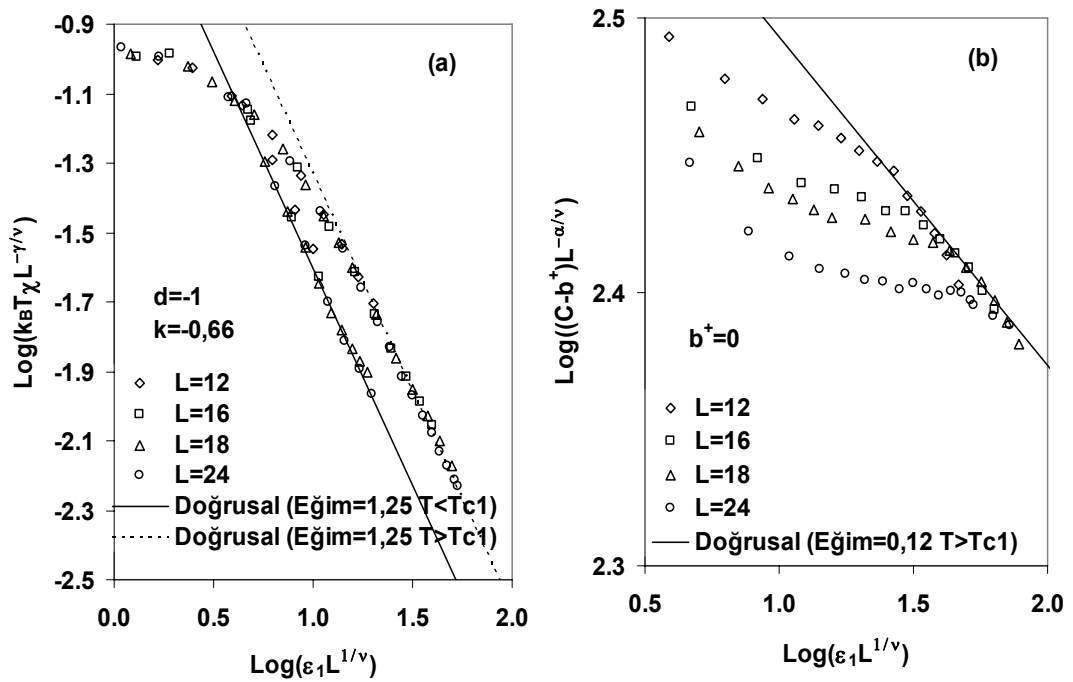


Şekil 4.20. $d = -1$, $k = -0,66$ 'da görülen tekrarlayan $Q \rightarrow F \rightarrow Q \rightarrow F$ faz geçişindeki yüksek sıcaklıkta görülen ikinci derece $Q \rightarrow F$ faz geçişine ait a) Binder kümülanının sonlu örgü ölçeklemesi b) m düzen parametresinin sonlu örgü ölçeklemesi.

Benzer şekilde, γ kritik üssünün tespit edilmesi amacıyla, manyetik alınganlık için $\text{Log}(k_B T \chi L^{-\gamma/\nu})-\text{Log}(\varepsilon_1 L^{1/\nu})$ grafiğinden, verilerin $T < T_{c1}$ ve $T > T_{c1}$ için eğimi

1,25 olan doğruya uyduğu görülmüştür. Öz ısının ölçeklemesinde ise $\text{Log}(k_B T \chi L^{-\alpha/\nu}) - \text{Log}(\varepsilon_1 L^{1/\nu})$ grafiğinden $\alpha = \alpha' = 0,12$ olarak tespit edilmiştir.

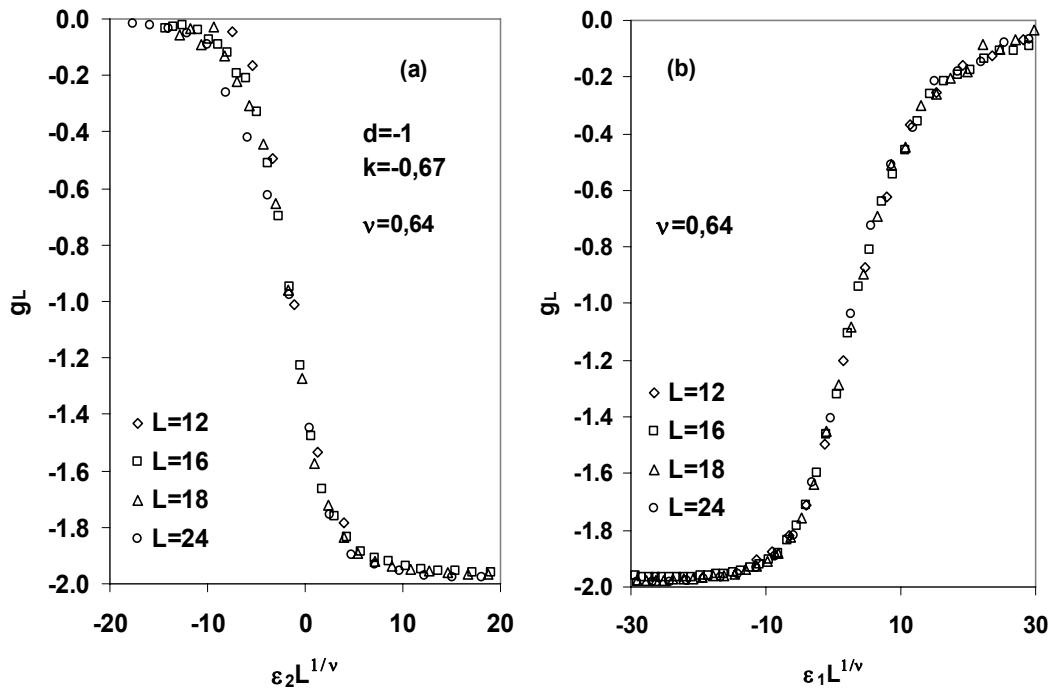
Sonuçta, $d = -1$, $k = -0,66$ 'da yüksek sıcaklıktaki $Q \rightarrow F$ faz geçişinde tespit edilen kritik üslerin 3-boyutta Ising model kritik üsleri ile uyumlu olduğu görülmektedir.



Şekil 4.21. $d = -1$, $k = -0,66$ 'da görülen tekrarlayan $Q \rightarrow F \rightarrow Q \rightarrow F$ faz geçişindeki yüksek sıcaklıkta görülen ikinci derece $Q \rightarrow F$ faz geçişine ait a) Manyetik alınganlığın sonlu örgü ölçeklemesi b) Öz ısının $T > T_{c1}$ için sonlu örgü ölçeklemesi.

$d = -1$, $k = -0,67$ parametre setinde görülen ikinci derece $Q \rightarrow F$ ve $F \rightarrow Q$ faz geçişleri için Binder kümülanları $L=12$, 16, 18 ve 24 kenar uzunluğuna sahip örgülerde hesaplandı. Farklı örgülerde hesaplanan Binder kümülanlarının kesim noktasından, yüksek sıcaklıkta görülen $Q \rightarrow F$ faz geçişi için sonsuz kritik sıcaklık değeri, $T_{c1}(\infty) = 1,08 \pm 0,02$ ve daha sonraki $F \rightarrow Q$ faz geçişi için $T_{c2}(\infty) = 0,53 \pm 0,05$ olarak tespit edilmiştir. Bu sonsuz kritik sıcaklık değerleri ve $\nu=0,64$ alınarak Binder kümülanlarının ölçeklemesi

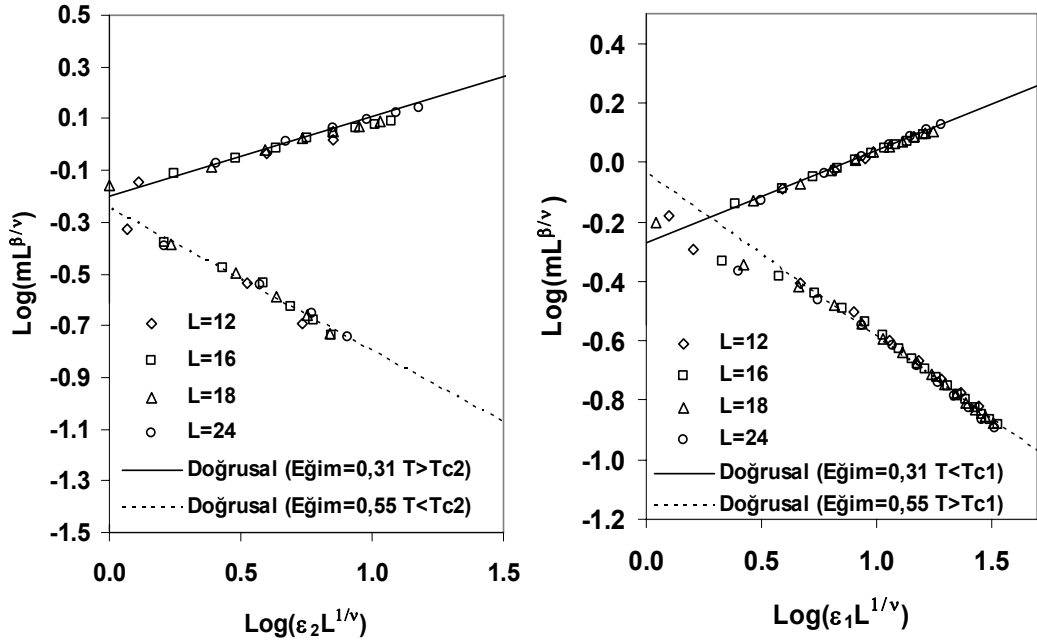
Şekil 4.22'de verilmektedir. Şekil 4.22.a'da, $T_{c2}(\infty)$ kritik sıcaklığında oluşan $F \rightarrow Q$ faz geçişi için, Şekil 4.22.b'da, $T_{c1}(\infty)$ kritik sıcaklığında oluşan $Q \rightarrow F$ faz geçişi için Binder kümülanlarının sonlu örgü ölçekleme grafikleri görülmektedir. Buna göre, her iki faz geçişinin de $\nu=0,64$ kritik üssü ile karakterize edildiği sonucu ortaya konmaktadır.



Şekil 4.22. $d=-1$, $k=-0,67$ için Binder kümülanlarının sonlu örgü ölçeklemesi
a) $T_{c2}(\infty)$ kritik sıcaklığında oluşan $F \rightarrow Q$ faz geçişine ait b) $T_{c1}(\infty)$ kritik sıcaklığında oluşan $Q \rightarrow F$ faz geçişine ait.

Aynı faz geçişlerine ait düzen parametresi m için $\text{Log}(mL^{1/\nu}) - \text{Log}(\epsilon L^{\beta/\nu})$ grafiği çizildiğinde, verilerin $\nu=0,64$ ve $\beta=0,31$ değerlerinde bir doğruya uydukları tespit edilmiştir. Şekil 4.23.a'da $T_{c2}(\infty)$ kritik sıcaklığında oluşan $F \rightarrow Q$ faz geçişi için, Şekil 4.23.b'de, $T_{c1}(\infty)$ kritik sıcaklığında oluşan $Q \rightarrow F$ faz geçişi için düzen parametrelerinin $\nu=0,64$ ve $\beta=0,31$ değerlerinde sonlu örgü ölçekleme grafikleri görülmektedir. Buna göre, $F \rightarrow Q$ faz geçişinde, verilerin $T < T_{c2}(\infty)$ için eğimi 0,55, $T > T_{c2}(\infty)$ için eğimi 0,31 olan doğrulara uyduğu tespit edilmiştir. $Q \rightarrow F$ faz geçişinde ise, verilerin $T < T_{c1}(\infty)$ için eğimi 0,31, $T > T_{c1}(\infty)$ için eğimi 0,55 olan doğrulara uyduğu tespit edilmiştir.

Manyetik alınganlık kritik üssü γ ve öz ısı kritik üssü α değerleri de, sonlu örgü ölçekleme sonuçları ile kritik sıcaklığın altında ve üstünde $\gamma=\gamma'=1,25$ ve $\alpha=\alpha'=0,12$ olarak tespit edilmiştir.



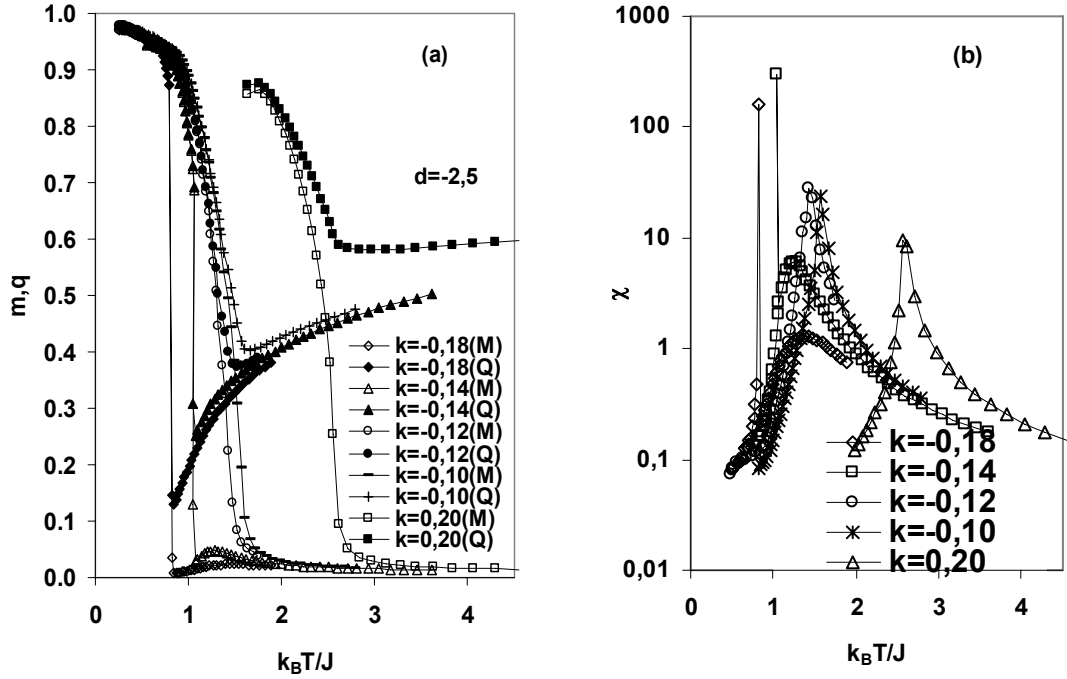
Şekil 4.23. $d=-1$ $k=-0,67$ için m düzen parametresinin sonlu örgü ölçeklemesi
a) $T_{c2}(\infty)$ kritik sıcaklığında oluşan $F \rightarrow Q$ faz geçişine ait b) $T_{c1}(\infty)$ kritik sıcaklığında oluşan $Q \rightarrow F$ faz geçişine ait.

