

**DIŐ MANYETİK ALANDA SPIN-1 ISING MODELİN CELLULAR  
AUTOMATON İLE İNCELENMESİ**

**Hacer DEMİREL**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ  
FİZİK**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**TEMMUZ 2007  
ANKARA**

Hacer DEMİREL tarafından hazırlanan DIŞ MANYETİK ALANDA SPIN 1 ISING MODELİN CELLULAR AUTOMATON İLE İNCELENMESİ adlı bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.

.....

Prof. Dr Bülent Kutlu.

Tez Yöneticisi

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

Başkan: : Prof.Dr. Mehmet ZENGİN

Üye : Prof.Dr. Abdullah GÜNEN

Üye : Prof.Dr. Bülent KUTLU

Üye : \_\_\_\_\_

Üye : \_\_\_\_\_

Tarih : 19/07 /2007

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

## **TEZ BİLDİRİMİ**

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

Hacer DEMİREL

**DIŞ MANYETİK ALANDA SPIN-1 ISING MODELİN CELLULAR  
AUTOMATON İLE İNCELENMESİ  
(Yüksek Lisans Tezi)**

**Hacer DEMİREL**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ  
Temmuz 2007**

**ÖZET**

Bu çalışmada, spin-1 Ising model için Creutz Cellular Automatandan geliştirilen bir algoritma kullanılarak  $\alpha, \beta, \gamma, \nu$  ve  $\delta$  statik kritik üsleri hesaplanmaktadır. Hesaplamalar sonlu basit kübik örgülerde periyodik sınır şartı altında gerçekleştirilmiştir ve sonuçlar sonlu örgü ölçekleme teorisi kullanılarak değerlendirilmiştir. Özısı, düzen parametresi, manyetik alınganlık, kritik üs değerleri üç boyutta evrensel değerlerle ( $\alpha = 0.12$ ,  $\beta = 0.31$ ,  $\gamma = 1.25$ ,  $\nu = 0.64$  ve  $\delta = 5$ ) uyuşmaktadır

**Bilim Kodu : 202.1.147**

**Anahtar Kelimeler: Ising Model .cellular automaton sonlu örgü ölçekleme teorisi, kritik üs**

**Sayfa Adedi : 43**

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

**INVESTIGATION OF THE SPIN-1 ISING MODEL ON THE EXTERNAL  
MAGNETIC FIELD USING CELLULAR AUTOMATON**

**(M. Sc. Thesis)**

**Hacer DEMİREL**

**GAZİ ÜNİVERSİTY**

**INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY**

**July 2007**

**ABSTRACT**

**In this study, the static critical exponents  $\alpha, \beta, \gamma, \nu$  and  $\delta$  are computed with the improved algorithm from Creutz cellular automaton. The calculations are executed on the finite simple cubic lattice under periodic boundary conditions. The static critical exponents are estimated by analyzing the data within the framework of the finite-size scaling theory. The values of the static critical exponents  $\alpha = 0.12$ ,  $\beta = 0.31$ ,  $\nu = 0.64$  and  $\delta = 5$  which are related to the specific heat, the order parameter, the susceptibility, the correlation length and the magnetic field are in good agreement with their universal values for three dimension.**

**Science Code : 202.1.147**

**Key Words : Ising model, cellular automata, finite-size scaling the  
theory, critical exponents**

**Page : 43**

**Adviser : Prof. Dr. Bülent Kutlu**

## TEŞEKKÜRLER

Çalışmalarım boyunca değerli yardım ve katkılarıyla beni yönlendiren Hocam Prof. Dr. Bülent Kutlu'ya yine kıymetli tecrübelerinden faydalandığım hocam Aycan Özkan'a, manevi destekleriyle beni hiçbir zaman yalnız bırakmayan çok değerli Hocam Haşmet Yılmaz'a ,arkadaşım Çetin Yavuz' a teşekkürü bir borç bilirim.

## İÇİNDEKİLER

	<b>Sayfa</b>
ÖZET.....	iv
ABSTRACT .....	v
TEŞEKKÜRLER .....	vi
İÇİNDEKİLER .....	vii
ŞEKİLLERİN LİSTELERİ.....	viii
1. GİRİŞ .....	1
2. TEORİ.....	3
2.1. Ising Model .....	4
2.2. Statik Kritik Olay ve Statik Kritik Üsler.....	8
2.3. Kendiliğinden Manyetizasyon $M$ , Manyetik Alınganlık $C$ 'nin Sıcaklığa Bağımlılıkları .....	9
2.4. Binder Oranları.....	11
2.5. Sonlu Örgü Ölçekleme Teorisi .....	11
2.6. Boyut Analizi .....	12
2.7. Termodinamik Nicelikler için Sonlu Örgü Ölçekleme Bağıntıları.....	13
3. MODEL	
3.1. Cellular Automaton Modeli .....	17
3.2. Cellular Automaton Algoritmaları	
3.2.1. Standart algoritma .....	20
3.2.2. Soğutma algoritması .....	21

	<b>Sayfa</b>
4. ARAŞTIRMA BULGULARI .....	21
4.1. Termodinamik Niceliklerin Sıcaklıkla Değişimi .....	21
4.1.1. Kendiliğinden manyetizasyon M ve manyetik alınganlık $\chi$ niceliklerinin sıcaklıkla değişimi .....	21
4.1.2. İç Enerji $H_1$ ve Özısı C niceliklerinin sıcaklıkla değişimi .....	23
4.2. Sonsuz Örgü Kritik Sıcaklığının Tesbiti .....	25
4.3. Binder Parametresi ile Kritik Sıcaklığın Tayini .....	26
4.4. $\alpha, \beta$ ve $\gamma$ Statik Kritik Üslerin Hesabı	
4.4.1. Kendiliğinden manyetizasyon kritik üssü $\beta$ .....	27
4.4.2. Manyetik alınganlık kritik üssü $\gamma$ .....	28
4.4.3. Özısı kritik üssü $\alpha$ .....	29
4.4.4. Binder parametresi $\nu$ 'nün tayini .....	31
4.5. Dış Manyetik Alan Uygulandığı Durumda Termodinamik Niceliklerin Sıcaklıkla Değişimi	
4.5.1. Küçük bir dış alanda kendiliğinden manyetizasyon M, manyetik alınganlık $\chi$ niceliklerinin sıcaklıkla değişimi .....	32
4.5.2. İç enerji $H_1$ ve özısı C niceliklerinin sıcaklıkla değişimi .....	33
4.6. Alan Kritik Üssünün ( $\delta$ ) Hesabı .....	35
5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER .....	40
KAYNAKLAR .....	42
ÖZGEÇMİŞ .....	43



## ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.1. $h=0$ da kendiliğinden manyetizasyon $M$ 'nin sıcaklıkla değişimi .....	4
Şekil 2.2. Üç boyutlu basit kübik örgüde en yakın komşu spinler.....	5
Şekil 2.3. Spin1/2 Ising model için taban durumlar.(a)Ferromanyetik Taban durumlar (b) Antiferromanyetik taban durumlar .....	5
Şekil 2.4. Spin-1 Ising model için taban durumlar (a)Ferromanyetik taban Durumlar (b) Antiferromanyetik taban durumlar.....	8
Şekil 4.1.(a) Kendiliğinden mıknatıslanma $M$ ve quadropol moment $Q$ 'nun $kT/J$ 'ye bağlı değişimi (b) Manyetik alınganlık $\chi$ 'in $kT/J$ ye bağlı değişimi .....	22
Şekil 4.2. (a) İç enerjinin $kT/J$ 'ye bağlı değişimi (b) özısınsının $kT/J$ ye bağlı Değişimi .....	24
Şekil 4.3. Sonsuz örgü kritik sıcaklığının belirlenmesi.....	25
Şekil 4.4. $gL$ nin $kT/J$ ye bağlı değişimi .....	27
Şekil 4.5. $T < T_c$ ve $T > T_c$ için $LogML^{B/v}$ nün $LogL^{1/v} \epsilon$ a bağlı değişimi.....	28
Şekil 4.6. Manyetik alınganlık için sonlu örgü ölçekleme grafiği.....	29
Şekil 4.7.a.) Özısı için sonlu örgü ölçekleme grafiği $T < T_c$ .....	30
Şekil 4.7.b) Özısı için sonlu örgü ölçekleme grafiği $T > T_c$ .....	30
Şekil 4.8. $gL$ 'nin ölçekleme grafiği .....	31
Şekil 4.9.a) Dış alan uygulanması durumunda mıknatıslanma ( $M$ ) ve quadropol moment $Q$ 'nun $kT/J$ ye bağlı değişimi .....	32
Şekil 4.10. b) Manyetik alınganlık $\chi$ 'nin $kT/J$ ye bağlı değişimi.....	33
Şekil 4.11. İç enerjinin $kT/J$ ye bağlı değişimi .....	34

<b>Şekil</b>	<b>Sayfa</b>
Şekil 4.12. Özısının $kT/J$ ye bağlı değişimi .....	35
Şekil 4.13. Kendiliğinden Mıknatıslanma (M)'nin Dış alana bağlı değişimi .....	36
Şekil4.14. $\text{Log}h.$ 'nin $\text{Log}M$ 'ye karşı değişim grafiği .....	37
Şekil 4.15. $L^{1/v}$ nün $\delta L$ ye karşı değişim grafiği .....	37
Şekil 4.16. $\text{Log}hL^{\beta\delta/v}$ nün $\text{Log}ML^{\beta/v}$ ye karşı değişim grafiği .....	38
Şekil 4.17. $\text{Log}hL^{\gamma\delta/v(\delta-1)}$ nün $\text{Log}kT\chi L^{-\gamma/v}$ ye bağlı değişim grafiği .....	39

## 1.GİRİŞ

Uzun zamandan beri düzen- düzensizlik ve kritik nokta civarında termodinamik niceliklerin davranışı deneysel ve teorik olarak araştırılmaktadır. Bu çalışmalar içinde manyetik faz geçişi problemi için Ising model kullanılarak yapılan çalışmalar önemli bir yer tutmaktadır. İki spin durumlu ( spin-1/2 ) en yakın komşu etkileşmeli Ising modelin basit örgü sistemleri için tam çözümü Onsager tarafından gerçekleştirilmiştir[1]. Fakat en yakın komşu etkileşmeli iki boyutlu spin-1/2 Ising model dışındaki Hamiltoniyenler için tam çözüm yapılamamaktadır. Spin-1/2 Ising modele göre çok daha geniş uygulama alanına ve zengin faz diyagramlarına sahip üç durumlu iki düzen parametrelili bir spin modeli 19. yüzyılda Blume-Emery-Graffhit tarafından takdim edilmiştir. Bu model en genel etkileşmeler için spin-1 Ising model olarak adlandırılmaktadır. Bu modelin iki ve daha üst boyutlarda tam çözümü yapılamamaktadır. Bu yüzden Ising modelle ilgili araştırmalarda Etkin Alan Teorisi [2], Renormalizasyon Grup Teorisi[3], Cellular Automaton[4], Transfer Matris Hesapları[5], Monte Carlo[6], Cluster Küresel Değişim Metodu[7], gibi yaklaşık ve simülasyon teknikleri kullanılarak yapılan hesaplamalar önemli yer tutmaktadır. Üç durumlu örgü gaz modelleri[8], Bozon-Fermiyon Karışımları ( $He^3-He^4$ ) [9], Süper akışkanlar (çok bileşene sahip)[10], Yarı iletkenler[11] gibi üçlü kritik davranışa sahip fiziksel sistemleri Spin-1 Ising modelle modellemek mümkündür. Spin-1 Ising model spin-1/2 Ising modele göre daha geniş uygulama alanına ve zengin faz diyagramına sahip olduğundan yukarıda sayılan yaklaşık ve simülasyon teknikleri kullanılarak sıkça incelenmektedir. Bilineer(J), biquadratik(K), en yakın komşu etkileşmeli ve kristal alan parametrelili (D) Spin-1 Ising (BEG) model olarak bilinmektedir[9]. Biquadratik etkileşme sabitinin olmadığı model (K=0) ise Blume – Capel model olarak adlandırılmaktadır[12]. Bu çalışmada Blume-Capel modelin kritik davranışı en yakın komşu etkileşmeler alınmadan Cellular Automaton Algoritması kullanılarak incelenmiştir. Cellular Automaton orijinal olarak Neuman ve Ulam tarafından doğal sistemler (Fizik, Kimya, Biyoloji) için kurulmuş matematiksel bir modeldir. Bu modelde uzay ve zaman kesitli değerlere sahiptir ve sonsuza kadar genişletilebilen düzenli hücreler örgüsünde oluşur. Her bir hücrede

çeşitli değerler alan değişkenler yer almaktadır bu model için ilk teoriler 1983 yılında Wolfram tarafından verilmiştir[14]. Ising model'in ve çeşitli fiziksel problemlerin bir Cellular Automaton olarak simülasyonu ilk olarak Vichniac tarafından önerilmiştir[15]. Vichniac'ın Ising model için önerdiği kurallar Pomeau ve Hermann tarafından Q2R Cellular automaton olarak geliştirilmiştir[16]. Q2R Ising modelde spin-spin etkileşme enerjisi sistemin toplam enerjisine karşılık gelmektedir. Q2R algoritması ile toplam enerjinin korunduğu mikrokantonik bir küme oluşmakta, yani simülasyon süresince herhangi bir spin değişiminde iç enerjinin korunduğu konfigürasyonlar üretilmektedir. İç enerji tüm simülasyonlar süresince sabit kaldığından özısı, iç enerjinin dalgalanmaları kullanılarak hesaplanamamaktadır. Bu kısıtlama iç enerji ve spine eşlenik momentuma karşılık gelen kinetik enerjinin toplamının korunduğu CA Creutz Ising model ile ortadan kalkmaktadır[17]. 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 olmaktadır. Creutz Cellular Automaton'ın Ising modeli taklit etmekte oldukça başarılı olduğu daha önceki yıllarda yapılan çalışmalarda gösterilmiştir[18–19]. Her bir parametre için sonlu örgülerde yapılan hesaplamalar kullanılarak sonsuz örgü davranışı ; “ sonlu örgü ölçekleme teorisi “ ile elde edilmiştir.