4.2.4. Birinci derece $Q \rightarrow F$ faz geçişleri

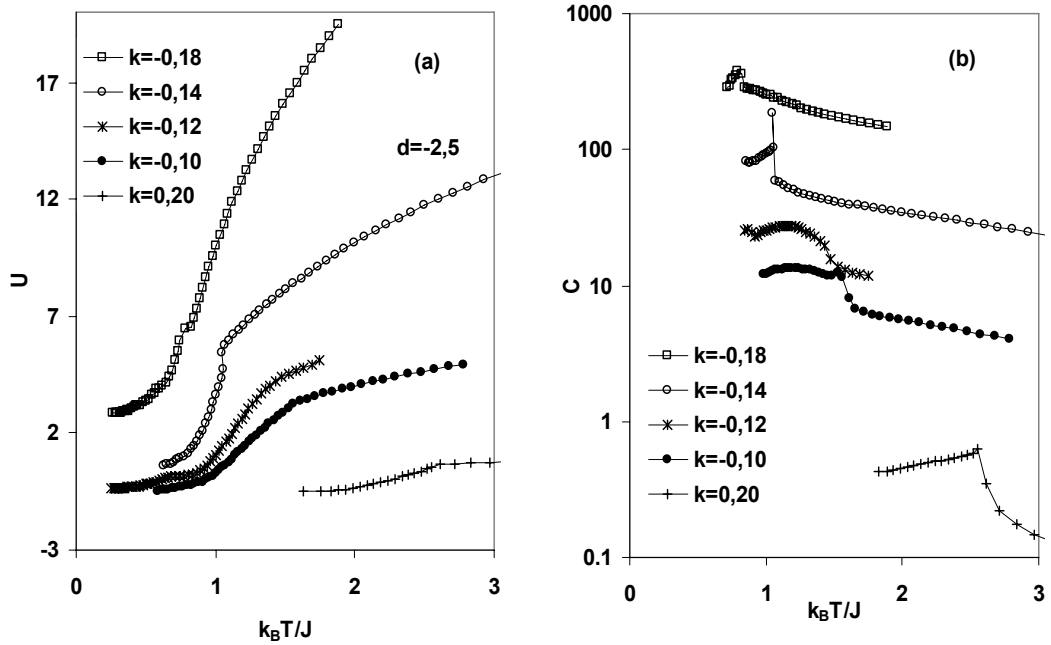
Son olarak, $L=18$ 'de, $d=-2,5$ için farklı k parametre değerlerinde hesaplanan düzen parametreleri ve manyetik alınganlık verilerinin sıcaklıkla değişimleri Şekil 4.24'de verilmektedir. $d=-2,5$ için yapılan hesaplamalarda, ardışık veya tekrarlayan faz geçişlerinin oluşmadığı tespit edilmiştir. $d=-2,5$ için, düzen parametresi m ve q 'nun sıcaklıkla değişimleri incelendiğinde, yüksek sıcaklıkta m sıfırken, q 'nun belli değerde olduğu görülmektedir. Sıcaklığın azalması ile m artmaya başlarken q azalmakta ve faz geçiş sıcaklığından sonra her iki nicelikte 1'e doğru artmaktadır. Bu durum, sistemde kuadrapolar fazdan(Q) ferromanyetik faza(F) bir faz geçişinin

oluşturduğunu göstermektedir. Ancak, $d = -2,5$ için, $k \geq -0,12$ parametre değerlerinde m ve q 'da sürekli bir değişim oluşurken $k < -0,12$ için süreksizlik ortaya çıkmaktadır. Buna göre, $k \geq -0,12$ için ikinci derece, $k < -0,12$ için birinci derece bir faz geçişi oluşmaktadır. Bununla birlikte, ikinci derece faz geçişinin gözlemlendiği parametre değerlerinde manyetik alınganlık karakteristik davranış göstermektedir. Birinci derece faz geçişlerinde ise, düzen parametresi m 'de görülen süreksizliğe manyetik alınganlıkta görülen keskin atlamalar eşlik etmektedir. Benzer davranışlar, enerji ve öz ısının sıcaklıkla değişimlerinde de gözlenmektedir(Şekil 4.25).

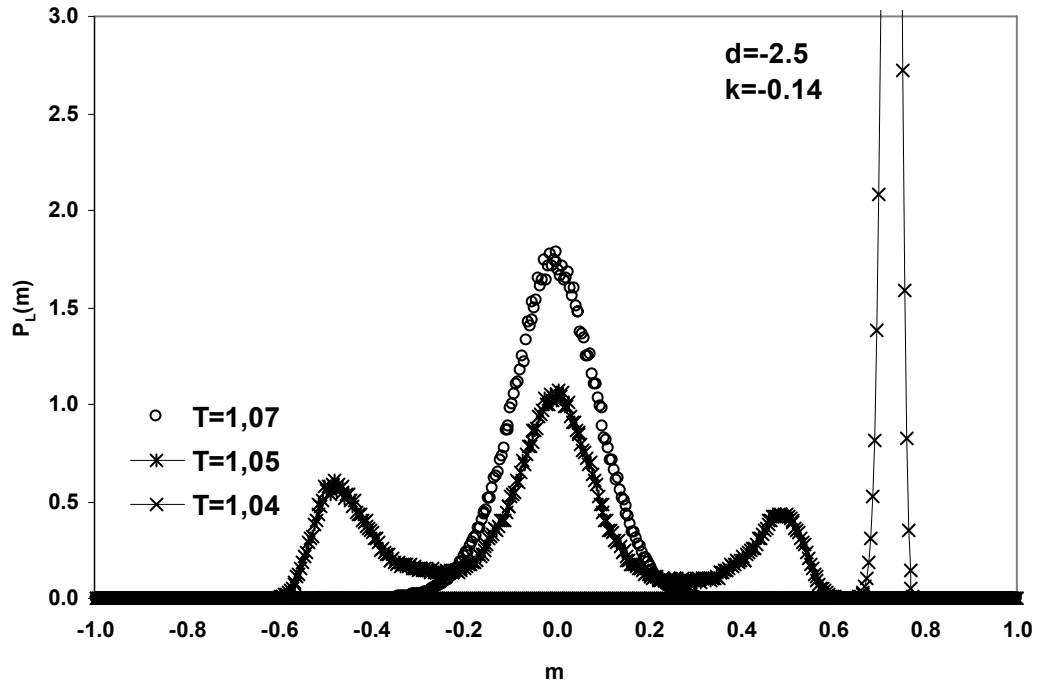
Buna ek olarak, $P(m)$ olasılık dağılımının faz geçiş sıcaklığı civarındaki davranışı incelendiğinde, $k \geq -0,12$ parametre bölgesinde faz geçişinin ikinci derece, $k < -0,12$ için birinci derece olduğu yönünde bilgiler elde edilmiştir. İkinci derece faz geçişlerinde, faz geçiş noktasında düzene karşılık gelen iki pik oluşmaktadır. Birinci derece faz geçişlerinde ise faz geçiş bölgesinde düzen ve düzensiz fazı temsil eden pikler ortaya çıkmaktadır. Şekil 4.26'da $k = -0,14$ değerinde görülen birinci derece faz geçişine ait olan $P(m)$ olasılık dağılımının faz geçiş sıcaklığı civarında değişimi verilmiştir. Sistem, faz geçiş sıcaklığından önce Q fazdadır ve bu durum, $P(m)$ 'de $m=0$ civarında tek pik olarak ortaya çıkmaktadır. Diğer taraftan, faz geçiş sıcaklığında, hem Q fazın hem de F fazın bir arada bulunmasına karşılık gelen üç pikten ortada bulunan pik Q fazı, diğer iki pik ise F fazı temsil etmektedir. Faz geçişinden sonra ise $m \sim 0,75$ civarında tek pik görülmektedir ve sıcaklık azaldıkça bu pik $m \sim 1$ civarında olacak şekilde kaymaktadır.



Şekil 4.24. $d = -2.5$ için a) m ve q düzen parametreleri b) Manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişimi.



Şekil 4.25. $d = -2.5$ için a) İç enerji b) Öz ısının sıcaklıkla değişimi.



Şekil 4.26. $d = -2,5$ ve $k = -0,14$ için düzen parametresi olasılık dağılımı $P_L(m)$ 'nin faz geçiş sıcaklığı civarında değişimi.

4.2.5. $k=-0,5$ için (d,t) faz diyagramı

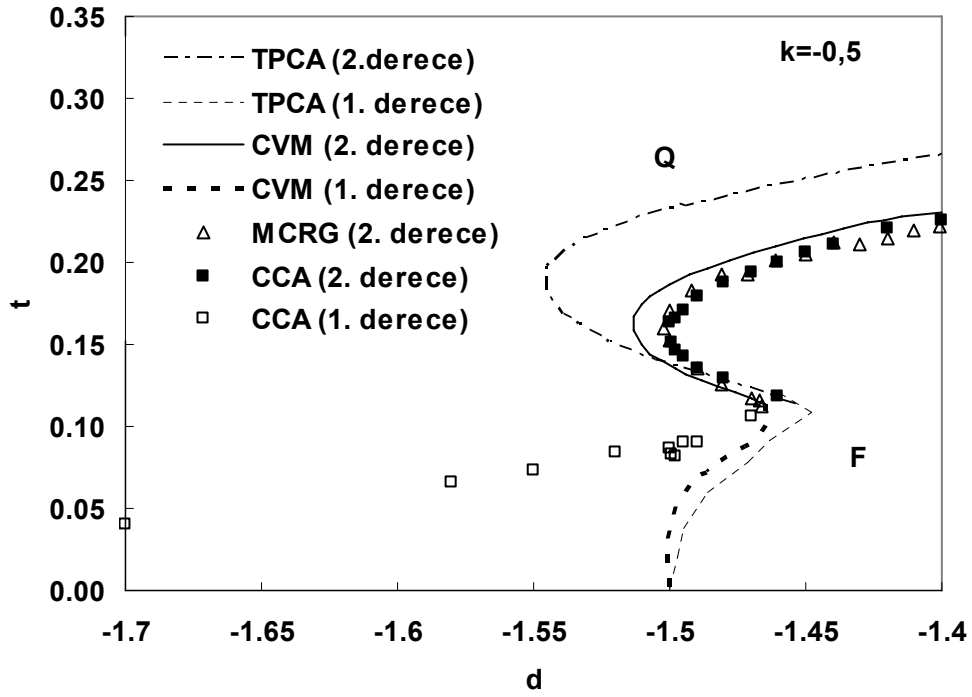
3-boyutlu BEG modelin, $k < 0$ için ortalama alan teorisi[25] kullanılarak yapılan çalışmalar sonucu ortaya konan global faz diyagramının, kritik –son nokta (critical-end point) olarak adlandırılan düzenli fazda(ferromanyetik) bir kritik nokta içerdiği bildirilmektedir. Ortalama alan teorisi sonuçlarında, $-1 < k < -0,18$ parametre aralığında faz diyagramlarında, ikinci derece faz geçişi çizgisinin birinci derece faz geçişi çizgisi üzerinde yer alan kritik-son noktada sonlandığı ve birinci derece faz geçişi çizgisinin ferromanyetik düzen içinde bir kritik noktada sonlandığı ortaya konmaktadır. Ayrıca, bu sonucun, renormalizasyon grup teorisi sonuçları ile uyum içinde olduğu görülmektedir[26]. Diğer taraftan, CVM[28], TPCA[29] ve MCRG[27] çalışmalarında ise, kritik-son noktanın oluşmadığı ortaya konmuştur.

Çalışmalar kapsamında, $-1 < k < -0,18$ parametre aralığında, BEG modelin cellular automaton ile simülasyonu sonucu, faz yapısının elde edilmesi ve kritik-son noktanın varlığının araştırılması, farklı yöntemler kullanılarak ortaya konan sonuçların test edilmesi açısından büyük önem taşımaktadır.

Şekil 4.27’de, $k = -0,5$ için cellular automaton ile simülasyonu sonucunda oluşturulan (d, t) faz diyagramı verilmiştir. Faz geçiş türlerinin belirlenmesi amacıyla $L=18$ ’de hesaplanan düzen parametreleri (m ve q), manyetik alınganlık, iç enerji ve öz ısı niceliklerinin sıcaklıkla değişimleri incelenmiştir. Faz diyagramının oluşturulmasında, sıcaklık değerleri manyetik alınganlık pik değerlerinden tespit edilmiştir.

Elde edilen sonuçlara göre, $k = -0,5$ için, $d > -1,46$ parametre bölgesinde Q fazı ile F fazı arasında ikinci derece faz geçişleri, $-1,5 < d < -1,46$ parametre bölgesinde tekrarlayan faz geçişleri oluşmaktadır. İkinci derece faz geçişi çizgisinin MCRG[27] sonuçları ile çok iyi uyum içinde olduğu, diğer taraftan CVM[28] ve TPCA[29] sonuçları ile benzer davranış gösterdiği görülmektedir. Ancak, birinci derece faz sınırında, bu yöntemlerin sonuçlarından farklı olarak $-1,5 < d < -1,7$ parametre bölgesinde birinci derece $Q \rightarrow F$ faz geçişinin olduğu tespit edilmiştir[24].

Bunun yanı sıra, MFA ve RG çalışmalarından farklı olarak, faz diyagramının kritik-son nokta içermediği tespit edilmiştir. Faz diyagramında sadece ikinci derece faz geçişinin birinci derece faz geçişine dönüştüğü üçlü kritik noktanın varlığı tespit edilmiştir. Sonuçların MCRG, CVM ve TPCA sonuçları ile uyumlu olduğu görülmektedir.



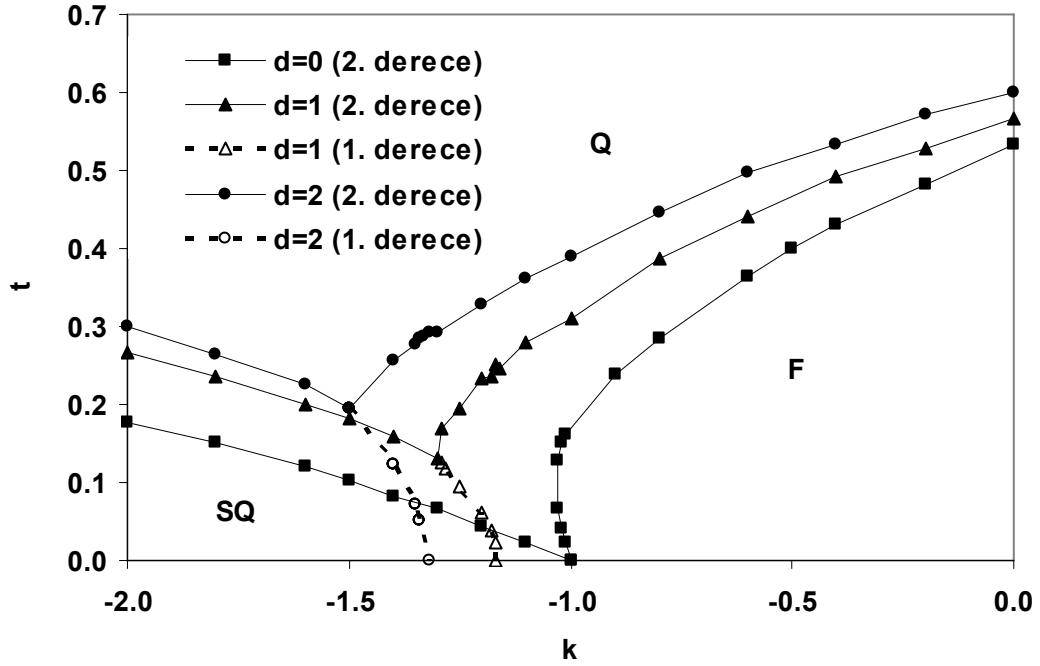
Şekil 4.27. $k=-0,5$ için (d,t) uzayında faz diyagramı.

4.3. S-SQ ve F-SQ Faz Sınırları Civarındaki Hesaplamalar

Taban durumda, $d > 0$ ve $k < -1 - d/6$ parametre setlerinde görülen SQ faz bölgesinde (Şekil 4.3) faz yapısının karakteristik özellikleri, A ve B alt örgüler olmak üzere, her bir alt örgü için düzen parametreleri (m_A , m_B , q_A , q_B) ile belirlenmektedir [25,30]. S-SQ ve F-SQ faz sınırları civarında ve SQ faz bölgesinde, alt örgü düzen parametreleri, manyetik alınganlık, iç enerji ve öz ısı niceliklerinin sıcaklıkla değişimleri $d=0, 1, 2$ için çeşitli k değerlerinde hesaplandı. Hesaplamalar, $L=18$ kenar uzunluğuna sahip basit kübik örgü üzerinde yapıldı. Bu parametre değerlerinde oluşturulan (k,t) faz diyagramları için, öz ısı pik değerlerinden tespit edilen sıcaklık değerleri kullanıldı.

Şekil 4.28'de, $d=0, 1$ ve 2 için elde edilen (k,t) faz diyagramları görülmektedir. Şekilde, açık ve kapalı semboller, sırasıyla, birinci ve ikinci derece faz geçişlerini göstermektedir. Faz diyagramının F, Q ve SQ olmak

üzere üç farklı fazı içerdiği tespit edilmiştir. Sistemde d ve k parametrelerinin belirli değerlerinde, $Q \rightarrow F$ ve $Q \rightarrow SQ$ faz geçişleri, faz sınırı civarında F , Q ve SQ fazları arasında ardışık faz geçişleri oluşmaktadır.