Bu çalışmada üç boyutlu ferromanyetik Blume-Capel modelin dış alanın varlığında ve yokluğunda kritik nokta civarındaki davranışları  $L=8, 10, 12, 16$  ve  $18$  kenar uzunluğuna sahip  $(L \times L \times L)$  sonlu basit kübik örgülerde kullanılmıştır. Termodinamik niceliklerin değişimleri için  $1\ 000\ 000$  Cellular Automaton zaman adımı üzerinden artırılarak elde edilmiştir. Kendiliğinden manyetizasyon  $M$ , manyetik alınganlık  $\chi$ , iç enerji  $H_I$  ve öz ısı  $C$  gibi termodinamik niceliklerin sıcaklıkla değişim grafikleri oluşturulmuş ve bu niceliklerin faz geçiş bölgesindeki süreksizliklerini tanımlayan  $(\alpha, \beta, \gamma, \nu$  ve  $\delta)$  statik kritik üsleri sonlu örgü ölçekleme teorisi kullanılarak elde edilmiştir. Bu bölgede hesaplanan kritik üs değerleri  $(\beta = 0,31, \gamma = \gamma' = 1,25, \alpha = 0,12, \nu = 0,64, \delta = 5)$  evrensel değerlerle

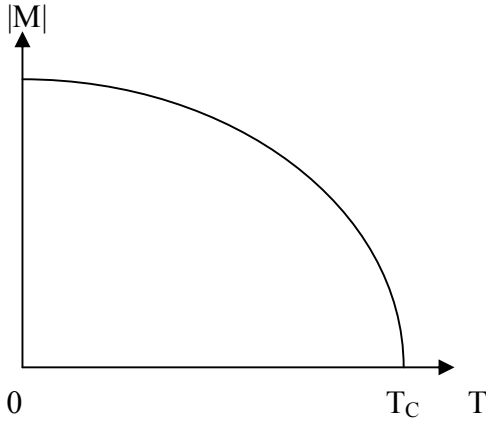
uyum içindedir. Ayrıca dış manyetik alan varlığında da kendiliğinden manyetizasyon  $M$ , manyetik alınganlık  $\chi$ , iç enerji  $H_I$  ve özısı  $C$  gibi termodinamik niceliklerin değişim grafikleri elde edilmiştir.

Tezin ikinci bölümünde Ising model, kritik sıcaklık civarında termodinamik niceliklerin uydukları kuvvet kanunları ve sonlu örgü ölçekleme teorisi verilmiştir. Ayrıca Cellular Automaton'ın yapısı ve spin-1 Ising model algoritması üçüncü bölümde anlatılmıştır. Dördüncü bölümde ise termodinamik niceliklerin kritik sıcaklık civarındaki davranışlarını karakterize eden statik kritik üsler, sonsuza ekstrapolasyon ve sonlu örgü ölçekleme teorisi kullanılarak yapılan hesaplama sonuçları sunulmuştur. Elde edilen değerler diğer sayısal hesaplama yöntemlerinin sonuçları ile karşılaştırılmıştır.

## 2.TEORİ

### 2.1. Ising model

Ising model 1925 yılında ferromagnetik maddelerin (demir, nikel v.b.) termodinamik niceliklerini incelemek için kurulmuş bir modeldir. Ferromanyetik metaller, zayıf bir dış alan içinde bile birbirlerine paralel olarak yönelmeye çalışan atomik manyetik dipol momentlere sahiptirler. Bir kere dipol momentler paralel hale getirildikten sonra, dış alan kaldırılrsa bile madde mıknatıslanmış olarak kalmaktadır. Ancak bu durum Curie sıcaklığı denilen sıcaklığın altında gerçekleşmektedir. Bu sıcaklık ve bu sıcaklığın üstünde yönelim rasgele olmakta ve mıknatıslanma sözkonusu olmamaktadır (Şekil 2.1). Curie sıcaklığına her iki taraftan yaklaşıldığında ise özısı ve manyetik alınganlık ıraksamaktadır.



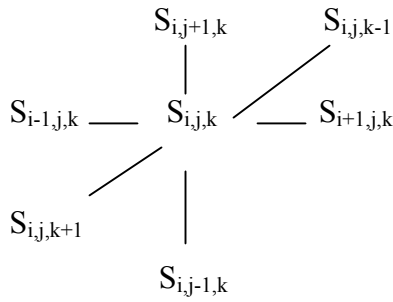
Şekil 2.1  $h=0$  'da kendiliğinden manyetizasyon  $M$ 'nin sıcaklıkla değişimi[1]

Ising modelde ele alınan sistem, örgü konumları adı verilen  $N$  tane sabit noktadan oluşan  $n$ -boyutlu periyodik bir örgüdür. Örgünün geometrik yapısı iki boyutta kare veya üçgen ; üç boyutta ise kübik veya hegzagonal olabilir. Her bir örgü konumuna,  $+1$  ve  $-1$  değerlerinden birini alabilen  $s_i(1,2,3,\dots,N)$  spin değişkeni takılmıştır. Sistemde bundan başka değişken yoktur. Eger  $s_i=+1$  ise  $i$ . konumun spin yukarı durumda olduğu ve  $s_i=-1$  ise spin aşağı durumda olduğu söylenir.

Verilen bir  $\{s_i\}$  spin kümesine sahip olan bir sistemin enerjisi aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$E_1 = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - H \sum_{i=1}^n S_i \quad (2.1)$$

Burada  $I$  alt indisi Ising enerjisi,  $\langle ij \rangle$  en yakın komşu çiftleri üzerinden toplamı göstermektedir. İki boyutta kare örgü için bir spin dört en yakın komşu spine sahiptir (Şekil 2.2).  $\langle ij \rangle$  üzerinden toplam  $2N$  terim ihtiva etmektedir.  $J_{ij}$  etkileşme enerjisi ve  $H$  dış manyetik alan sabiti olarak verilmektedir.



Şekil 2.2. Üç boyutta basit kübik örgü için en yakın komşu spinler [2]

İzotropik etkileşmelerin olduğu durumda  $J_{ij}=J$  alınmakta ve  $J>0$  olduğu durum ferromanyetizmayı  $J<0$  olduğu durum ise antiferromanyetizmaya karşılık gelmektedir [21]. Spin-1/2 Ising model için taban durumlar Şekil 2.3'de verilmiştir.



Şekil 2.3. Spin 1/2 Ising model için taban durumlar a) Ferromanyetik taban durumlar b) Antiferromanyetik taban durumlar

Spin1/2 Ising modelde bütün termodinamik fonksiyonlar,  $E_i$  enerjili mümkün konfigrasyonlar üzerinden hesaplanmaktadır.

$E_i$  enerjili bir sistemin ağırlık fonksiyonu aşağıdaki şekildedir.

$$Z_i = \sum_{s_1} \sum_{s_2} \dots \sum_{s_N} e^{\beta E_i(s_i)} \quad (2.2)$$

Burada her bir  $s_i$  spin değişkeni bağımsız olarak  $\pm 1$  değerleri alabildiğinden yukarıdaki toplam  $2^N$  terimden oluşmaktadır. Bir spin sistemi için spin başına serbest enerji aşağıdaki ifade ile verilmektedir.

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

Bu serbest enerjiye bağlı olarak spin başına termodinamik nicelikler aşağıdaki şekilde tanımlanmaktadır.

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

$$C_1(H, T) = \frac{\partial U_i}{\partial T} \quad (2.5)$$

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

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

Bu ifadelerde  $U_i$  iç enerji,  $C_1$  özısı,  $M$  düzen parametresi  $\chi$  manyetik alınganlıktır.

### 2.1.1. Spin-1 Ising(Blume-Capel) model

Blineer (J) ve bikuadratik(K) en yakın komşu etkileşmeli ve kristal alan parametrelili spin-1 Ising model Blume-Emery-Griffths (BEG) model olarak bilinmektedir.



Biquadratik etkileşme parameresinin olmadığı model Blume-Capel model olarak adlandırılmaktadır. Blume-Capel model üç spin durumuna ve iki düzen parametresine (M,Q) sahiptir.