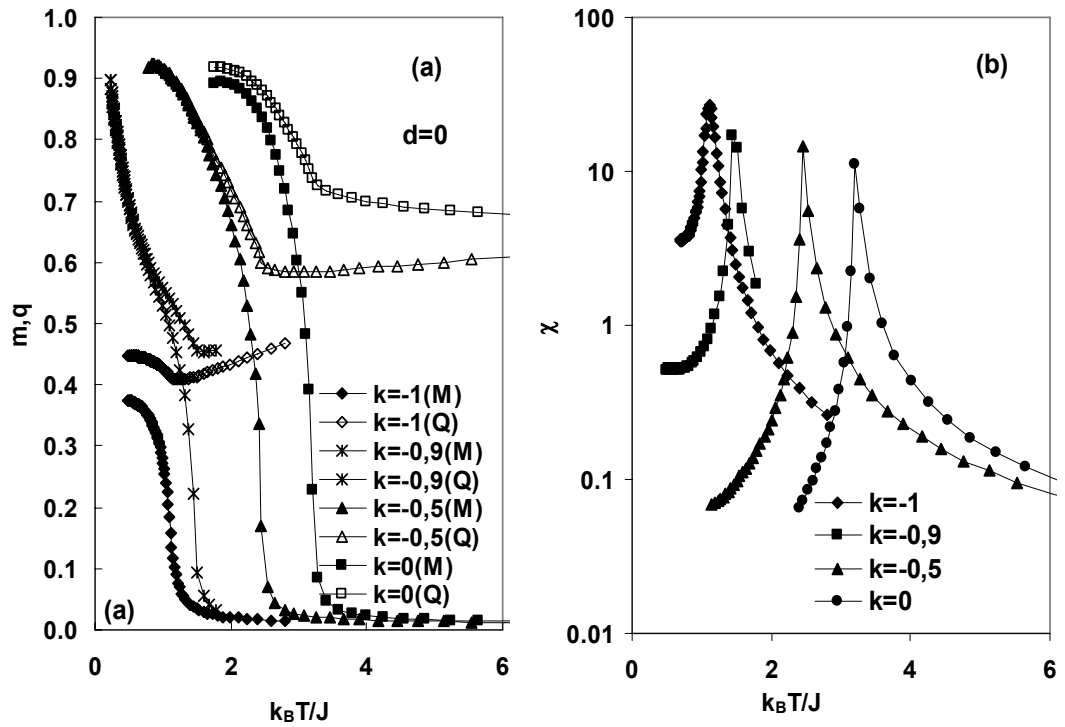
Şekil 4.28. $d = 0, 1$ ve 2 için elde edilen (k, t) faz diyagramları.

Yapılan incelemeler sonucunda, $d=0$ için $k \geq -1$, $d=1$ için $k \geq -1,16$ ve $d=2$ için $k \geq -1,33$ parametre değerlerinde ikinci derece $Q \rightarrow F$ faz geçişi olduğu tespit edilmiştir. Diğer taraftan, $d=0$ için $-1,04 < k < -1$ parametre değerlerinde ardışık $Q \rightarrow F \rightarrow Q \rightarrow SQ$ faz geçişleri, $d=1$ için $-1,3 < k \leq -1,16$ ve $d=2$ için $-1,5 < k \leq -1,34$ değerlerinde ardışık $Q \rightarrow F \rightarrow SQ$ faz geçişleri oluşmaktadır. $d=0$ için $k \leq -1,04$, $d=1$ için $k \leq -1,3$ ve $d=2$ için $k \leq -1,5$ parametrelerinde ise ikinci derece $Q \rightarrow SQ$ faz geçişleri görülmektedir.

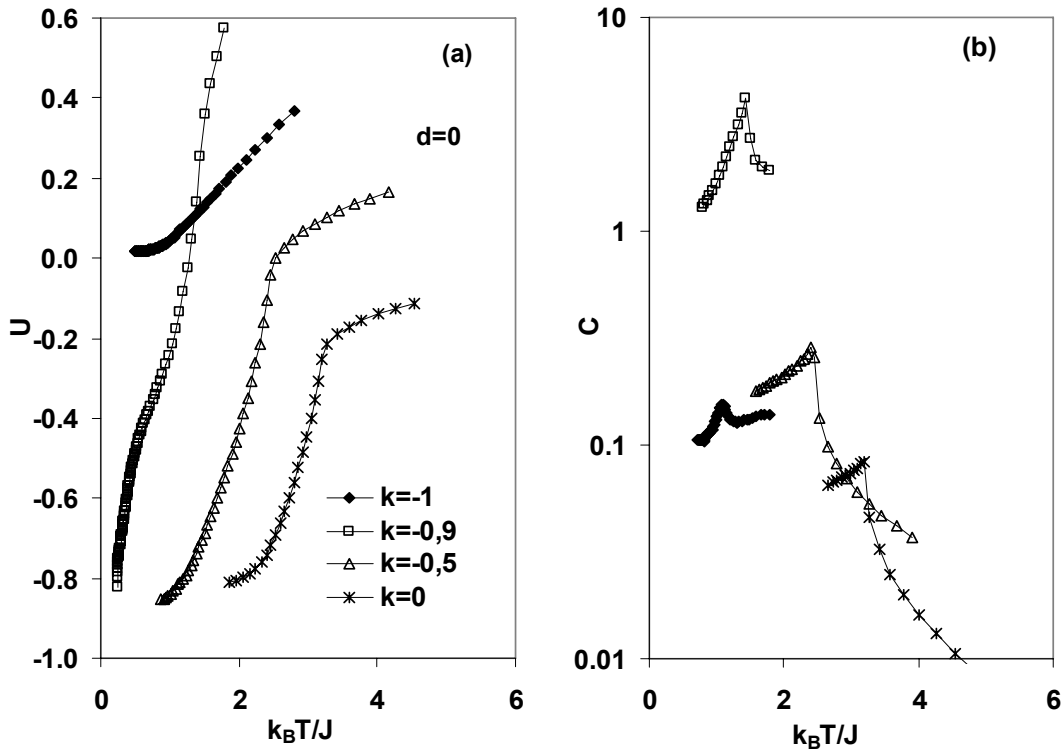
Şekil 4.29'da $d=0$ ve $k \geq -1$ için, düzen parametreleri ve manyetik alinganlığın sıcaklıkla değişim grafikleri verilmiştir. Düzen parametrelerinin değişimi incelendiğinde, yüksek sıcaklıkta görülen kuadrapolar fazdan($m=0$,

$q \neq 0$) düşük sıcaklıkta ortaya çıkan ferromanyetik faza ($m \neq 0, q \neq 0$) sürekli bir geçişin olduğu görülmektedir. m düzen parametresindeki bu değişim, manyetik alınganlıkta tek pik olarak ortaya çıkmaktadır. İç enerji ve öz ısıda görülen değişim de benzer şekildedir.

Şekil 4.30'da iç enerji ve öz ısının sıcaklıkla değişimleri verilmiştir. İç enerjinin sıcaklıkla sürekli değiştiği ve öz ısının karakteristik tek pik gösterdiği görülmektedir.



Şekil 4.29. $d=0$ için a) m ve q düzen parametrelerinin b) Manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişimi.



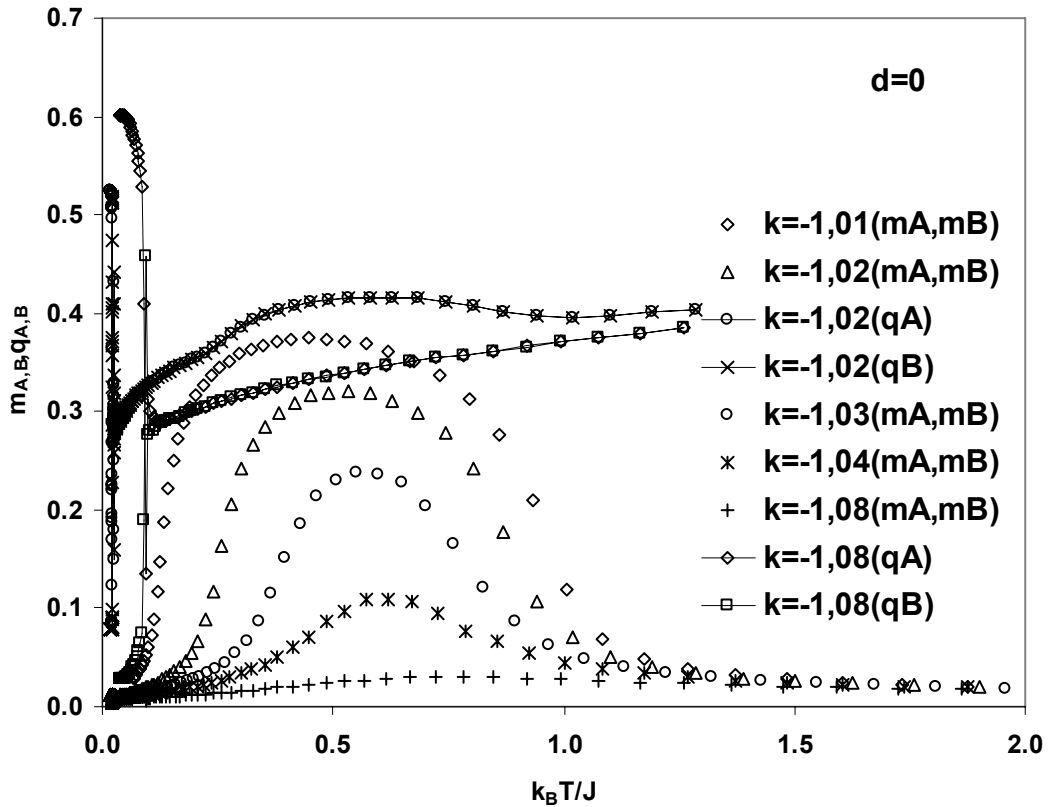
Şekil 4.30. $d=0$ için a) İç enerjinin b) Öz ısının sıcaklıkla değişimi.

$k = 1$, taban durumda üç faz çizgisinin birleştiği özel bir noktadır. Ortalama alan yaklaşımı(MFA) çalışmalarında[25], bu noktada modelin re-entrant davranış sergilediği bildirilmektedir. Monte Carlo simülasyonları[72] ve gerçek-uzay renormalizasyon grubu çalışmalarında[90], 2-boyutlu sistemlerde, bu re-entrant davranışın oluşmadığı ortaya konmaktadır. Son yıllarda yapılan Monte Carlo çalışmalarında, hem 2-boyutta yapılan çalışmalar hem de 3-boyutta yapılan çalışmalar ile benzer sonuçlar ortaya koymaktadır[91]. Tez kapsamında yapılan analizler de 3-boyutta, $k = 1$ noktasında re-entrant davranışın oluştuğu yönünde bilgiler vermektedir. Şekil 4.29'da $k = 1$ için düzen parametresinin sürekli bir değişim gösterdiği ancak düşük sıcaklıkta $m \sim 0,4$ civarında bir değere sahip olduğu görülmektedir. Bununla birlikte, $L=12, 16, 18$ ve 24 için hesaplanan Binder kümülanlarının sıcaklıkla değişim eğrilerinin kesim noktasından belirlenen sonsuz örgü kritik sıcaklığı değerinin ($T_c(\infty)=1,09 \pm 0,01$), MC sonuçları[91] ile uyum içinde olduğu ancak MFA[25] sonuçlarına göre çok düşük olduğu tespit edilmiştir.

Bu sonuçların yanı sıra, sonlu örgü ölçeklemesi analizleri sonucunda, kritik üs değerleri, $\nu=0,64$, $\beta=0,31$, $\gamma=1,25$ ve $\alpha=0,12$ olarak tespit edilerek, modelin $k = 1$ için, 3-boyutlu Ising model ile aynı kritik üslere sahip olduğu sonucuna varılmıştır.

4.3.1. Ardışık $Q \rightarrow F \rightarrow Q \rightarrow SQ$ faz geçişleri

Ardışık $Q \rightarrow F \rightarrow Q \rightarrow SQ$ faz geçişlerinin $d = 0$ için $-1,04 < k < -1$ parametre bölgesinde olduğu tespit edilmiştir. Şekil 4.31'de $L=18$ kenar uzunluğunda basit kübik örgüde $k = -1,01, -1,02, -1,03$ ve $-1,04$ ve $-1,08$ için hesaplanan alt örgü düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişimleri verilmektedir.



Şekil 4.31. $L=18$ 'de $d = 0$ için $k = -1,01, -1,02, -1,03, -1,04$ ve $-1,08$ parametre değerlerinde alt örgü düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişimi.

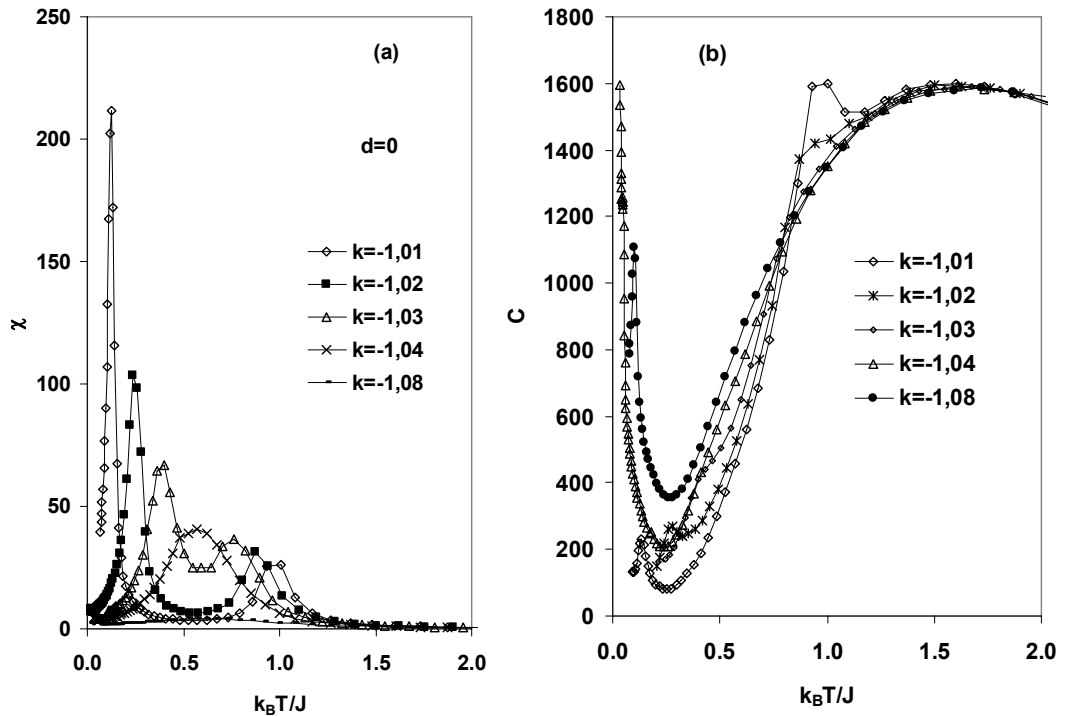
Şekilde, q_A ve q_B alt örgü düzen parametrelerinin değişimi $k = -1,02$ için gösterilmiştir. $k = -1,01$ ve $k = -1,03$ parametreleri için q_A ve q_B 'nin değişimi $k = -1,02$ değerindeki gibidir. Değişimin açıkça görülebilmesi için bu parametre değerlerinde q_A ve q_B alt örgü düzen parametreleri çizilmemiştir. $d = 0$ için $-1,04 < k < -1$ değerlerinde, düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişimine göre(Şekil 4.31) yüksek sıcaklıkta Q fazda($m_A=m_B=0$ $q_A=q_B \neq 0$) bulunan sistemde, sıcaklığın azalmaya başlamasıyla bir düzenin oluştuğu görülmektedir. Sistemde ortaya çıkan bu $Q \rightarrow F$ faz geçişinden sonra sıcaklığın azalması durumunda, F fazdan Q faza ($F \rightarrow Q$) yeni bir faz geçişinin oluştuğu görülmektedir. Oldukça düşük sıcaklık bölgesinde ise m_A ve m_B düzen parametre değerlerinin sıfırda kalmasına rağmen q_A ve q_B 'nin birbirinden farklı davrandıkları gözlenmektedir. Bu durum, sistemde oluşan Q fazdan SQ faza geçişin bir işaretidir. Bununla birlikte, $Q \rightarrow F$ ve $F \rightarrow Q$ faz geçişlerinde m_A ve m_B alt örgü düzen parametrelerinin değişimi süreklidir.

Ardışık $Q \rightarrow F \rightarrow Q \rightarrow SQ$ faz geçişlerinin görüldüğü $d = 0$ ve $k = -1,01, -1,02$ ve $-1,03$ için manyetik alınganlık ve öz ısının sıcaklıkla değişim grafikleri Şekil 4.32'de verilmiştir. Manyetik alınganlıkta $Q \rightarrow F$ ve $F \rightarrow Q$ faz geçişlerine karşılık gelen iki pik görülürken, çok düşük sıcaklıkta oluşan $Q \rightarrow SQ$ faz geçişini temsil eden pik ortaya çıkmamaktadır. Bununla birlikte, öz ısı bu iki faz geçişine ait piklere sahip olmakla birlikte, ikinci derece faz geçişlerinin karakteristik pik davranışı görülmemektedir. Bununda ötesinde, manyetik alınganlık ve öz ısıda çok düşük sıcaklıklarda ortada çıkan $Q \rightarrow SQ$ faz geçiş piki oluşmamaktadır.

Bethe yaklaşımı(BA) ile yapılan çalışmalarda ortaya konan sonuçlara göre, tekrarlayan $Q \rightarrow F \rightarrow Q \rightarrow SQ$ faz geçiş $d = 0$ için $-1,05 < k < -1$ parametre oluşmaktadır[30]. Aynı çalışmada, sonuçların doğruları Monte Carlo simülasyonları ile bazı parametre değerleri için doğrulanmaktadır. BA çalışmalarında, bu tür tekrarlayan faz geçişlerinde öz ısının $Q \rightarrow F$, $F \rightarrow Q$ ve $Q \rightarrow SQ$ geçişlerinde pike sahip olduğu bildirilmektedir. MC

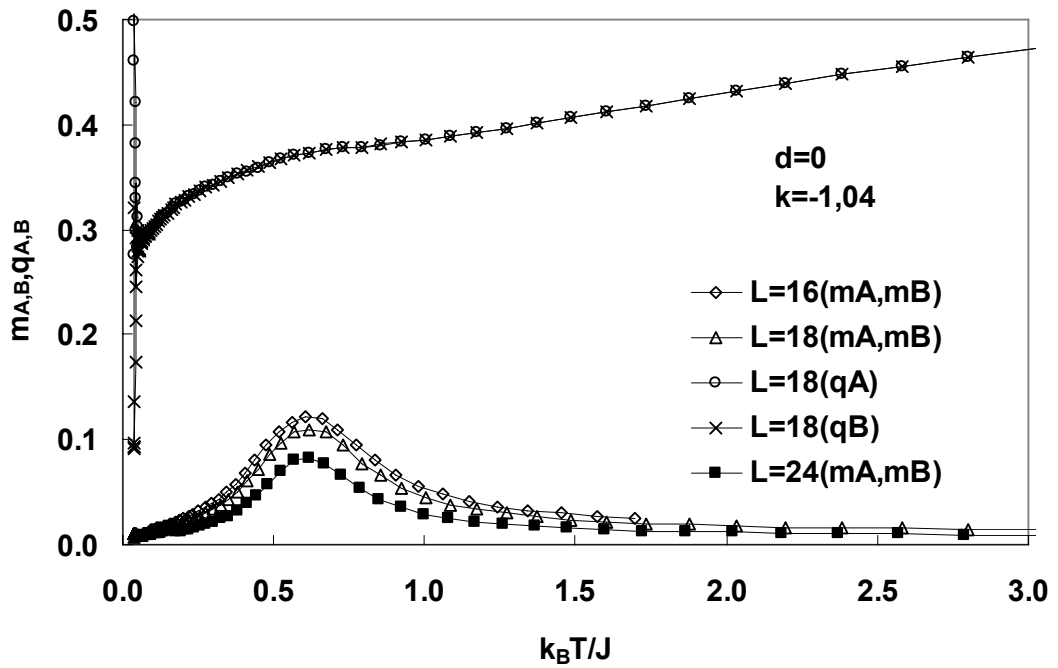
çalışmalarında ise, manyetik alınganlıkta $Q \rightarrow F$ ve $F \rightarrow Q$ geçişlerini temsil eden iki karakteristik pikin olduğu, öz ısı da ise bu iki faz geçişine ait herhangi bir davranışın görülmediği bildirilmektedir. Bunun yanı sıra, öz ısı da sadece çok düşük sıcaklıkta oluşan $Q \rightarrow SQ$ faz geçişi piki görüldüğü belirtilmektedir.

Tez kapsamında, ardışık $Q \rightarrow F \rightarrow Q \rightarrow SQ$ faz geçişinin olduğu parametre seti $d=0$ için $-1,04 < k < -1$ olarak tespit edilmiştir. Manyetik alınganlıktaki $Q \rightarrow F$ ve $F \rightarrow Q$ faz geçişlerini temsil eden iki karakteristik pikin tespit edilmesi MC sonuçları ile uyum içindedir. Diğer taraftan, MC ve BA sonuçlarının aksine öz ısıda çok düşük sıcaklıktaki $Q \rightarrow SQ$ faz geçişine ait herhangi bir davranış gözlenememiştir. Ancak, öz ısıda $Q \rightarrow F$ ve $F \rightarrow Q$ geçişlerini temsil eden pikler ve bu pikler arasında oluşan lineer davranış BA sonuçları ile benzer yapıdadır.



Şekil 4.32. $d=0$ için $k=-1,01$, $-1,02$, $-1,03$, $-1,04$ ve $-1,08$ parametre değerlerinde a) Manyetik alınganlığın b) Öz ısının sıcaklıkla değişimi.

$k \leq -1,04$ parametre değerlerinde, Q fazdan SQ faza bir geçiş olduğu tespit edilmiştir. Şekil 4.33'de $k = -1,04$ için $L=16, 18$ ve 24 kenar uzunluğuna sahip basit kübik örgülerde, düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişimleri verilmiştir. Buna göre, sistemde, yüksek sıcaklıkta oluşan Q fazdan, sıcaklığın azalması ile F faza bir geçiş olduğu görülmektedir. Ancak, bu düzen simülasyon çalışmalarının sonlu büyüklükteki örgülerde gerçekleşmesinden kaynaklanmaktadır. Şekilden de görüldüğü gibi, örgü büyüklüğünün artması ile bu düzen azalmaktadır. Aynı zamanda, manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişiminde söz konusu geçişe ait bir pikin oluşmadığı tespit edilmiştir(Şekil 4.32.a). Sonuç olarak, $d=0$ için $k \leq -1,04$ parametre değerlerinde sadece $Q \rightarrow SQ$ faz geçişi oluşmaktadır.



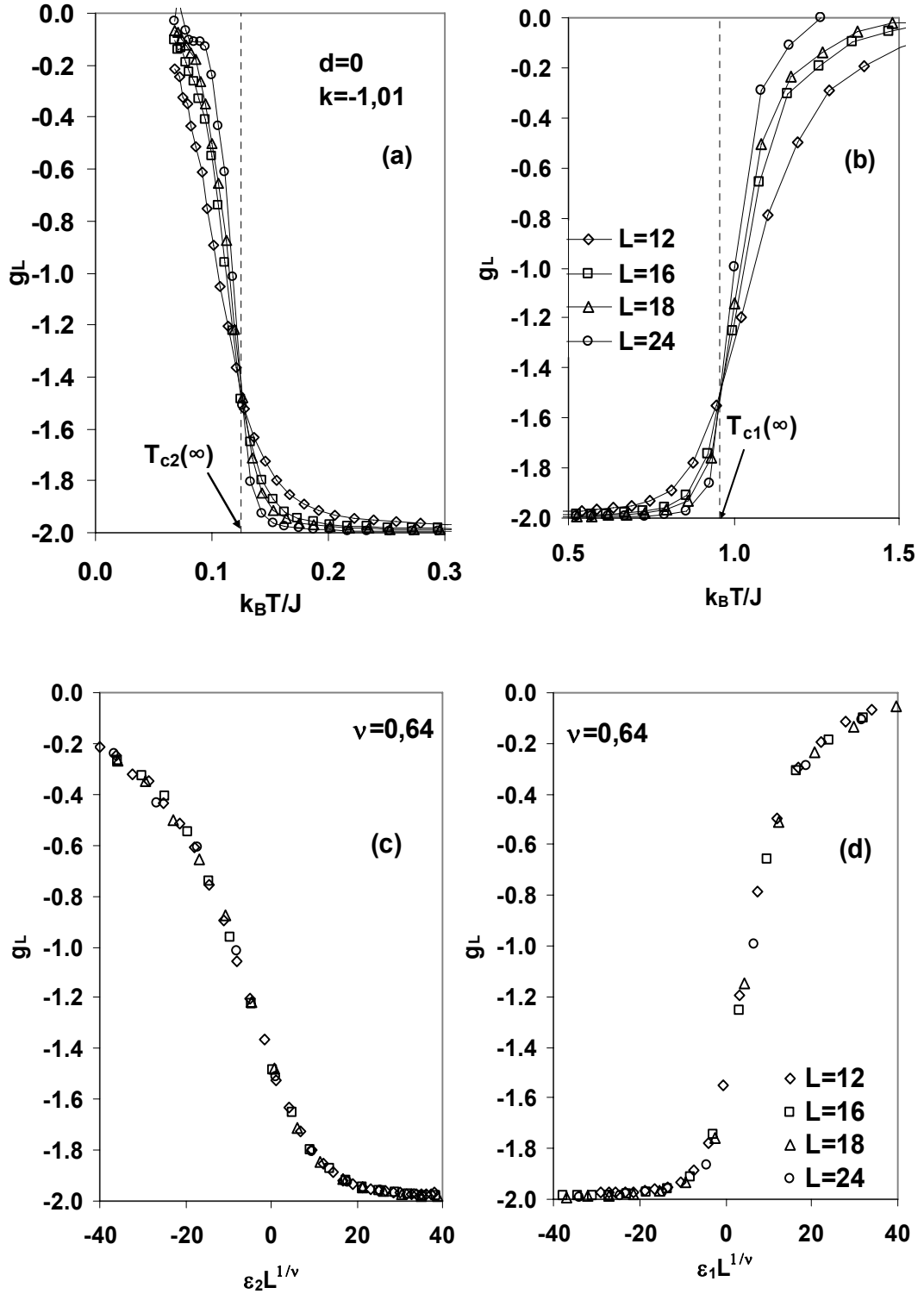
Şekil 4.33. $k = -1,04$ için $L=16, 18$ ve 24 kenar uzunluğuna sahip basit kübik örgülerde, düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişimleri.

Ardışık $Q \rightarrow F \rightarrow Q \rightarrow SQ$ faz geçişlerindeki $Q \rightarrow F \rightarrow Q$ faz geçişlerinde düzen parametresinde görülen sürekli davranış ve manyetik alınganlıkta oluşan karakteristik iki pik davranışının yanı sıra öz ısıda anormal bir davranış ortaya çıkmaktadır. MC çalışmalarında, ardışık $Q \rightarrow F \rightarrow Q \rightarrow SQ$

faz geçişlerindeki $Q \rightarrow F \rightarrow Q$ faz geçişlerinde öz ısıda görülen anormal davranıştan dolayı (Şekil 4.32.b), bu faz geçişlerinin üçüncü derece faz geçişleri olabileceği bildirilmektedir. Ancak bu geçişlerin ikinci derece veya üçüncü derece olduğu noktasında kesin bir bilgiye rastlanılmamıştır. Bu nedenle, çalışmanın bu aşamasında, kritik üslerin tespit edilmesi büyük önem taşımaktadır. $Q \rightarrow F$ ve $F \rightarrow Q$ faz geçişleri için Binder kümülanı, düzen parametresi ($m_A=m_B$) ve manyetik alınganlığın sonlu örgü ölçeklemesi yapılarak sırasıyla, ν , β ve γ kritik üsleri tespit edilmiştir.

Şekil 4.34.a ve Şekil 4.34.b'de, $d=0$ ve $k=-1,01$ parametre değerlerinde $Q \rightarrow F$ ve $F \rightarrow Q$ faz geçişlerine ait, farklı örgülerde hesaplanan Binder kümülanlarının (g_L) sıcaklıkla değişim grafikleri görülmektedir. Eğrilerin kesim noktasından, $F \rightarrow Q$ faz geçişi için sonsuz örgü kritik sıcaklık değeri $T_{c2}(\infty)=0,13\pm0,03$ (Şekil 4.34.a), $Q \rightarrow F$ faz geçişi için $T_{c1}(\infty)=0,96\pm0,02$ (Şekil 4.34.b) olarak tespit edilmiştir. g_L 'nin $\epsilon L^{1/\nu}$ 'ye karşı grafiği çizildiğinde, uygun ν değerinde verilerin tek bir eğriye uyduğu görülür. Şekil 4.34.c ve Şekil 4.34.d'de $F \rightarrow Q$ ve $Q \rightarrow F$ faz geçişlerinde sırasıyla, $T_{c2}(\infty)$ ve $T_{c1}(\infty)$ sonsuz örgü kritik sıcaklık değerleri alınarak çizilen sonlu örgü ölçekleme grafikleri görülmektedir. Buradan, her iki faz geçişi $\nu=0,64$ olarak tespit edilmiştir.

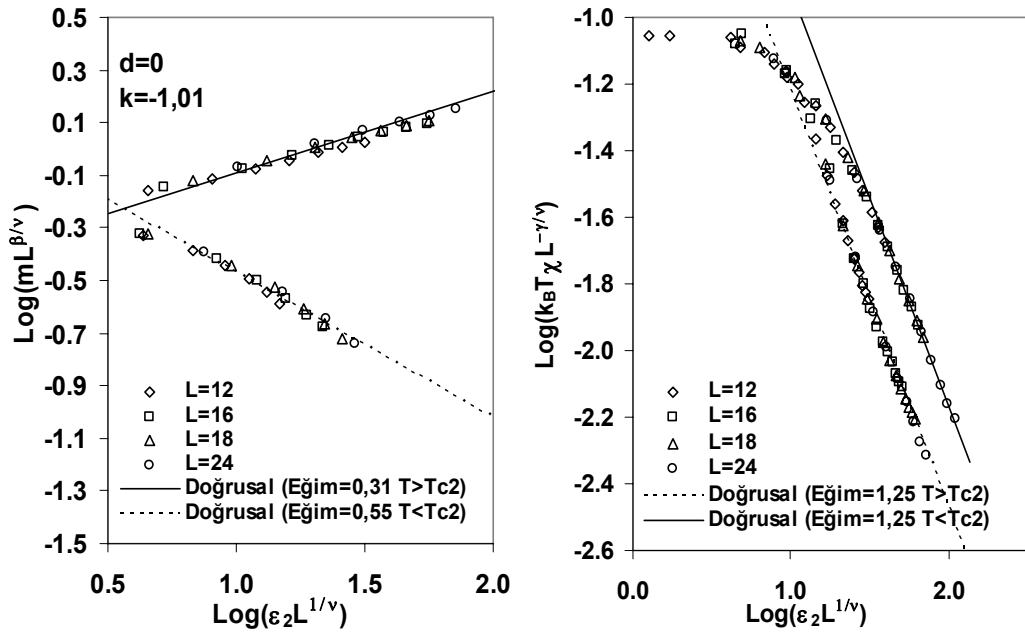
$F \rightarrow Q$ faz geçişinde, düzen parametresinin ($m_A=m_B=m$) ve manyetik alınganlık için çizilen sonlu örgü ölçekleme grafikleri Şekil 4.35'de yer almaktadır. Düzen parametresi için $\nu=0,64$ ve $\beta=0,31$ alınarak çizilen $\text{Log}(mL^{1/\nu})-\text{Log}(\epsilon_2 L^{\beta/\nu})$ grafiğinde, verilerin kritik sıcaklığın üzerinde ($T>T_{c2}$) eğimi 0,31, kritik sıcaklığın altında ($T<T_{c2}$) eğimi 0,55 olan doğrulara uyduğu görülmektedir. Manyetik alınganlığın ölçeklemesinde ise, $T>T_{c2}$ ve $T<T_{c2}$ için, $\epsilon_2=(T-T_{c2})/T_{c2}$ olmak üzere, $\nu=0,64$ ve $\gamma=1,25$ alındığında, verilerin uyduğu doğrunun eğimi 1,25 olmaktadır. Benzer davranışlar $Q \rightarrow F$ faz geçişi için düzen parametresi ve manyetik alınganlığın sonlu örgü ölçekleme grafiklerinde de görülmektedir (Şekil 4.36).