Blum-Capel modelin hamiltonyen ifadesi

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + D \sum_i S_i^2 \quad (2.8)$$

ile verilmektedir. Bu ifadede J bilineer etkileşme sabitidir. D kristal alan etkileşme sabiti veya tek ion anisotropy parametresidir.  $S_i$  spin değişkeni, -1, 0, +1 olmak üzere üç duruma sahiptir.  $\langle ij \rangle$  En yakın komşu üzerinden alınan toplamı göstermektedir. Genel olarak sistem  $J > 0$  için ferromanyetik,  $J < 0$  için ise antiferromanyetik bir durumu ifade etmektedir. Blume-Capel model 1. dereceden faz geçişi sergilemektedir ve ikinci derece faz geçişi sergilediği bölgeden birinci derece faz geçişi sergilediği bölgeye geçiş noktası üçlü kritik nokta olarak adlandırılmaktadır Blume-Capel model spin-1/2 Ising modele göre zengin bir faz diyagramına sahip olduğundan He<sup>3</sup>-He<sup>4</sup> karışımları, çok bileşenli süper akışkanlar, ikili alaşımlar, yarı iletken alaşımlar gibi fiziksel sistemleri modellemek için yaygın olarak kullanılmaktadır. Diğer taraftan, çok katmanlı ince filmlerde yapılan yeni deneyler, uzun mesafeli etkileşim modellerinin faz diyagramlarını anlamada önemli bir kaynak teşkil etmektedir. Bu yüzden uzun mesafeli etkileşimlerin faz geçiş karakteristiklerinin anlaşılmasında alternatif tekniklerle yapılan hesaplamalar büyük bir öneme sahiptir. Uzun mesafeli etkileşmelerini göz önüne alan Blume-Capel hamiltonyeni aşağıdaki şekilde verilmektedir.

$$H = -J_1 \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - J_2 \sum_{\langle ik \rangle} S_i S_k + D \sum_i S_i^2 \quad (2.9)$$

Burada  $\langle ij \rangle$  en yakın komşu etkileşmeleri üzerinden alınan toplamı,  $\langle ik \rangle$  ise ikinci en yakın komşu etkileşmeleri üzerinden alınan toplamı  $J_1$  birinci en yakın komşu etkileşme enerjisi,  $J_2$  ikinci en yakın komşu etkileşme enerjisini göstermektedir.

İkinci derece en yakın komşu etkileşimli Blume-Capel model son yıllarda Etkin Alan Teorisi ve Monte Carlo simülasyonları ile incelenmiştir.

$$\begin{array}{cc} + & + & & - & - & & 0 & 0 \\ + & + & & - & - & & 0 & 0 \end{array}$$

(a)

$$\begin{array}{cc} + & - & & 0 & - & & 0 & 0 \\ - & + & & - & 0 & & + & 0 \end{array}$$

(b)

Şekil 2.4. Spin-1 Ising model için taban durumlar a) Ferromanyetik taban durumlar  
b) Antiferromanyetik taban durumlar

## 2.2. Statik Kritik Olay ve Statik Kritik Üsler

Kritik olay deyimi ikinci derece faz geçişi yapan bir sistem için termodinamik niceliklerin kritik sıcaklık  $T_C$  civarındaki davranışlarına karşılık gelmektedir. Kritik sıcaklığın her iki tarafında iki faz farklı uzaysal simetrilere sahiptir. Kritik sıcaklığın üstünde manyetizasyon sıfırdır ve sistem dönme simetrisine sahiptir. Kritik sıcaklığın altında kendiliğinden manyetizasyon oluşur ve manyetizasyon vektörü uzayda tercihli bir doğrultuya sahiptir. Bu durum dönme simetrisini bozmaktadır. Bir simetrinin varlığından veya yokluğundan dolayı iki faz, kritik noktadaki süreksizlikten dolayı, termodinamik niceliklere karşılık gelen farklı fonksiyonlar ile tanımlanabilmektedir. Simetrinin bozulması yüzünden düşük sıcaklık fazını tanımlayabilmek için yeni bir parametre gerekmektedir. Bu parametre düzen parametresi olarak adlandırılmakta ve  $M$  ile gösterilmektedir. Herhangi bir sistem için bu parametre rahatlıkla ölçülebilen yaygın bir termodinamik değişken olarak alınmaktadır. Ferromanyetizma için  $M$  manyetizma vektörüdür. Kritik noktadaki değişik ölçülebilen niceliklerin süreksizlikleri farklı kritik üslerle tanımlanmaktadır. Bu üsler dış manyetik alan kritik üssü olan  $\delta$  da olmak üzere yedi tanedir.

### 2.3. Kendiliğinden Manyetizasyon $M$ , Manyetik Alınganlık $\chi$ ve Özısı $C'$ nin Sıcaklığa Bağımlılıkları

Kritik sıcaklık  $T_c$ , civarında termodinamik niceliklerin davranışı aşağıda tanımlanan indirgenmiş sıcaklık  $\varepsilon$ 'a bağlı olarak incelenmektedir.

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

$\varepsilon \rightarrow 0$  Limitinde, herhangi bir termodinamik nicelik sonlu olan düzenli bir kısım ve iraksayan” singüler” bir kısma ayrılmaktadır. Singüler kısımların  $\varepsilon$ 'ın bir kuvveti ile orantılı olarak değiştiği kabul edilmektedir. Bu kuvvetler genel olarak kesirlidir. Termodinamik niceliklerden kendiliğinden manyetizasyon (düzen parametresi )  $M$ , dış manyetik alanın olmadığı durumda, kritik sıcaklığın altında  $T$ 'nin azalan bir fonksiyonudur ve  $T_c$ 'de sıfırdır.  $T$ 'nin  $T_c$ 'ye çok yaklaştığı durumlar için  $M$  aşağıda verilen kuvvet kanuna uygun olarak değişmektedir.

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

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

Burada  $\beta$  ve  $\beta'$  kendiliğinden manyetizasyon kritik üsleri olarak adlandırılmakta ve onların değerleri üç boyutta Ising model için  $\beta = 0,31$  olarak verilmektedir. Dış manyetik alan varlığında  $\varepsilon = 0$  için hal denklemi,

$$M \propto H^{1/\delta} \quad (2.13)$$

şeklinindedir. Burada  $\delta$  bir diğer kritik üsdür ve üç boyuttaki değeri 5 dir ve dış manyetik alan varlığında hesaplanır. Sıcaklık  $T$ , sıcaklık  $T_c$  'ye çok yaklaştığında

manyetik alınganlık ıraksamaktadır. Manyetik alınganlığın kritikteki ıraksak davranışı  $\gamma$  ve  $\gamma'$  kritik üsleri ile karakterize edilmektedir.

$$kT\chi(0,T) \approx \varepsilon^{-\gamma} \quad \varepsilon \rightarrow 0^+ \quad (2.14)$$

$$kT\chi(0,T) \propto (-\varepsilon)^{-\gamma'} \quad \varepsilon \rightarrow 0^- \quad (2.15)$$

Burada  $\gamma = \gamma'$  dür ve her iki haldeki orantı katsayıları birbirinden farklıdır. Manyetik alınganlık kritik üssü üç boyutta Ising model için teorik olarak 1,25 'dür. Dış manyetik alanın yokluğunda özısı C, kritik sıcaklıkta singüler bir davranış göstermektedir. Bu durum  $\alpha$  ve  $\alpha'$  kritik üsleri ile karakterize edilmektedir.

$$C(0,T) \propto \varepsilon^{-\alpha} \quad \varepsilon \rightarrow 0^+ \quad (2.16)$$

$$C(0,T) \propto \varepsilon^{-\alpha'} \quad \varepsilon \rightarrow 0^- \quad (2.17)$$

Burada  $b^\pm$  bir düzeltme terimidir. Özısı kritik üsleri  $\alpha$  ve  $\alpha'$  birbirine eşittir. Bu kritik üs değeri üç boyutta  $\alpha = \alpha' = 0.12$  dir. Buraya kadar verilmiş olan tanımlarda singüler davranışın kritik sıcaklığa aşağıdan veya yukarıdan yaklaşılsa da aynı tipte olduğu kabul edilmektedir.

#### 2.4. Binder Oranı

$\langle M^2 \rangle$  veya  $\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 = kT\chi / L^2$  dalgalanma ifadelerine göre daha hızlı sıfıra giden aşağıdaki ifade Binder tarafından sunulmuştur.

$$g_L = 1 - \langle M^4 \rangle / (3 \langle M^2 \rangle^2) \quad (2.18)$$

Bu ifade dördüncü dereceden Binder oranı olarak adlandırılır. Kritiğin altında, sonsuz boyutlu örgüler için,

$$\langle M^2 \rangle \rightarrow M^2, \langle M^4 \rangle \rightarrow M^4, \langle M^4 \rangle \approx \langle M^2 \rangle^2 \quad (2.19)$$

yazılabildiğinden  $g_L$ ,  $2/3$  evrensel değerine yaklaşır.  $T > T_C$  için  $\langle M^4 \rangle \rightarrow 3 \langle M^2 \rangle$  gittiğinden  $g_L$  sıfıra gitmektedir. Binder oranı,  $g_L$ , kritik sıcaklığın tespitinde kullanılan önemli bir fonksiyondur. Farklı örgüler için  $g_L$  'nin  $kT/J$  'e karşı grafiği çizildiğinde eğriler bir noktada kesişmektedir. Bu kesim noktasına karşılık gelen sıcaklık değeri sonsuz örgü  $T_C$  kritik sıcaklığını vermektedir.

## 2.5. Sonlu Örgü Ölçekleme Teorisi

Adından da anlaşılacağı gibi ölçekleme teorisi uzunluk ölçeğinin değişimine bağlı olarak farklı niceliklerde oluşan değişimle ilgilidir. Boyutlu bir niceliğin değeri, standart değiştiğinde değeri değişecek şekilde, standart bir birim uzunluğa bağlı olarak ifade edilebilir. Bu yüzden boyutsuz bir nicelik, boyutlu nicelikler boyuta bağlı olarak değiştiğinden, değişmez olacaktır. Termodinamik fonksiyonlarla ilgili önemli ölçekleme kanunları, sistemin kritik nokta yakınlarında olması ve  $\xi$  korelasyon uzunluğunun bütün diğer uzunlukların ona bağlı olarak ölçülebildiği sistemin karakteristik bir uzunluğu olması gibi kabullerden çıkarılabilmektedir[22].

## 2.6. Boyut Analizi

Ölçekleme hipotezini oluşturmanın bir yolu, boyut niceliğinin kritik civarında  $\xi^{-d}$  ile orantılı olduğunu kabul etmektedir. Bu durumda termodinamik niceliklerin boyutları, karakteristik uzunluk  $\xi$ ' na bağlı olarak tanımlanabilmektedir.  $F/kT$  boyutsuz serbest olmak üzere  $f = F/kTV$  (uzunluk) $^{-d}$  boyutundadır.

$$[f] = L^{-d} \quad (2.20)$$

Kritik noktada korelasyon fonksiyonunun tanımından, onun boyutu aşağıdaki şekilde verilmektedir.

$$[g(x)] = L^{2-d-\eta} \quad (2.21)$$

Tanım gereği korelasyon fonksiyonu  $\langle M(0) \rangle^2$  ile aynı boyuta sahiptir. Buna bağlı olarak kendiliğinden manyetizasyonun boyutu,

$$[M/V] = L^{(2-d-\eta)/2} \quad (2.22)$$

olarak tanımlanmaktadır. Dalgalanma-dağılıma teoreminden manyetik alınganlığın aşağıda şekilde verilmektedir.

$$[kT\chi] = L^{2-d} \quad (2.23)$$

Diğer taraftan dış alanın boyutu  $M = -\frac{\partial F}{\partial H}$  ifadesinden;

$$[H/kT] = [f] / [M/V] \quad (2.24)$$

veya

$$[H/kT] = L^{(2+d-\eta)/2}$$

şeklinde elde edilmektedir. Eğer bu ifadelerde L uzunluğu  $\xi$  korelasyon uzunluğu ile değiştirilip, korelasyon uzunluğu için  $\xi \approx \varepsilon^{-\nu}$  bağıntısı kullanılacak olursa bütün kritik üsleri tanımlamak mümkündür.  $f \approx \xi \approx \varepsilon^{\nu d}$  olmak üzere özısı'nın kritik nokta civarındaki davranışı aşağıdaki gibi belirlenir.

$$\begin{aligned} C &= -T \\ C &\approx \varepsilon^{\nu d - 2} \end{aligned} \quad (2.25)$$

Özısı kritik üssü  $\alpha$  ve diğer kritik üsler için sırasıyla; Josephson, Fisher, Rushbrooke ve Widom kanunları elde edilir.

$$\alpha = 2 - \nu d \quad (2.26)$$

$$\gamma = v(2 - \eta) \quad (2.27)$$

$$\beta = -v(2 - d - \eta)/2 \quad (2.28)$$

$$\delta\beta = v(2 + d - \eta)/2 \quad (2.29)$$

## 2.7. Termodinamik Nicelikler İçin Sonlu Örgü Ölçekleme Bağlıları

Sonsuz örgü için termodinamik niceliklerin davranışı sonlu örgülerde yapılan hesaplamalar kullanılarak sonlu örgü ölçekleme teorisi yardımı ile belirlenmektedir. Ölçekleme teorisi, daha öncede verildiği gibi, korelasyon uzunluğunun  $\varepsilon = 0$  komşuluğundaki bir sistem için tek karakteristik uzunluk olduğunu kabul etmektedir. Korelasyon uzunluğu deneysel olarak  $\varepsilon = 0$ 'da yani kritik noktada ıraksar. Bu sonuç, sistemin  $\varepsilon = 0$ 'da karakteristik bir uzunluğa sahip olmadığını ve korelasyon uzunluğunun ölçekleme dönüşümü altında değişmez olduğunu gösterir. Diğer taraftan, eğer sistemin bir kısmı orijinal sistem kadar büyüklüğünde orijinal sistem ve büyütülmüş sistem arasında bir fark görülüyorsa, bu durumda sistem ölçek dönüşümü altında değişmezdir. Daha kesin olarak, termodinamik fonksiyonların,  $\varepsilon = 0$ 'da korelasyon fonksiyonuna benzer olarak, homojen fonksiyonlar oldukları "ölçek-değişmez" bir sistem tanımlamak mümkündür[21].