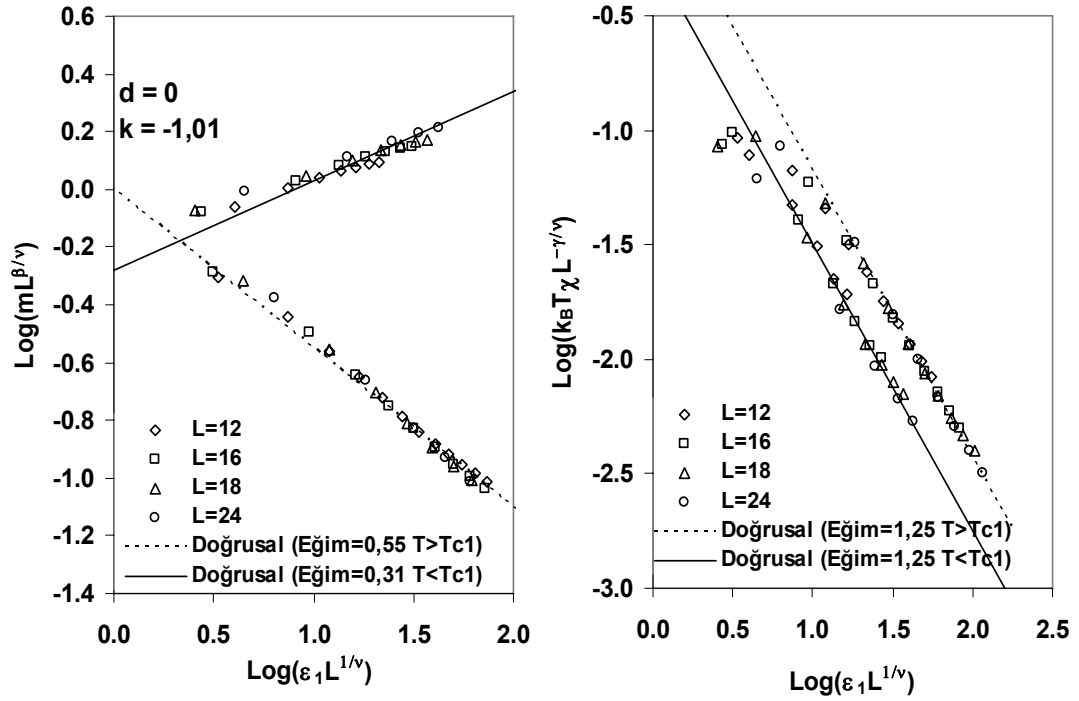
Şekil 4.34. $d=0$ ve $k=-1,01$ için a) $T_{c2}(\infty)$ 'de oluşan $F \rightarrow Q$ faz geçişine ait Binder kümülantının sıcaklıkla değişimi b) $T_{c1}(\infty)$ 'de oluşan $Q \rightarrow F$ faz geçişine ait Binder kümülantının sıcaklıkla değişimi c) $F \rightarrow Q$ faz geçişine ait Binder kümülantının ölçeklemesi d) $Q \rightarrow F$ faz geçişine ait Binder kümülantının ölçeklemesi.

Diğer taraftan, öz ısının $Q \rightarrow F$ ve $F \rightarrow Q$ faz geçişlerine ait karakteristik pikler oluşmadığından, öz ısının sonlu örgü ölçeklemesi ile α kritik üssü tespit edilememiştir.

Sonuç olarak, $d=0$ ve $k=-1,01$, $-1,02$ ve $-1,03$ parametre değerlerinde ortaya çıkan ardışık faz geçişindeki, $Q \rightarrow F$ ve $F \rightarrow Q$ faz geçişleri için sonlu örgü ölçekleme analizleri sonucunda kritik üs değerleri $\nu=0,64$, $\beta=0,31$ ve $\gamma=1,25$ olarak tespit edilerek, bu faz geçişlerinin ikinci derece faz geçişleri olduğu ortaya konmuştur.



Şekil 4.35. $d=0$ ve $k=-1,01$ için düşük sıcaklıkta $T_{c2}(\infty)$ 'de oluşan $F \rightarrow Q$ faz geçişine ait a) m düzen parametresinin sonlu örgü ölçeklemesi b) Manyetik alınganlığın sonlu örgü ölçeklemesi.



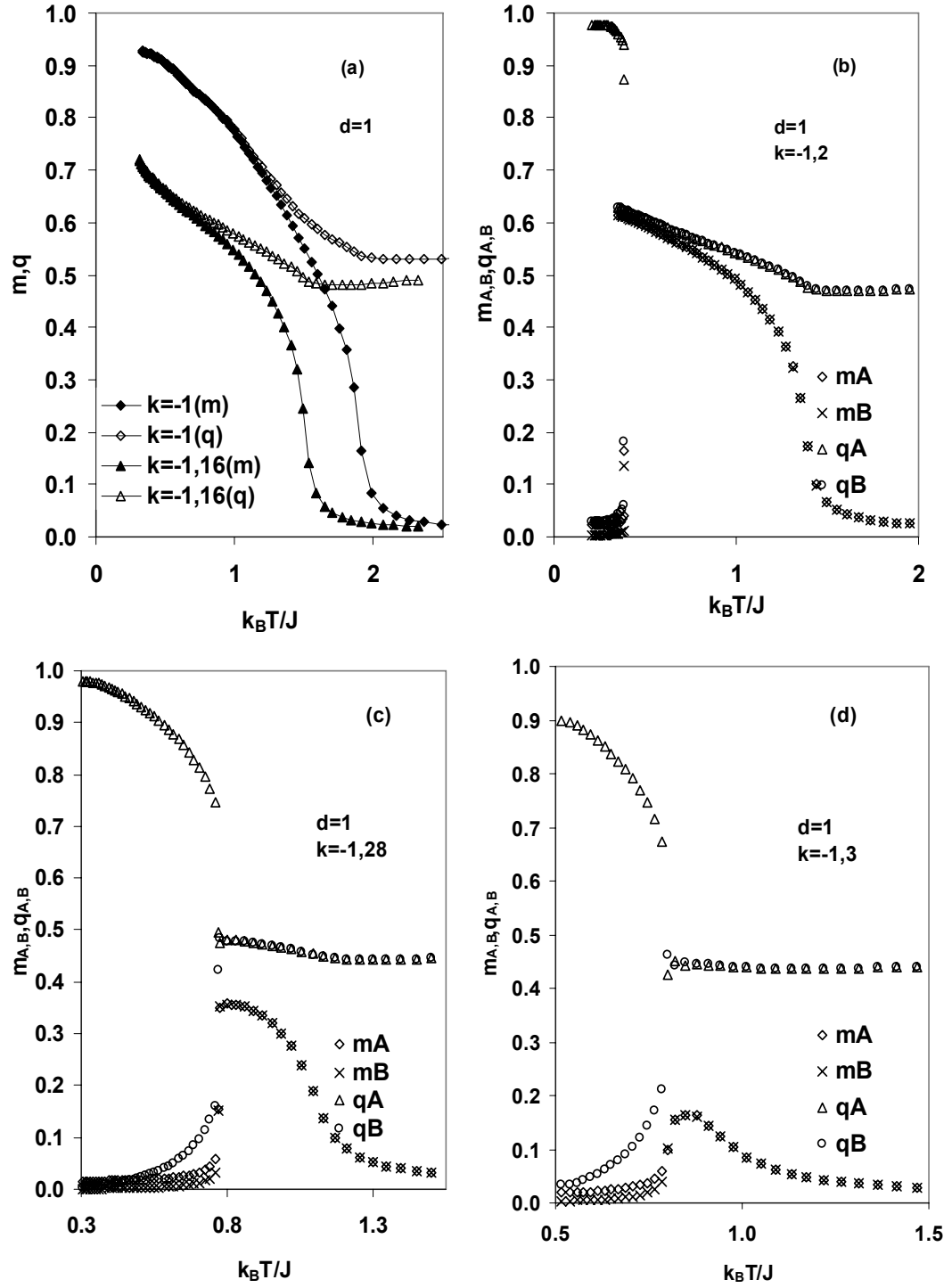
Şekil 4.36. $d=0$ ve $k=-1,01$ için yüksek sıcaklıkta $T_{c1}(\infty)$ 'de oluşan $Q \rightarrow F$ faz geçişine ait a) m düzen parametresinin sonlu örgü ölçeklemesi b) Manyetik alınganlığın sonlu örgü ölçeklemesi.

4.3.2. Ardışık $Q \rightarrow F \rightarrow SQ$ faz geçişleri

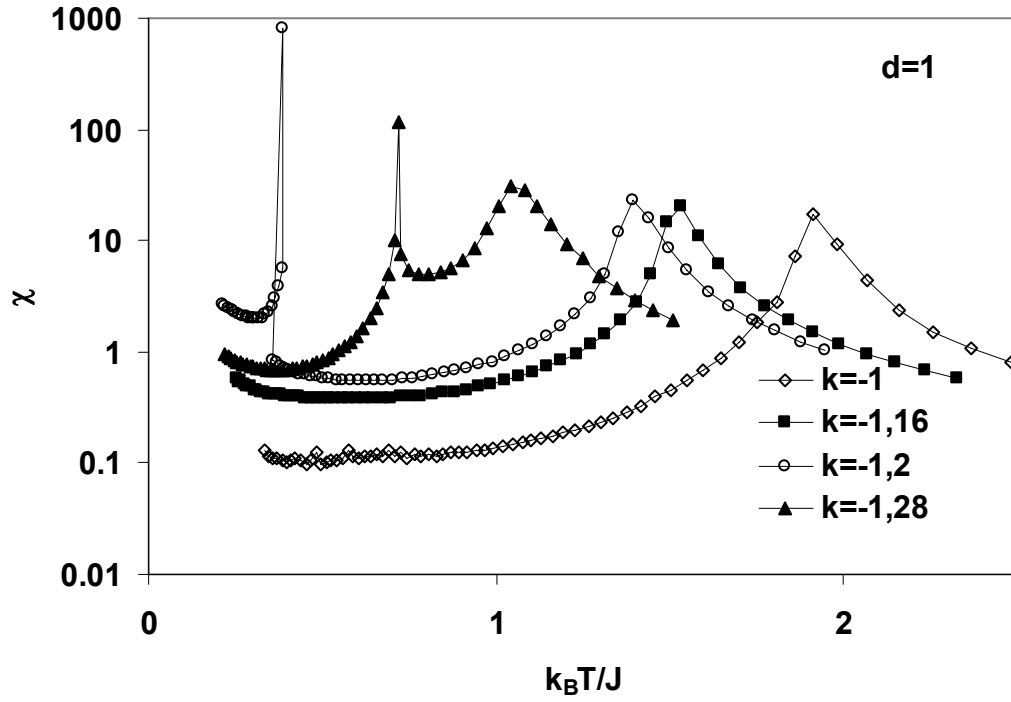
Ardışık $Q \rightarrow F \rightarrow SQ$ faz geçişlerinin $d > 0$ ve $k > -1$ parametre bölgesinde belirli d ve k değerlerinde olduğu tespit edilmiştir. $d = 1$ için $-1,3 < k < -1,16$ ve $d = 2$ için $-1,5 < k \leq -1,34$ değerlerinde ardışık $Q \rightarrow F \rightarrow SQ$ faz geçişleri oluşmaktadır. $d = 1$ için ferromanyetik bölgede $k \geq -1,16$ parametre değerlerinde, düzen parametresi m ve q 'nın sıcaklıkla değişimleri incelendiğinde, sistemde Q fazdan F faza sürekli bir geçişin olduğu görülmektedir. Şekil 4.37.a'da $d = 1$ için $k = -1$ ve $k = -1,16$ için $L=18$ 'de hesaplanan düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişimleri verilmiştir. Şekle göre, bu parametre değerlerinde sistemde $Q \rightarrow F$ sürekli faz geçişinin olduğu görülmektedir. Ayrıca manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişim grafiğinde ikinci derece faz geçişini karakterize eden bir pik oluşmaktadır(Şekil 4.38).

F-SQ faz sınırı çizgisi civarında yer alan $-1,3 < k < -1,16$ parametre bölgesinde, sistemde Q, F ve SQ fazları arasında ardışık faz geçişleri oluşmaktadır. Şekil 4.37.b ve Şekil 4.37.c'de $k = -1,2$ ve $k = -1,28$ için alt örgü düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişimleri verilmiştir. Burada, yüksek sıcaklıkta görülen $Q(m_A=m_B=0$ ve $q_A=q_B)$ fazdan F faza($m_A = m_B \neq 0$ ve $q_A=q_B)$ sürekli bir geçiş oluşmaktadır. Sıcaklığın azalmaya devam etmesi sonucunda ise, F fazdan SQ faza($m_A=m_B=0$ ve $q_A \neq q_B$) bir geçiş oluşmaktadır. $F \rightarrow SQ$ faz geçişinde, alt örgü düzen parametrelerinde görülen süreksiz davranış faz geçişinin birinci derece bir faz geçişi olduğunun bir işaretidir.

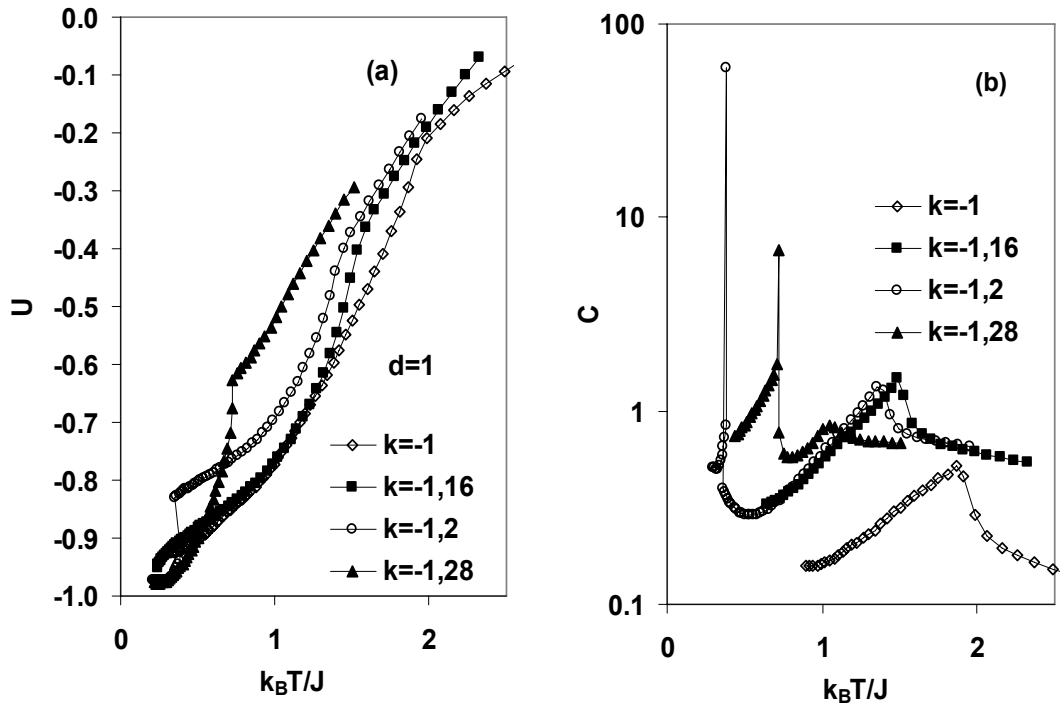
Şekil 4.38'de $d=1$ için F-SQ faz sınırına yakın birkaç k değerinde manyetik alinganlığın sıcaklıkla değişimi verilmiştir. $d=1$ için $k = -1$ ve $k = -1,16$ parametre değerlerinde görülen ikinci derece $Q \rightarrow F$ faz geçişini temsil eden tek pik görülmektedir. $k = -1,2$ ve $k = -1,28$ parametre değerlerinde ortaya çıkan ardışık $Q \rightarrow F \rightarrow SQ$ faz geçişine ait iki pik ortaya çıkmaktadır. Bunlardan, yüksek sıcaklıkta oluşan karakteristik pik ikinci derece $Q \rightarrow F$ faz geçişine aittir. Daha düşük sıcaklıkta oluşan ikinci pik ise, birinci derece $F \rightarrow SQ$ faz geçişini karakterize etmektedir. Söz konusu d ve k değerlerinde, iç enerji ve öz ısının sıcaklıkla değişimleri Şekil 4.39'da verilmiştir. Benzer şekilde, $d=1$ için $k = -1$ ve $k = -1,16$ için iç enerjinin sıcaklıkla sürekli değiştiği ve öz ısının tek pike sahip olduğu görülmektedir. $k = -1,2$ ve $k = -1,28$ parametre değerlerinde $Q \rightarrow F$ faz geçişi için, iç enerjide sıcaklığın azalması ile sürekli bir değişim ve öz ısıda karakteristik tek pik oluşmaktadır. $F \rightarrow SQ$ faz geçişinde ise, iç enerjide oluşan kesikli davranışa öz ısıda ortaya çıkan keskin atlama eşlik etmektedir.