Korelasyon fonksiyonu  $\varepsilon = 0$ 'da

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

şeklinde davranır.  $P = d - 2 + \eta$   $g(x)$ 'in boyutundadır. Birim uzunluk bir  $b$  faktörü ile attığında koordinat  $x \rightarrow x' = x/b$  şeklinde dönüşür. Bu koordinat dönüşümü altında korelasyon fonksiyonu homojenlik kuralına göre aşağıdaki gibi yazılır.

$$g(x/p) = b^p g(x) \quad (2.30)$$

Bu kurala göre homojen bir fonksiyon aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$f(x')=b^{Df}f(x) \quad x'=b^{Df}x \quad (2.31)$$

Hacim başına serbest enerji olan  $f = F/kTV$  d-boyutunda olup “ölçek –değişmez” homojen bir fonksiyonla tanımlanır.  $h = H / kT$  olmak üzere

$$F(h', \varepsilon') = b^{df}(h, \varepsilon) \quad (2.32)$$

$$F(h, \varepsilon) = b^{-d}f(b^{Dh}h, b^{D\varepsilon}\varepsilon) \quad (2.33)$$

şeklinindedir. Serbest enerjinin d-boyutunda olduğu düşünülürse üstteki ifadenin sağ tarafındaki fonksiyon boyutsuz olmalıdır.  $\xi \approx \varepsilon^{-\nu}$  ifadesi kullanıldığında  $D\varepsilon = 1/\nu$ , h için ise  $D_k = \delta\beta/\nu$  sonucu elde edilir. Üç boyutlu ( $L \times L \times L$ ) basit kübik örgü için  $b=L$  olarak sonlu örgü ölçekleme teorisi için serbest enerji fonksiyonu aşağıdaki gibi elde edilir.

$$f(h, \varepsilon) = L^{(\alpha-2)/\nu} \int (L^{\delta\beta/\nu} h, L^{1/\nu} \varepsilon) \quad (2.34)$$

Bu ifadedeki indirgenmiş sıcaklık aşağıdaki ifade ile verilmektedir.

$$\varepsilon = \frac{T - T_c(\infty)}{T_c(\infty)} \quad (2.35)$$

Diğer taraftan sonlu ve sonsuz örgü kritik sıcaklıkları arasındaki fark,

$$\Delta\varepsilon = \frac{T_c(\infty) - T_c(L)}{T_c(\infty)} \propto a L^{-1/\nu} \quad (2.36)$$

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.



Örneğin kendiliğinden mıknatıslanma için sonlu örgü ölçekleme bağıntısı

$$M = -\frac{\partial f}{\partial h} \quad (2.37)$$

$$= -\left(\frac{\partial}{\partial h}\right)L^{-d} f(L^{\delta\beta/v} h, L^{1/v} \varepsilon) \quad (2.38)$$

$$= -L^{-d} L^{\delta\beta/v} f' \quad (2.39)$$

şeklinde oluşturulabilir.  $X^0 = -f'$  tanımı ve Widom'un  $\delta\beta = v(2+d-\eta)/2$  bağıntısı kullanılarak kendiliğinden mıknatıslanma için sonlu örgü ölçekleme bağıntısı elde edilir.

$$M(h, \varepsilon) = L^{-\beta/v} X^0(L^{\delta\beta/v} h, L^{1/v} \varepsilon) \quad (2.40)$$

Manyetik alınganlık ve özısı için sonlu örgü ölçekleme bağıntıları benzer biçimde

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial h} \quad (2.41)$$

$$\chi = \left(\frac{\partial}{\partial h}\right)L^{-\beta/v} X^0(L^{\delta\beta/v} h, L^{1/v} \varepsilon) \quad (2.42)$$

$\gamma = \beta(\delta-1)$  (ölçekleme kuralı) yerine yazılırsa manyetik alınganlık için ölçekleme bağıntısı bulunmuş olur.

$$kT\chi = L^{\gamma/v} Y^0(L^{1/v} \varepsilon, L^{\beta\delta/v} h) \quad (2.43)$$

Ayrıca özısı için ölçekleme bağıntısı aşağıda şekilde verilmiştir.

$$C = L^{\alpha/v} Z^0(L^{1/v} \varepsilon, L^{\beta\delta/v} h) \quad (2.44)$$

Statik kritik üsleri bu bağıntılar yardımı ile elde etmek mümkündür. Burada  $\beta, \gamma, \alpha$  ve  $\nu$  sonsuz örgüde; mıknatıslanma, manyetik alınganlık, özısı ve korelasyon uzunluğu için statik kritik üslerdir.  $X^0, Y^0, Z^0$  şekil fonksiyonlarının  $h=0$  için  $x = L^{1/\nu} \varepsilon$  olmak üzere büyük  $x$  değerleri için  $Ax^w$  şeklinde değişmeleri beklenir. Burada  $A$  kritik genlik,  $w$  ise şekil fonksiyonunun ilgili olduğu termodinamik niceliğin kritik üssüdür. Sonlu örgü ölçekleme teorisinin sonucu olarak buraya kadar verilen bağıntılar, üç boyutta Ising modeller için termodinamik niceliklerin sonlu örgülerdeki davranışlarından sonsuz örgü davranışlarını belirleme imkânı vermektedir.

### 3. MODEL

#### 3.1. Cellular Automaton

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

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

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

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

Bir “ CA ” hali hücre değışkenlerinin değeri ile belirlenmektedir. “ CA ” kesikli zaman adımlarında gelişir ve gelişim esnasında bir hücre değışkeninin değeri bölgesel bir kural yardımıyla bir önceki zaman adımında ona komşu hücrelerdeki değışkenlerin değeriyle bağılı olarak oluşmaktadır. Bu bölgesel kural tüm hücrelere eş zamanlı olarak uygulanmaktadır.

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

CCA algoritması kullanılarak dış manyetik alan yokluğunda iki ve üç boyutlu Ising modelde yapılan hesaplamalar algoritmanın Ising modelin simülasyonunda oldukça başarılı olduğunu göstermiştir. Bu algoritmadan türetilen çeşitli algoritmalar dış alan, ikinci derece en yakın komşu etkileşim ve dört spin etkileşim terimleri içeren Ising model problemlerine uygulanmış ve literatürle uyumlu sonuçlar elde edilmiştir İki boyutlu Blume-Capel (BC) model için Creutz algoritmasından geliştirilen bir Cellular automaton algoritması ile modelin davranışı test edilmiş ve evrensel Ising model sınıfına dâhil olduğu görülmüştür. 2-boyutlu spin-1 Ising model için yapılan hesaplamalar algoritmanın ikinci derece faz geçişlerini taklit etmekteki başarısını tekrarlamıştır 3-boyutlu BC model için yapılan hesaplamalar algoritmanın, modelin sahip olduğu birinci derece faz geçişlerini, dolayısıyla da üçlü kritik noktayı tespit etmekte yetersiz kaldığını göstermiştir. Bu nedenle CCA’ ı temel alan yeni bir

algoritma olan “soğutma algoritması” türetilmiştir. 3-boyutlu Blume Emery Griffiths (BEG) model için yapılan hesaplamalarda bu algoritma kullanılmıştır.

Verilen bir toplam enerji değeri sistemin sıcaklığı aşağıdaki şekilde tanımlanan kinetik enerji ortalama değerlerinden elde edilir.

$$\langle E_i \rangle = \frac{\sum_{n=0}^3 n e^{-4n\beta}}{\sum_{n=0}^3 e^{-4n\beta}} \quad (3.1)$$

Termodinamik niceliklerin spin başına ve zaman adımı başına ortalama değerleri

$$M = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i, \quad Q = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i^2 \quad (3.2)$$

$$H_I = J \sum_{IJ} S_I S_J + h \sum_I S_I \quad (3.3)$$

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial h} = (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) / kT \quad (3.4)$$

$$C = \partial H_I / \partial T = N(\langle H_I^2 \rangle - \langle H_I \rangle^2) / (kT)^2 \quad (3.5)$$

ifadeler kullanılarak hesaplanmaktadır. Alınganlık ve öz ısı ise manyetizasyon ve iç enerjideki dalgalanmalardan elde edilmektedir.

## 3.2. Cellular Automaton Algoritmaları

### 3.2.1. Standart algoritma

Bu modelde örgünün her bir hücresinde üç değişken bulunmaktadır. Her bir

hücredeki değişkenlerin değerleri, kendi değişkenleri ve en-yakın komşuların değişkenlerinden bir cellular automaton kuralı ile belirlenir. Her bir hücreye atanan değişkenlerden ilki  $B_i$  Ising spinidir.  $B_i=0.1.2$  değerlerini alır.

$S_i=B_i-1$  olmak üzere en-yakın etkileşmeli BEG model için Ising spin enerjisi aşağıdaki ifade ile verilmiştir.

$$H_I = -J \sum_{ij} S_i S_j + H \sum_i S_i \quad (3.6)$$

Burada  $J$  bilinear etkileşim parametresi  $H$  dış manyetik alana karşılık gelmektedir. İkinci değişken spine eşlik eden momentum değişkenidir. Momentuma karşılık gelen kinetik enerji  $H_k$ ,  $(0,m)$  aralığında herhangi bir spin değişimi için Ising enerjideki değişime eşit olan tamsayı değerler almaktadır. Toplam enerji ise

$$H=H_I+H_K \quad (3.7)$$

olmak üzere tüm zaman adımlarında korunur. Üçüncü bit ise parite bittir. CA' nın zamanla dama tahtası üzerinde gelişimini sağlamakta, böylece Ising modelin " CA " ile simülasyonunu mümkün kılmaktadır. Değeri değiştirilecek hücrenin spini  $\frac{1}{2}$  olasılıkla diğer iki halden birine çevrilir ve Ising enerjisindeki değişim,  $dH_I$ , hesaplanır. İç enerjideki değişim bu hücrelerin momentum değişkenine aktarılabilir veya momentum değişkeninden alınabilecek bir değer ise ve toplam enerji korunuyorsa spin ters çevrilir. Buna uygun olarak momentum değiştirilir. Aksi halde spin ve momentum değiştirilmez. Bu işlem örgüdeki bütün siyah hücrelere aynı zaman adımı uygulanmaktadır.

### 3.2.2. Soğutma algoritması

Soğutma algoritması, başlangıç prosedürü ve ölçümlerin alınması olmak üzere iki temel bölümden oluşmaktadır. Başlangıç prosedüründe, ilk olarak örgü üzerindeki spinler modelin mutlak sıfırda sahip olduğu düzende alınır ve göz başına düşen

kinetik enerji, ikinci deęişken yoluyla, her spin dönmesi için gerekli Ising spin enerjisindeki maximum deęişime eşit alınır.

Bu konfigürasyon 20 000 CA (Cellular- Automaton) adımı için çalıştırılır. Bir sonraki adımda, düzensiz yapıdaki son konfigürasyon soęutma işlemi için başlangıç konfigürasyonu olarak alınır ve her toplam enerjiye karşılık gelen sonuç konfigürasyon bir sonraki için başlangıç teşkil eder. Soęutma işlemi boyunca enerji spin sisteminden ikinci deęişken (domen) yardımıyla alınır.

## 4.HESAPLAMA BULGULARI

### 4.1. Termodinamik Niceliklerin Sıcaklıkla Değişim

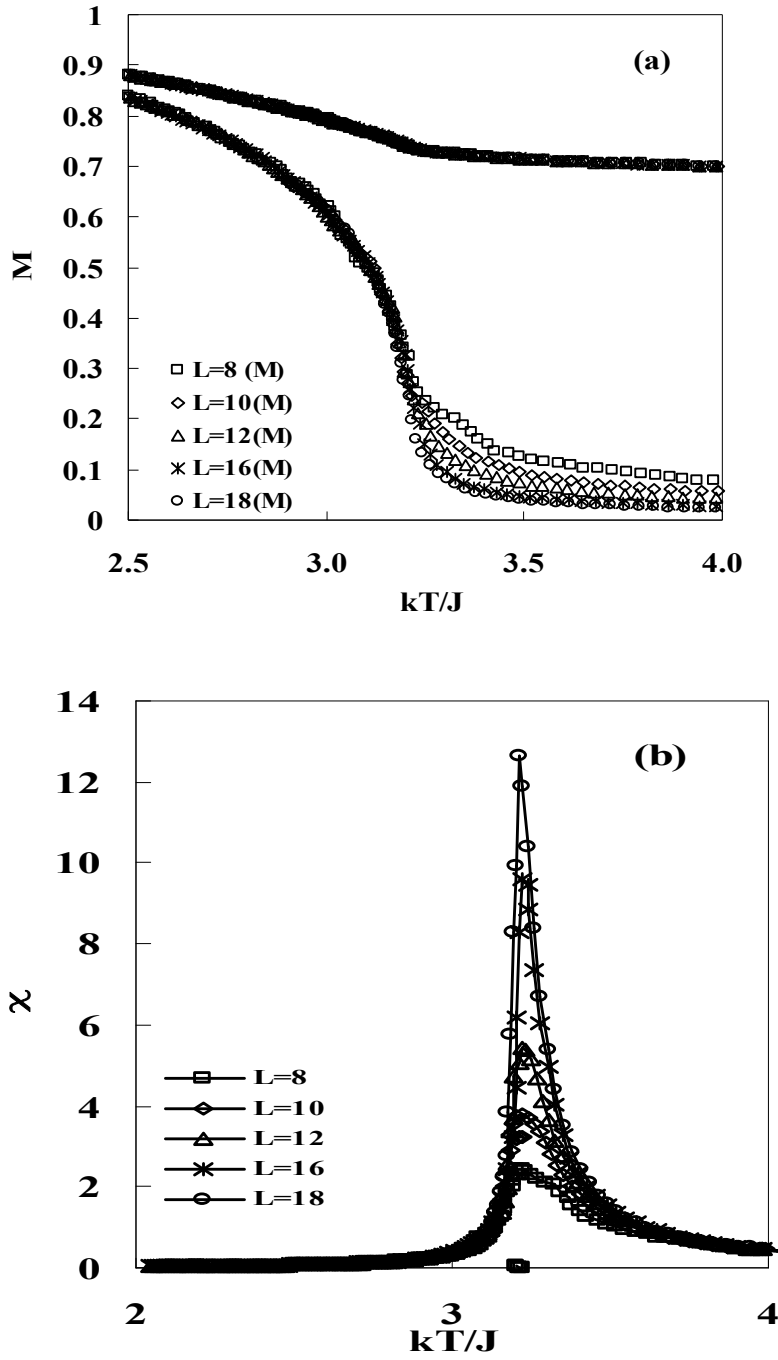
Bu çalışmada  $L= 8,10,12,16$ ve  $18$  kenar uzunluğuna sahip basit kübik örgülerde spin-1 Ising model için geliştirilen soğutma algoritması kullanılarak termodinamik niceliklerin sıcaklık ve dış manyetik alanla değişimleri spin başına ve  $1\ 000\ 000$  cellular autamatan zaman adımı üzerinden ortalamalar alınarak oluşturulmuştur

#### 4.1.1. Kendiliğinden manyetizasyon $M$ ve manyetik alınganlık $\chi$ niceliklerinin sıcaklıkla değişimi

Sonlu örgü için kendiliğinden mıknatıslanma  $M$ , quadropol moment  $Q$  ve manyetik alınganlık  $\chi$  'nin "Eş.2.38" . "Eş.2.41" ifadelerinden hesaplanan denge ortalama değerlerinin, knetik enerji ortalama değerlerinden belirlenen sıcaklık değerlerine karşı değişimleri Şekil4.1.a ve Şekil4.1.b'de verilmiştir.  $M, Q$  ve  $\chi$  'nin sıcaklıkla değişim eğrileri  $L= 8,10,12,16$  ve  $18$  örgüler için verilmektedir