Şekil 4.37. $L=18$ 'de $d=0$ için F-SQ faz sınırına yakın k değerlerinde düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişimi a) $k=-1$ ve $k=-1,16$ b) $k=-1,2$ c) $k=-1,28$ d) $k=-1,3$.

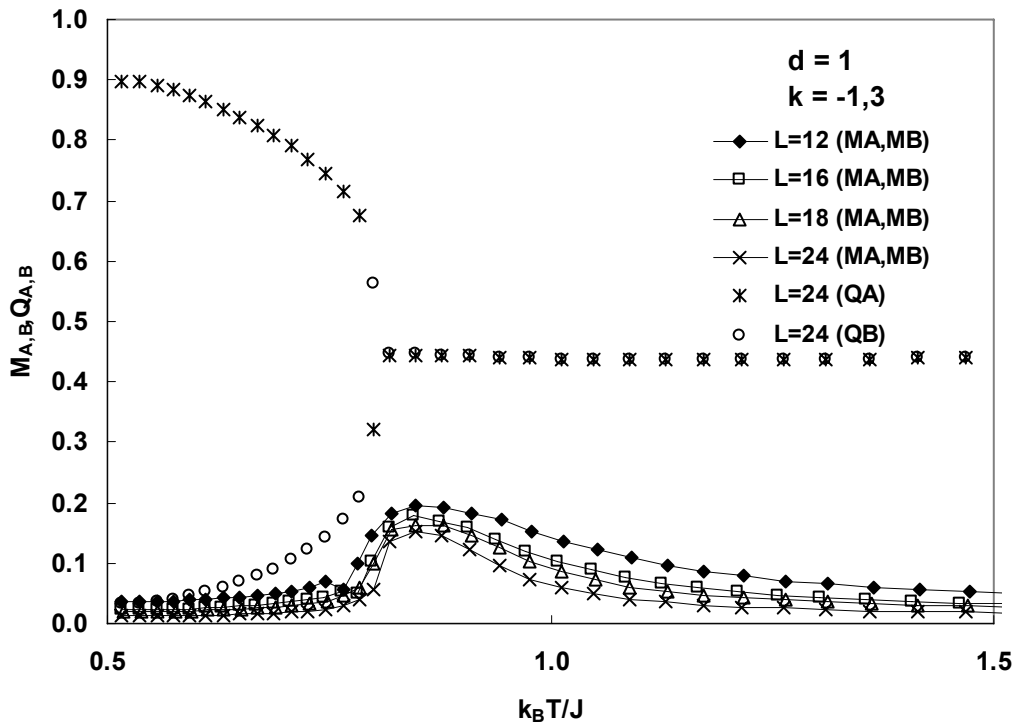


Şekil 4.38. $L=18$ 'de $d=1$ için F-SQ faz sınırına yakın birkaç k değerinde manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişimi.



Şekil 4.39. $L=18$ 'de $d=1$ için F-SQ faz sınırına yakın birkaç k değerinde a) İç enerji b) Öz ısıның sıcaklıkla değişimi.

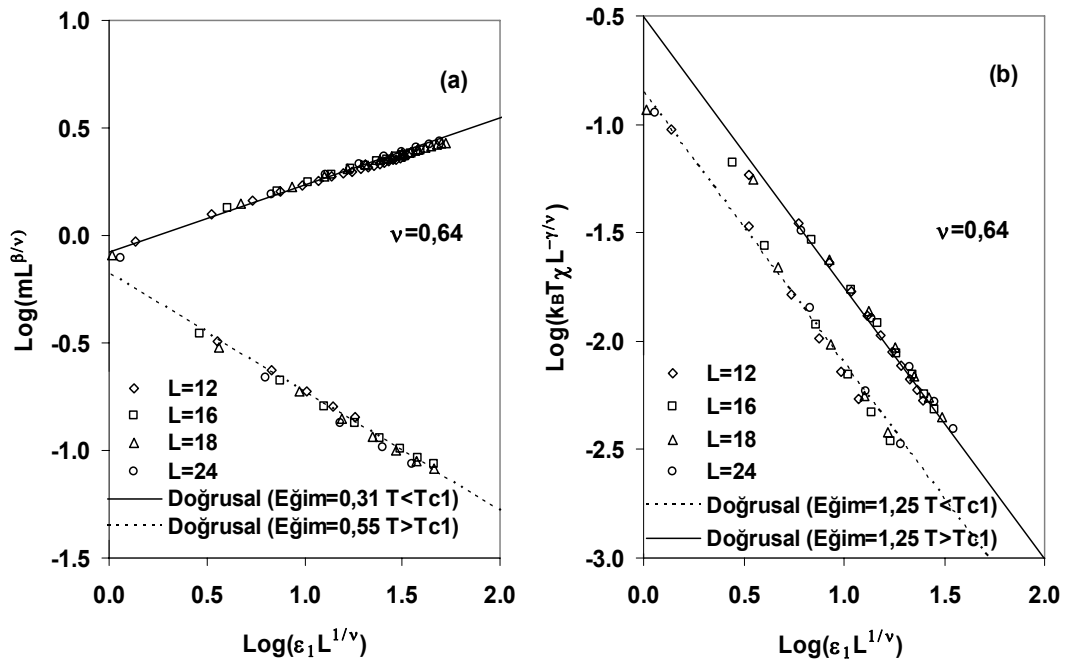
Şekil 4.37.d’de, $k = -1,3$ için görülen ardışık $Q \rightarrow F \rightarrow SQ$ faz geçişinde, yüksek sıcaklıkta görülen $Q \rightarrow F$ faz geçişinin gerçek bir faz geçişi olmayıp, sadece sonlu örgü etkisinden kaynaklanmaktadır. Bunu doğrulamak için, bu parametre değerinde farklı örgülerde termodinamik niceliklerin sıcaklıkla değişimleri incelenmiştir. $k = -1,3$ için $L=12, 16, 18$ ve 24 örgü büyüklüklerinde hesaplanan düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişimleri Şekil 4.40’da görülmektedir. Küçük örgülerde daha büyük olan düzen, örgü büyüklüğünün artması ile azalmaktadır. Bununla birlikte, manyetik alınganlıkta bu faz geçişini karakterize eden herhangi bir pik oluşmamaktadır.



Şekil 4.40. $d=1$ hattında $k = -1,3$ için farklı örgülerde düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişimleri.

Ardışık $Q \rightarrow F \rightarrow SQ$ faz geçişlerinin görüldüğü $d = 1$ için $-1,3 < k < -1,16$ ve $d = 2$ için $-1,5 < k \leq -1,34$ değerlerinde $Q \rightarrow F$ faz geçişlerinde Binder kümülantı, düzen parametresi, manyetik alınganlık, öz ısı niceliklerinin sonlu örgü ölçeklemesi yapılarak ν , β , γ ve α kritik üslerinin değeri tespit edildi.

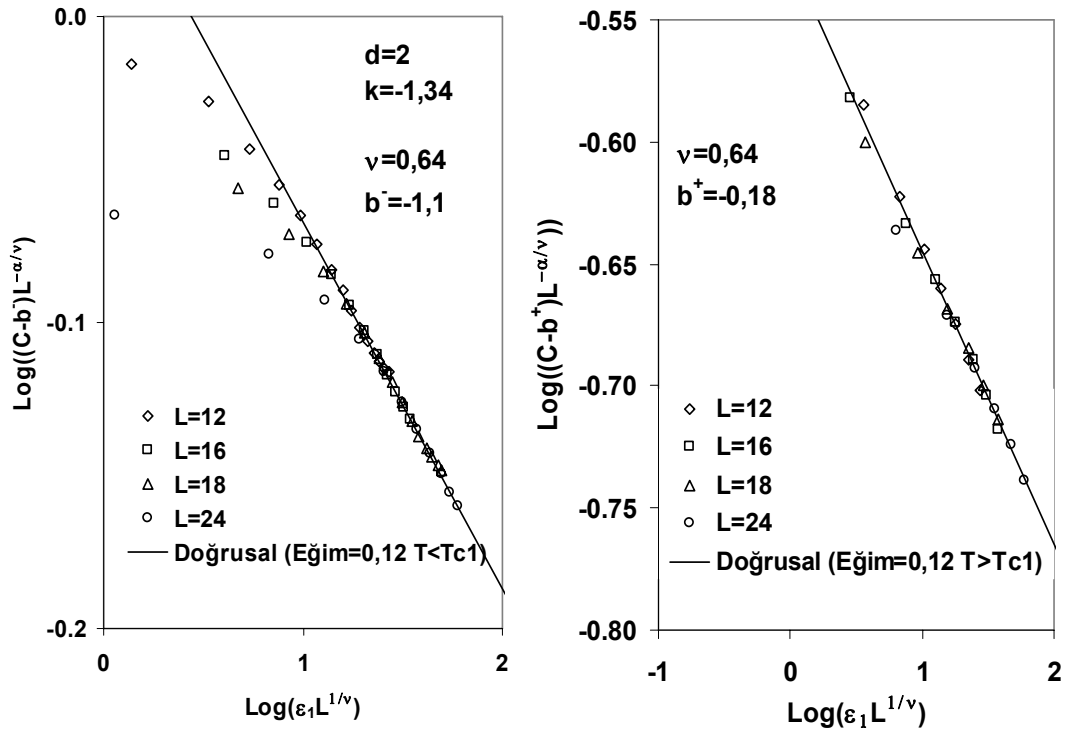
Binder kümülanının ölçeklemesi sonucunda $\nu=0,64$ olarak tespit edilmiştir. Şekil 4.41'de $d=2$ ve $k=-1,34$ setinde düzen parametresi ve manyetik alinganlığın sonlu örgü ölçeklemesi verilmiştir. Buna göre, düzen parametresi için $\nu=0,64$ ve $\beta=0,31$ alınarak çizilen $\text{Log}(mL^{1/\nu})-\text{Log}(\varepsilon_1 L^{\beta/\nu})$ grafiğinde, verilerin kritik sıcaklığın üzerinde ($T < T_{c1}$) eğimi 0,31, kritik sıcaklığın altında ($T > T_{c1}$) eğimi 0,55 olan doğrulara uyduğu görülmektedir. Manyetik alinganlığın ölçeklemesinde ise, $T < T_{c1}$ için $\varepsilon=(T-T_{c1})/T_{c1}$ ve $T > T_{c1}$ için $\varepsilon=(T-T_{c1})/T$ olmak üzere, $\nu=0,64$ ve $\gamma=1,25$ alındığında, verilerin uyduğu doğrunun eğimi 1,25 olmaktadır.



Şekil 4.41. $d=2$ ve $k=-1,34$ için yüksek sıcaklıktaki $Q \rightarrow F$ faz geçişine ait a) m düzen parametresinin sonlu örgü ölçeklemesi b) Manyetik alinganlığın sonlu örgü ölçeklemesi.

Şekil 4.42'de $d=2$ ve $k=-1,34$ setinde öz ısının $T < T_{c1}$ ve $T > T_{c1}$ için $\text{Log}((C-b^\pm)L^{-\alpha/\nu})-\text{Log}(\varepsilon L^{1/\nu})$ grafikleri görülmektedir. $b^\pm$ düzeltme terimi, verilerin uyumuna göre belirlenmiştir. $\alpha=0,12$ ve $\nu=0,64$ alınarak $\text{Log}((C-b^\pm)L^{-\alpha/\nu})-\text{Log}(\varepsilon L^{1/\nu})$ grafiği çizildiğinde, verilerin, eğimi 0,12 olan bir doğruya uyduğu görülmektedir.

Yapılan hesaplamalar sonucunda, ardışık $Q \rightarrow F \rightarrow SQ$ faz geçişlerinin görüldüğü tüm d ve k parametre değerlerinde, $Q \rightarrow F$ sürekli faz geçişinin, $\nu=0,64$, $\beta=0,31$, $\gamma=1,25$ ve $\alpha=0,12$ kritik üsleri ile karakterize edildiği tespit edilmiştir.

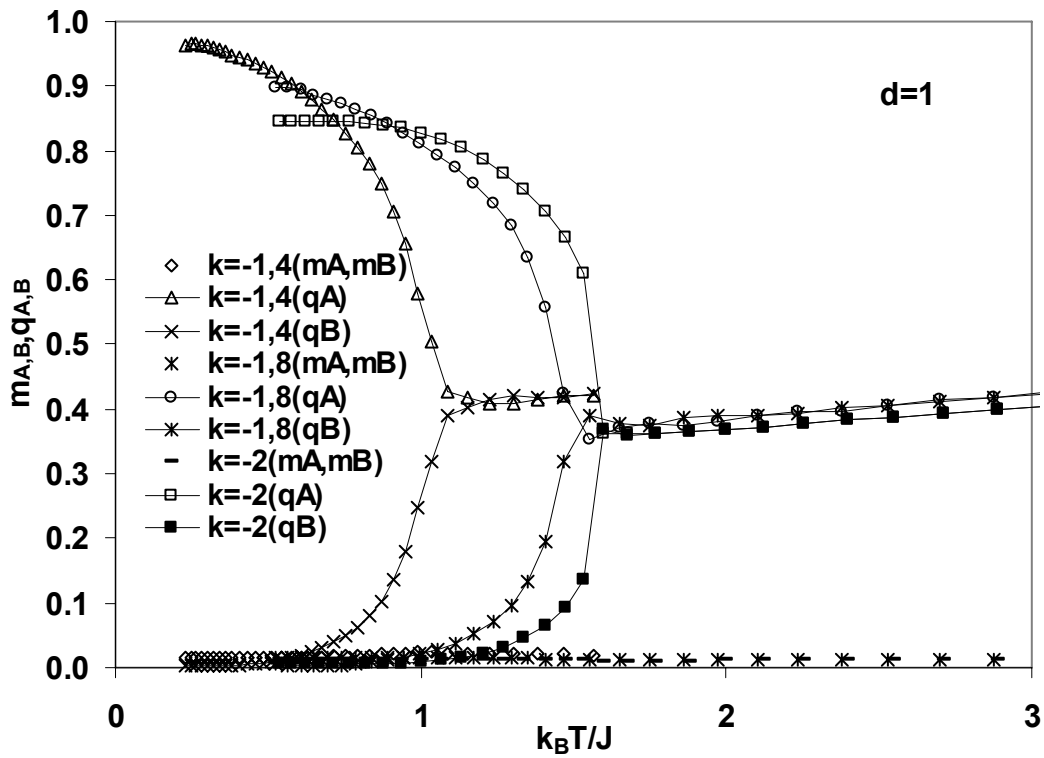


Şekil 4.42. $d=2$ ve $k=-1,34$ için yüksek sıcaklıktaki $Q \rightarrow F$ faz geçişine ait öz ısının ölçeklemesi a) $T < T_{c1}$, b) $T > T_{c1}$.

4.3.3. $Q \rightarrow SQ$ faz geçişleri

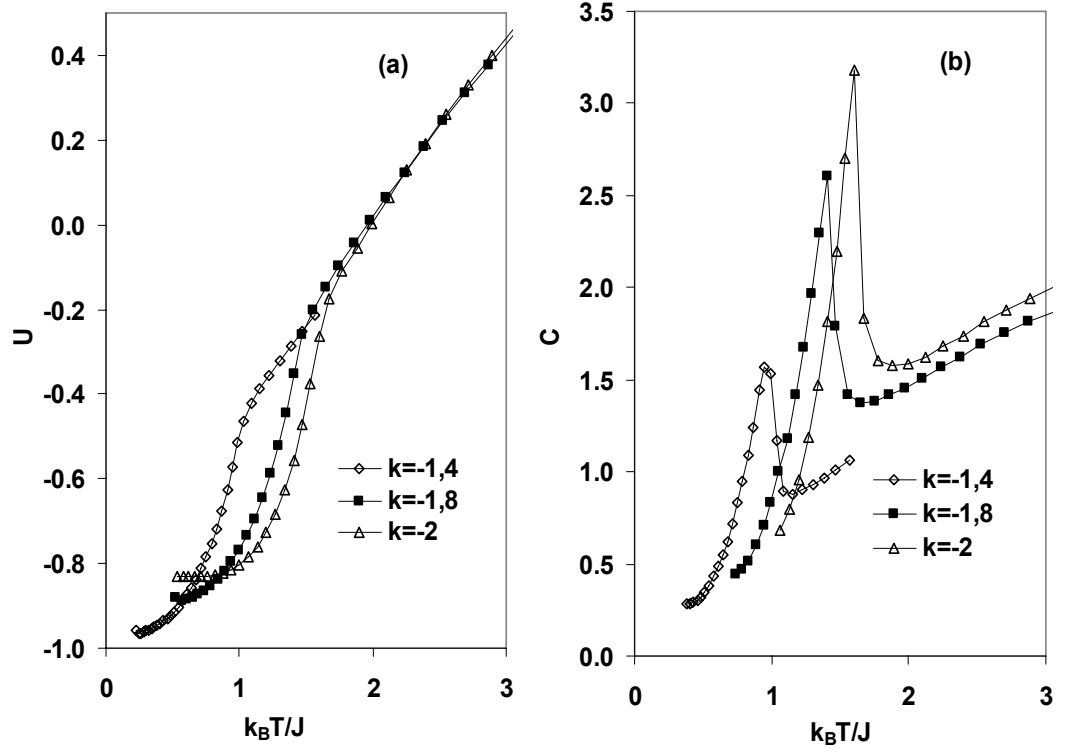
Q faz ile SQ faz arasındaki $Q \rightarrow SQ$ faz geçişi $d=0$ için $k \leq -1,04$, $d=1$ için $k \leq -1,3$ ve $d=2$ için $k \leq -1,5$ değerlerinde oluşmaktadır. Şekil 4.43'de $d=1$ için $k=-1,4$, $-1,8$ ve -2 parametre değerlerinde düzen parametreleri, iç enerji ve öz ısının sıcaklıkla değişimi verilmektedir. Sistemde, yüksek sıcaklıkta alt örgü düzen parametreleri m_A ve m_B 'nin sıfır ve q_A ve q_B 'nin sıfırdan farklı bir değerde olması ile karakterize edilen Q fazı mevcuttur.

Sıcaklığın azalması ile, faz geçişi sıcaklığından sonra, m_A ve m_B 'nin değeri sıfırda kalırken q_A ve q_B 'nin birbirinden farklı davrandıkları görülmektedir. Faz geçiş noktasından sonra q_A ve q_B 'nin birbirinden ayrıldığı görülmektedir. Bu noktadan sonra, biri azalarak sıfıra, diğeri ise artarak 1 değerine ulaşmaktadır.



Şekil 4.43. $d = 1$ için $k = -1,4, -1,8$ ve -2 parametre değerlerinde alt örgü düzen parametrelerinin sıcaklıkla değişimi.

Tüm faz geçişi boyunca, alt örgü düzen parametreleri m_A ve m_B sıfırda kaldığı için, manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişim eğrileri faz geçiş türü hakkında herhangi bir bilgi içermemektedir. Diğer taraftan, iç enerji ve iç enerjideki dalgalanmanın bir ölçüsü olan öz ısı, faz geçişi hakkında gerekli bilgileri sağlamaktadır(Şekil 4.44). Şekilden de görüldüğü gibi, sıcaklığı azalması ile iç enerjideki değişim sürekli ve öz ısı bu davranışa karşılık tek bir pik göstermektedir.



Şekil 4.44. $d=1$ için $k=-1,4, -1,8$ ve -2 parametre değerlerinde a) İç enerji b) Öz ısı'nın sıcaklıkla değişimi.

5. SONUÇLAR

Bu çalışmada, 3-boyutta ferromanyetik bilineer etkileşmeli Blume-Emery-Griffiths (BEG) modelin faz yapısının ortaya konması amaçlanmıştır. Bu amaç doğrultusunda modelin cellular automaton ile simülasyonu gerçekleştirilmiştir. Hesaplamalarda, tez kapsamında geliştirilen, Creutz Cellular Automaton algoritmasını temel alan ısıtma algoritması kullanılmıştır. Düzen parametreleri (m ve q), manyetik alınganlık, iç enerji ve öz ısı niceliklerinin sıcaklıkla değişimleri ile m düzen parametresi olasılık dağılımının($P(m)$) incelenmesi sonucunda modelin sahip olduğu faz geçiş türleri tespit edilmiştir. İncelemeler sonucunda modelin zengin bir faz yapısına sahip olduğu görülmüştür. İkinci derece ve birinci derece faz geçiş türlerinin yanı sıra özellikle faz sınırları yakınlarında, belirli (d, k) parametre setlerinde çeşitli ardışık ve tekrarlayan faz geçişlerinin olduğu ortaya konmuştur.

Taban durumda literatürde $k = -1 - d/3$ ifadesi ile verilen F-S faz sınırının altında belirli bir (d, k) parametre bölgesinde ferromanyetik düzenin varlığı tespit edilerek bu bölgede, belirli parametre değerlerinde faz geçişinin olduğu ortaya konmuştur. F-S faz sınırı üzerinde kalan parametre bölgesinde ikinci derece $Q \rightarrow F$ faz geçişleri oluşmaktadır. Faz sınırına yaklaştıkça ardışık ve tekrarlayan faz geçişlerinin olduğu tespit edilmiştir. Ardışık $Q \rightarrow F \rightarrow Q$ ve tekrarlayan $Q \rightarrow F \rightarrow Q \rightarrow F$ faz geçişleri $d = -0,25, -0,5, -1$ ve $-1,5$ için belirli k değerlerinde görülmektedir. Diğer taraftan, $d \leq -2,5$ için, sadece $Q \rightarrow F$ faz geçişleri oluşmaktadır. Bu bölgede yapılan incelemeler sonucunda, $d < 0$ parametre bölgesinde, modelin üçlü kritik noktalara, yani faz geçişinin ikinci dereceden birinci dereceye dönüştüğü noktalara sahip olduğu sonucuna varılmıştır. Bethe yaklaşımı sonuçlarına göre, tekrarlayan $Q \rightarrow F \rightarrow Q \rightarrow F$ faz geçişinde en düşük sıcaklıkta görülen $Q \rightarrow F$ faz geçişi dışında kalan tüm ardışık faz geçişlerin sürekli olduğu bildirilmektedir[30]. Ancak tez çalışması kapsamında, modelin cellular automaton simülasyonu sonucunda yapılan

analizler sonucunda, tekrarlayan $Q \rightarrow F \rightarrow Q \rightarrow F$ faz geçişlerindeki en düşük sıcaklıkta görülen $Q \rightarrow F$ faz geçişi yanı sıra, $F \rightarrow Q$ orta faz geçişinin birinci derece veya ikinci derece olabileceği tespit edilmiştir[24]. Bu sonuç, ortalama alan yaklaşımı(MFA)[25] ve TPCA[29] sonuçları ile benzerlik göstermektedir.

Bu bölgede $k=-0,5$ için oluşturulan (d,t) faz diyagramı, literatürde yer alan ve farklı yöntemler kullanılarak ortaya konan sonuçların test edilmesi açısından büyük önem taşımaktadır. Ortaya konan $(,t)$ faz diyagramında, ikinci derece faz geçişi çizgisinin MCRG[27] sonuçları ile çok iyi uyum içinde olduğu, diğer taraftan CVM[28] ve TPCA[29] sonuçları ile benzer davranış gösterdiği görülmüştür. Ancak, birinci derece faz sınırında, bu yöntemlerin sonuçlarından farklı olarak $-1,5 < d < -1,7$ parametre bölgesinde birinci derece $Q \rightarrow F$ faz geçişinin olduğu tespit edilmiştir[24].

Bunun yanı sıra, MFA ve RG çalışmalarından farklı olarak, faz diyagramının kritik-son nokta içermediği; faz diyagramında sadece ikinci derece faz geçişinin birinci derece faz geçişine dönüştüğü üçlü kritik noktanın varlığı tespit edilmiştir. Sonuçların MCRG, CVM ve TPCA sonuçları ile uyumlu olduğu görülmüştür.

$d = 0$ ve $k = 1$, taban durumda üç faz çizgisinin birleştiği özel bir noktadır. Ortalama alan yaklaşımı(MFA) çalışmalarında[25], bu noktada modelin re-entrant davranış sergilediği bildirilmektedir. Monte Carlo simülasyonları[72] ve gerçek-uzay renormalizasyon grubu çalışmalarında[90], 2-boyutlu sistemlerde, bu re-entrant davranışın oluşmadığı ortaya konmaktadır. Son yıllarda yapılan Monte Carlo çalışmalarında, hem 2-boyutta yapılan çalışmalar hem de 3-boyutta yapılan çalışmalar ile benzer sonuçlar ortaya koymaktadır[91]. Tez kapsamında yapılan analizler de 3-boyutta, $k = 1$ noktasında re-entrant davranışın olduğu yönünde bilgiler vermektedir. Bu parametre setinde Binder kümülanlarının sıcaklıkla değişim eğrilerinin kesim

noktasından belirlenen sonsuz örgü kritik sıcaklığı değerinin ($T_c(\infty)=1,09\pm0,01$), MC sonuçları[91] ile uyum içinde olduğu ancak MFA[25] sonuçlarına göre çok düşük olduğu tespit edilmiştir.

Diğer taraftan, F-SQ faz sınırı üzerinde yer alan parametre bölgesinde ikinci derece $Q \rightarrow F$ faz geçişinin olduğu tespit edilmiştir. F-SQ faz sınırına yaklaştıkça, F-S faz sınırında olduğu gibi çeşitli ardışık faz geçişlerinin varlığı ortaya konmuştur. $d=0, 1$ ve 2 için elde edilen (k, t) faz diyagramının F, Q ve SQ olmak üzere üç farklı fazı içerdiği tespit edilmiştir. Sistemde d ve k parametrelerinin belirli değerlerinde, $Q \rightarrow F$ ve $Q \rightarrow SQ$ faz geçişleri, faz sınırı civarında F, Q ve SQ fazları arasında ardışık ve tekrarlayan faz geçişleri oluşmaktadır. Ardışık $Q \rightarrow F \rightarrow Q \rightarrow SQ$ faz geçişinin olduğu parametre seti $d=0$ için $-1,04 < k < -1$ olarak tespit edilmiştir. Manyetik alınganlıktaki $Q \rightarrow F$ ve $F \rightarrow Q$ faz geçişlerini temsil eden iki karakteristik pikin tespit edilmesi MC sonuçları ile uyum içindedir. Diğer taraftan, MC ve BA sonuçlarının aksine öz ısıda çok düşük sıcaklıktaki $Q \rightarrow SQ$ faz geçişine ait herhangi bir davranış gözlenememiştir. Ancak, öz ısıda $Q \rightarrow F$ ve $F \rightarrow Q$ geçişlerini temsil eden pikler ve bu pikler arasında oluşan lineer davranış BA sonuçları ile benzer yapıdadır.

Modelin evrensellik sınıfının ortaya konması amacıyla, sonlu örgü ölçekleme teorisi kullanılarak α , β , γ ve ν kritik üsleri tespit edilmiştir. Özellikle, ardışık ve tekrarlayan faz geçişlerinde kritik üs değerlerinin tespit edilmesi, literatürde bu konu ile ilgili ayrıntılı bir çalışma yer almadığından büyük önem taşımaktadır. Ayrıca ardışık $Q \rightarrow F \rightarrow Q \rightarrow SQ$ faz geçişlerindeki $Q \rightarrow F \rightarrow Q$ faz geçişlerinde düzen parametresinde görülen sürekli davranış ve manyetik alınganlıkta oluşan karakteristik iki pik davranışının yanı sıra öz ısıda anormal bir davranış ortaya çıkmaktadır. MC çalışmalarında, ardışık $Q \rightarrow F \rightarrow Q \rightarrow SQ$ faz geçişlerindeki $Q \rightarrow F \rightarrow Q$ faz geçişlerinde öz ısıda görülen anormal davranıştan dolayı bu faz geçişlerinin üçüncü derece faz geçişleri olabileceği bildirilmektedir. Ancak bu geçişlerin ikinci derece veya

üçüncü derece olduğu noktasında kesin bir bilgiye rastlanılmamıştır. Bu nedenle, ardışık ve tekrarlayan faz geçişleri için kritik üs değerleri tespit edilerek konuya açıklık getirilmiştir. Çalışma sonunda, modelin 3-boyutlu Ising model evrensellik sınıfı içinde olduğu ($\nu=0,64$, $\beta=0,31$, $\gamma=1,25$ ve $\alpha=0,12$) ortaya konmuştur.

KAYNAKLAR

1. Onsager, L., "Crystal Statistics I. A Two dimensional model with an Order-Disorder Transition", **Phys. Rev.** , 65:117-149 (1944).
2. Blume M., Emery V.J. and Griffiths R.B., "Ising Model for the λ transition and phase separation in $\text{He}^3\text{-He}^4$ mixtures", **Phys. Rev. A** 4:1071-1077 (1971).
3. Lajzerowicz J., Sivardiere J., "Spin-1 lattice-gas model. I. Condensation and solidification of a simple fluid", **Phys. Rev. A** 11(6):2079-2089 (1975).
4. Sivardiere J., Lajzerowicz J., "Spin-1 lattice-gas model. II. Condensation and phase separation in a binary fluid", **Phys. Rev. A** 11:2090-2100 (1975).
5. Schick M., Shih W.H., "Spin-1 model of a microemulsion", **Phys. Rev. B** 34(3):1797-1801 (1986).
6. Newman K.E., Dow J.D., "Zinc-blende—diamond order-disorder transition in metastable crystalline $(\text{GaAs})_{1-x}\text{Ge}_{2x}$ alloys", **Phys. Rev. B** 27(12):7495-7508 (1983).
7. F.Y. Wu, "On the Horiguchi's Solution of the Blume-Emery-Griffiths Model", **Phys. Lett. A** 116:245-247 (1986).
8. Rosengren, A., Häggkvist, R., "Rigorous solution of a two-dimensional Blume-Emery-Griffiths model", **Phys. Rev. Lett.** 63:660-663 (1989).
9. Akheyan, A. Z., and Ananikian N. S., "Global Bethe lattice consideration of the spin-1 Ising model", **J. Phys. A: Math. Gen.** 29:721-731, 1996.
10. Vichniac G.Y., "Simulating Physics with Cellular Automata", **Physica D** 10:96-116 (1984).
11. Pomeau, Y., "Invariant in Cellular Automata", **J. Phys. A: Math. Gen.**, 17:L415-L418 (1984).
12. Hermann, H. J., "Fast Algorithm for the simulation of Ising Model", **J. Stat. Phys.**, 45:145-151 (1986).
13. Creutz M., "Deterministic Ising Dynamics", **Annals of Physics**, 167:62-72 (1986).

14. Aktekin N., "The simulation of the Ising Model on Creutz Cellular Automaton", Annual Reviews of Computational Physics VII, ed. D. Stauffer, **World Scientific**, Singapore, 1-23 (2000).
15. Kutlu B., Kasap M., Turan S., "The Simulation of The Two-Dimensional Ising Model in the Presence of an External Magnetic Field on the Creutz Cellular Automaton", **Int. J. Of Mod. Phys. C**, 3: 561-572 (2000).
16. Kutlu B., "Critical Behavior of the Two-Dimensional Ising Model with Next-Nearest-Neighbor Antiferromagnetic Interaction on the Creutz Cellular Automaton", **Physica A**, 234:807-818 (1996).
17. Kutlu, B., "Critical Exponent of the Two-Dimensional Ising Model with Next-Nearest-Neighbor and Four-Spin Interactions on the Creutz Cellular Automaton", **Physica A**, 243:199-212 (1997).
18. Kutlu, B., "The Simulation of The 2D Ferromagnetic Blume-Capel on a Cellular Automaton", **Int. J. Of Mod. Phys. C**, 9:1401-1413 (2001).
19. Kutlu, B., "The Simulation of 2D Spin-1 Ising Model with Positive Biquadratic Interaction on a Cellular Automaton", **Int. J. Of Mod. Phys. C**, 10:1305-1320 (2003).
20. Solak, A. and B. Kutlu, "The critical behavior of the 2D spin-1 Ising model with the bilinear and positive biquadratic nearest neighbor interactions on a cellular automaton", **Int. J. Mod. Phys. C**, 15:1425-1438 (2004).
21. Kutlu, B., Özkan, A., Seferoğlu, N., Solak, A. and Binal, B., "The tricritical behavior of the 3D Blume-Capel model on a cellular automaton", **Int. J. Mod. Phys. C**, 16(6) :933-950 (2005).
22. Özkan A., Seferoğlu N., Kutlu B., "Critical exponents of the three-dimensional Blume-Capel model on a cellular automaton", **Physica A**, 362:327-337 (2006).
23. Seferoğlu N., Özkan A., Kutlu B., "Finite Size Effect for the First-Order Phase Transition of the Three-Dimensional Blume-Capel Model on a cellular automaton", **Chin. Phys. Lett.**, 23(9):2526-2529 (2006).
24. Seferoğlu, N., Kutlu, B., "Re-entrant phase transition of the Blume-Emery-Griffiths model for a simple cubic lattice on a cellular automaton", **Physica A**, 374:165-172 (2007).
25. Hoston, W. and Berker, A.N., "Multicritical phase diagrams of the Blume-Emery-Griffiths model with repulsive biquadratic coupling", **Phys. Rev., Lett.** 67(8): 1027-1030 (1991).

26. Netz, R.R., Berker, A.N., "Renormalization-group theory of an internal critical-end-point structure: The Blume-Emery-Griffiths model with biquadratic repulsion", *Phys. Rev. B*, 47(22):15019-15022 (1993).
27. Netz R.R., "New phases and multiple re-entrance of the Blume-Emery-Griffiths model with repulsive biquadratic coupling: Monte Carlo Renormalization-group theory ", *Europhys. Lett.*, 17(4):373-377 (1992).
28. Lapinkas S. and Rosendren A. "Blume-Emery-Griffiths model on three-dimensional lattices: Consequences for the antiferromagnetic Potts model", *Phys. Rev., B*, 49(21):15190-15196 (1994).
29. Baran O.R. and Levitski R.R., "Reentrant phase transitions in the Blume-Emery-Griffiths model on a simple cubic lattice: The two-particle cluster approximation", *Phys. Rev. B*, 65:172407 (2002).
30. Kasono K. and Ono I., "Re-entrant phase transitions of the Blume-Emery-Griffiths model", *Z. Phys. B: Condens. Matter*, 88:205-212 (1992).
31. Mouritsen, O.G., "Computer Studies of Phase Transitions and Critical Phenomena", *Springer*, Berlin, 22-26 (1984).
32. Challa, M.S.S., Landau, D.P., and Binder, K., "Finite-size effects at temperature-driven first-order transitions", *Phys. Rev. B*, 34:3:1841-1852 (1984).
33. Binder K., Landau D.P., "Finite-size scaling at first-order phase transitions", *Phys. Rev. B*, 30(3):1477-1485 (1984).
34. Deserno, M., "Tricriticality and the Blume-Capel model: A Monte Carlo study within the microcanonical ensemble", *Phys. Rev. E* 56(5):5204-5210 (1997).
35. Ota, S.B., Ota, S., "Microcanonical Monte Carlo simulations of the first-order transition in two-dimensional Potts model", *J.Phys.:Condens. Matter*, 12:2233-2243 (2000).
36. Ota, S., Ota, S.B., "Negative specific heat ve finite-size effects at the first-order transition", *Phys.Lett. A*, 285:247-250 (2001).
37. Rikvold, P.A. and German, B.M., In Annual Reviews of Computational Physics I, ed., Stauffer D., *World Scientific*, Singapore, 141-191 (1994).
38. Privman, V., "Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems", *World Scientific*, Singapore, 225-260 (1990).

39. Borgs, C. And Kotecky, R., "Finite Size Scaling for Potts Models", **J. Stat. Phys.** 62:529 (1991).
40. Borgs, C. And Kotecky, R., "A Rigorous Theory of Finite-Size Scaling at First Order Phase Transitions", **J. Stat. Phys.** 61:79 (1990).
41. Chen, S., Ferrenberg, A.M. and Landau, D.P., "Randomness-Induced Second-Order Transition in the Two-Dimensional Eight-State Potts Model: A Monte Carlo Study", **Phys. Rev. Lett.** 69:1213-1215 (1992).
42. Lee, J., and Kosterlitz M.J., "Finite-size scaling and Monte carlo simulations of first-order phase transitions", **Phys. Rev. B**, 43(4):3265-3277 (1991).
43. Fisher, M.E. and Berker, A.N., "Scaling for First-Order Phase Transitions in Thermodynamic and Finite Systems" **Phys. Rev. B**, 26:2507-2513 (1982).
44. Privman, V., Fisher M.E., "Finite-size Effects at First-Order Transitions", **J. Stat. Phys.** 33(2):385-417 (1983).
45. Cardy, J.L., and Nightingale M.P., "Finite-size analysis of first-order phase transitions: Discrete and continuous symmetries", **Phys. Rev. B**, 27:4256 (1983).
46. Stanley, H.E., "Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena", **Oxford University Press**, New York and Oxford, 260-264 (1971).
47. Baxter, R.J., "Exactly Solved Models in Statistical Mechanics", **Academic Press**, London San Diego, 24-31 (1989).
48. Huang K., "Statistical Mechanics", Second edition, **John Wiley & Sons**, Inc. New York, 332-334 (1987).
49. Capel, H.W., "On the possibility of first-order phase transitions in Ising system of triplet ions with zero-field splitting", **Physica**, 32:966-988 (1966).
50. Siqueira, A.F., Fittipaldi, I.P., "New effective-field theory for the Blume-Capel model", **Physica** 138A:592-611 (1986).
51. Tucker, J.W., "The tri-critical point in the Blume-Emery-Griffiths model", **J. Phys.: Condens. Matter** 1:485-489 (1989).

52. Kaneyoshi, T., Benyoussef, A., "Correlated effective-field Treatment of the Blume-Capel Model with Half Integer Spins", **Phys. Stat. Sol. B**, 178:233-246 (1993).
53. Saul, D.M., Wortis, M., Stauffer, D., "Tricritical behavior of the Blume-Capel model", **Phys. Rev. B**, 9(11):4964-4980 (1974).
54. Grollau, S., Kierlik, E., Rosinberg M.L., Tarjus G., "A Thermodynamically self-consistent theory for the Blume-Capel model", **Phys. Rev. E**, 63: 041111 (2001).
55. Grollau, S., "Phase diagram of the spin-3/2 Blume-Capel model in three dimensions", **Phys. Rev. E**, 65:056130-056135 (2002).
56. Falikov, A., Berker, A.N., "Tricritical and Critical-Endpoint Phenomena under Random Bonds", **Phys. Rev. Lett.**, 76:4380-4383 (1996).
57. Ng, W.M and Barry, "Cluster-variation method applied in the pair approximation to the $S=1$ Ising ferromagnet having additional single-ion-type uniaxial anisotropy", **Phys. Rev. B**, 17:3675-3683 (1978).
58. Buzano C. and Pelizzola A., "New topologies in the phase diagram of the semi-infinite Blume-Capel model", **Physica A**, 216:158-168 (1995).
59. Ekiz, C., Keskin, M., and Yalçın, O., "Metastable and Unstable States of the Blume-Capel Model obtained by the Cluster Variation Method and the Path Probability Method", **Physica A**, 293:215-232 (2001).
60. Jain, A.K. and Landau, D.P., "Monte Carlo Study of the fcc Blume-Capel Model", **Phys. Rev. B**, 22(1):445-454 (1980).
61. Kimel, J.D., Black, S., Carter, P., Wang, Y.L., "Monte Carlo Study of the Antiferromagnetic Two-Dimensional Blume-Capel Model", **Phys. Rev. B** 35:3347-3353 (1987).
62. Wilson, W.G. and Vause, C.A., "Multilattice microcanonical simulation of the three-dimensional three-state Potts model", **Phys. Rev. B**, 36(1):587-593 (1987).
63. Kimel, J.D., Rikvold, P.A., Wang, Y.L., "Phase diagram for the antiferromagnetic Blume-Capel model near tricriticality", **Phys. Rev. B** 45:7237-7243 (1992).
64. Du, A., Yü, Y.Q. and Liu, H.J., "Expanded Bethe–Peierls approximation for the Blume–Capel model", **Physica A**, 320:387-397 (2003).

65. Chen H. H., and Levy P. M., "Dipole and Quadrupole Phase Transitions in Spin-1 Models", **Phys. Rev., B**, 7:4267-4284 (1973).
66. Buzano C., and Pelizzola A., "Multicritical points and reentrant phenomenon in the BEG model", **Physica A**, 189:333-347(1992).
67. Hoston W. and Berker A. N., "Dimensionality effects on the multicritical phase diagrams of the Blume-Emery-Griffiths model with repulsive biquadratic coupling: Mean-field and Renormalization-group studies", **J. Appl. Phys.**, 70:6101-6103 (1991).
68. De Alcantara O.F., Sa Barreto, F.C., "Renormalization Group Treatment of a Spin-One Ising Model with Biquadratic Exchange Interactions", **Phys. Lett. A**, 109:341-343 (1985).
69. Kaneyoshi, T., "Contribution to the Theory of Spin-1 Ising Model", **J. Phys. Soc. Japan** 56:933-941 (1987).
70. Tucker J. W., "Effective Field Theory of a Quenched Dilute Spin-1 Ising Model", **J. Mag. and Magn. Mater.**, 191:104-107: (1992) .
71. Tucker J. W., "The spin-one Ising model on a honeycomb lattice", **J. Appl. Phys.**, 69:6164-6166 (1991).
72. Wang Y. L., Lee F. and Kimel J. D., "Phase diagrams of the spin-1 Ising Blume-Emery-Griffiths model: Monte Carlo simulations", **Phys. Rev., B**. 36:8945-8947 (1987).
73. Wang Y. L. and Wentworth C., "Phase diagrams of three-dimensional Blume-Emery-Griffiths model", **J. Appl. Phys.**, 61(8):4411-4412 (1987).
74. Tanaka M. and Kawabe T., "Spin-One Ising Model Including Biquadratic Interaction with Positive Coupling Constant", **J. Phys. Soc. Japan** 54:2194-2203 (1985).
75. Keskin M., Ekiz C., Yalçın O., "Stable, metastable and unstable solutions of the Blume-Emery-Griffiths model", **Physica A** 267:392-405 (1999).
76. Ekiz C. and Keskin M., "Multicritical phase diagrams of the Blume-Emery-Griffiths model with repulsive biquadratic coupling including metastable phases", **Phys. Rev., B**, 66: 054105-054116 (2002).
77. Keskin M. and A. Erdinç, "Multicritical phase diagrams of the Blume-Emery-Griffiths model with repulsive biquadratic coupling including metastable phases: the pair approximation and the path probability method with pair distribution", **J. Magn. Magn. Mater.**, 283:392-408 (2004).

78. Tucker J. W., Balcerzak T., Gzik M. and Sukiennicki A., "Phase diagram of a spin-1 magnetic bilayer by cluster variational theory: Exact results for a BEG model on a Bethe lattice with five-fold coordination", **J. Magn. and Magn. Mater.**, 187:381-392 (1998).
79. Koza Z., Jasuukiewicz C., and Pekalski A., "Transfer-matrix methods in the Blume-Emery-Griffiths Model", **Physica A**, 164 :191 (1990).
80. Toda M., Kubo R., Saito N., "Statistical Physics I", Second Edition, **Springer**, Germany, 155 (1995).
81. Mills R.E., Ascher E., Jaffee R.I., „Critical Phenomena in Alloys, Magnets, and Superconductors“, **McGraw-Hill Book Company**, USA, 249 (1970).
82. Yeomans, J.M., "Statistical Mechanics of Phase Transition", **Clarendon Press**, Oxford, 45-47 (1992).
83. Fisher, M.E. and Barber M.N, "Scaling Theory for Finite-Size Effects in the Critical Region", **Phys. Rev. Lett.**, 28(23):1516-1519 (1972).
84. Binder K., "Finite Size Scaling Analysis of Ising Model Block Distribution Functions", **Z. Physik B**, 43:119-140 (1981).
85. Binder K., "Critical properties and finite-size effects of the five-dimensional Ising model", **Z. Physics B**, 61:13-23 (1985).
86. Wolfram, S., "Statistical Mechanics of Cellular Automata", **Rev. Mod. Phys.**, 55:601-642 (1983).
87. Wolfram, S., "Theory and Applications of Cellular Automata", **World Scientific** (1986).
88. Dellago C.H. and Posch H. A., "Lyapunov instability of the extended XY-model in equilibrium and nonequilibrium steady states", **Physica A**, 237:95-112 (1997).
89. Kutlu, B., Çivi, M., "Critical Finite-Size Scaling Relation of the Order-Parameter Probability Distribution for the Three-Dimensional Ising Model on a Cellular Automaton", **Chin. Phys. Lett.**, 23(10):2670-2673 (2006).
90. Bakchich, A., Benyoussef A., Touzani, M., "Phase diagrams of the Blume-Emery-Griffiths model: real-space renormalization group investigation and finite size scaling analysis", **Physica A**, 186:524-533 (1992).
91. Rachadi A., Benyoussef A., "Monte Carlo study of the Blume-Emery-Griffiths model at the ferromagnetic-antiquadrupolar-disorder phase interface", **Phys. Rev. B**, 69:064423 (2004).

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı, Adı : SEFEROĞLU, Nurgül
 Uyuğu : T.C.
 Doğum tarihi ve yeri : 20 Mart 1975 Ankara
 Medeni hali : Evli
 Telefon : 0 (312) 4102414
 Faks :
 e-mail : nurguls@gazi.edu.tr

Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet tarihi
Doktora	Gazi Üniversitesi/Fizik Bölümü	2007
Yüksek lisans	Hacettepe Üniversitesi /Fizik Müh. Bölümü	2001
Lisans	Hacettepe Üniversitesi/ Fizik Müh. Bölümü	1998

İş Deneyimi

Yıl	Yer	Görev
2001-	Bayındırlık ve İskan Bakanlığı, Bilgi İşlem Dairesi Başkanlığı	Mühendis
1998- 2001	Hacettepe Üniversitesi	Araştırma Görevlisi

Yabancı Dil

İngilizce

Yayınlar

1. S. Demirtürk, N. Seferoğlu, M. Aydın, Y. Gündüç, "Finite Size Scaling by Using Scaling Functions in 2D $q=2$ and $q=7$ state Potts Model", Int. J. Mod. Phys. C 12:3:403-412 (2001)
2. B. Kutlu, A. Özkan, N. Seferoğlu, A. Solak and B. Binal, "The tricritical behavior of the 3D Blume-Capel model on a cellular automaton", Int. J. Mod. Phys. C 16 (2005) 933.

3. A. Özkan, N. Seferoğlu, B. Kutlu, "Critical exponents of the three-dimensional Blume-Capel model on a cellular automaton", *Physica A*, 362:327-337 (2006).
4. N. Seferoğlu, A. Özkan, B. Kutlu, "Finite Size Effect for the First-Order Phase Transition of the Three-Dimensional Blume-Capel Model on a cellular automaton", *Chin. Phys. Lett.*, 23(9):2526-2529 (2006).
5. N. Seferoğlu, B. Kutlu, "Re-entrant phase transition of the Blume-Emery-Griffiths model for a simple cubic lattice on a cellular automaton", *Physica A*, 374:165-172 (2007).

SEMPOZYUMLAR

1. S. Demirtürk, N. Seferoğlu, M. Aydın, Y. Gündüç, "Finite Size Scaling by Using Scaling Functions in 2D $q=2$ and $q=7$ state Potts Model", 8. İstatistik Fizik Günleri, 5-6 Temmuz 2001, İTÜ, İstanbul.
2. N. Seferoğlu, B. Kutlu, "3-d reentrant phase transition of the Blume-Emery-Griffiths model", 13. Yoğun Madde Fiziği Kongresi, ODTÜ, Ankara.
3. B. Kutlu, A. Özkan, N. Seferoğlu "The effect of the heating rate on the 3d Blume-Capel model", 9. Yoğun Madde Fiziği Kongresi, Gazi Üniversitesi, Ankara.