Şekil 4.1.a da kendiliğinden mıknatıslanmanın farklı örgülerdeki sıcaklık değişimleri incelendiğinde kritik sıcaklık değerinden daha büyük sıcaklık için açık bir örgü etkisi görülmektedir. Bilindiği gibi sonsuz bir sistem için kendiliğinden mıknatıslanma kritik sıcaklık ve daha büyük sıcaklıklarda sıfır olmaktadır. Sonlu örgülerde yapılan hesaplamalardan belirli sıcaklık değerinden daha büyük sıcaklıklar için kendiliğinden mıknatıslanmanın örgü büyüdükçe sifira yaklaşma eğiliminde olduğu görülmektedir.  $Q$  quadropol moment ise bütün bütün örgüler için sıcaklık arttıkça  $1$  ' den daha düşük bir değerde  $(2/3)$  sabit kalmaktadır.  $Q$ 'nun  $2/3$  değerinde sabit kalması sistemin paramanyetik bir düzende olduğunu gösterir. Bu durumda sistemi oluşturan spinler  $1/3$  ihtimaliyetle  $+1, 0$  veya  $-1$  değerlerini almaktadır.





Şekil 4.1.a) Kendiliğinden mıknatıslanma  $M$  ve quadropol Moment  $Q$  nun  $kT/J$  'ye göre değişimi,b).Manyetik alınganlık  $\chi$  'in  $kT/J$  'ye göre değişimi

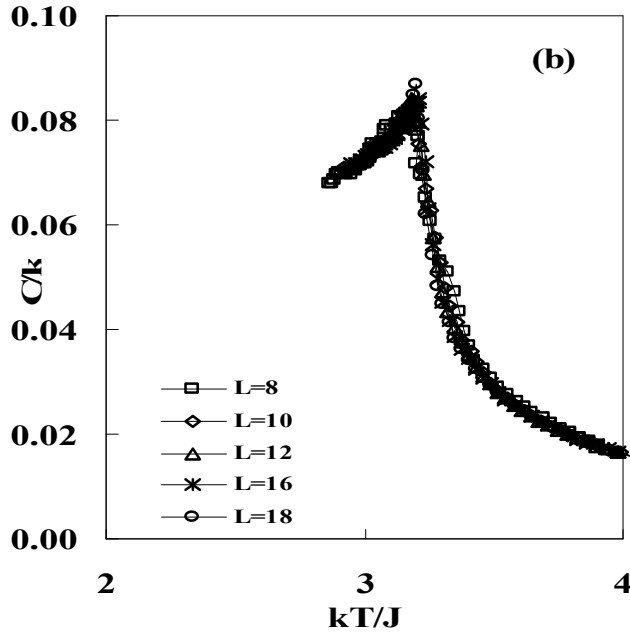
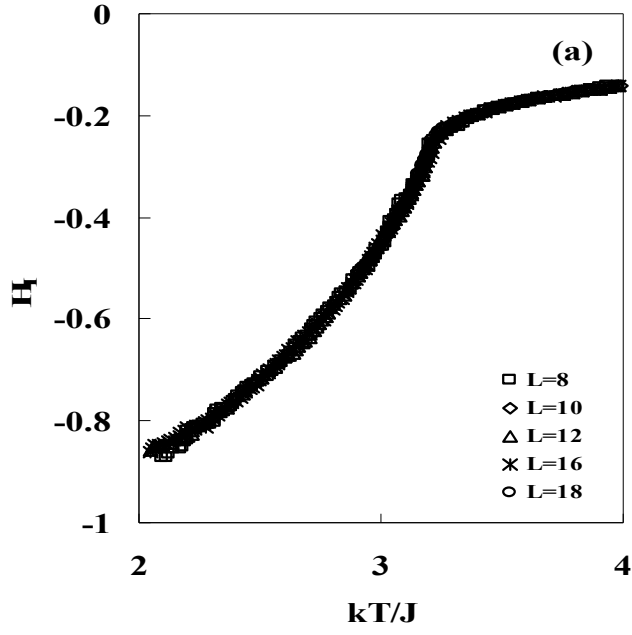
Diğer taraftan kendiliğinden mıknatıslanmanın dalgalanmalarından hesaplanan manyetik alınganlığın sıcaklık değişimi incelendiğinde, kendiliğinden mıknatıslanma için örgü etkisinin başladığı sıcaklıklarda manyetik alınganlığın bir maksimum verdiği görülmektedir(Şekil4.1.b). Manyetik alınganlık için örgü etkisi, örgü

büyüdükçe maksimumların sağa doğru kayması ve maksimumların büyümesi şeklinde ortaya çıkmaktadır. Bilindiği gibi manyetik alınganlığın maksimum olduğu sıcaklık değeri kritik sıcaklığa karşılık gelmektedir. Bu yüzden her örgünün kendi kritik sıcaklık değeri, manyetik alınganlığın maksimum verdiği sıcaklık değerinden tespit edilmiştir. Bu kritik sıcaklık değerlerinin sonsuza uzatma işlemi yapılarak ( $1/L^{1/\nu} \rightarrow 0$  için) manyetik alınganlık sonsuz örgü kritik sıcaklık değeri  $T_c(\infty) = 3,22$  olarak elde edilmiştir. Bu sonuç sonsuz örgü için verilen kritik sıcaklık değeriyle uyum içindedir.

#### 4.1.2. İç enerji $H_I$ ve özısı $C$ niceliklerinin sıcaklıkla değişimi

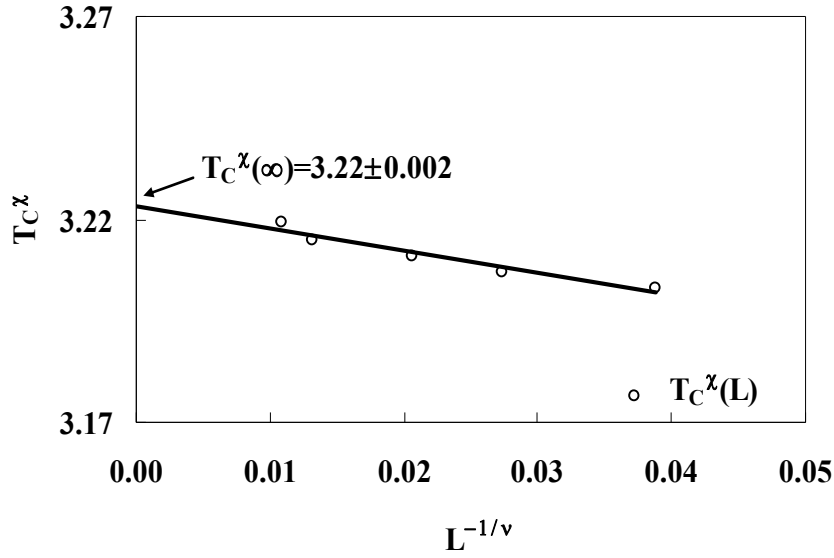
Şekil 4.2’de iç enerji ve özısının sıcaklığa karşı değişimleri görülmektedir. İç enerjinin ve özısının sıcaklıkla değişim eğrileri  $L= 8, 10, 12, 16$  ve  $18$  örgüleri için İç enerjinin sıcaklıkla değişiminde sadece kritik sıcaklık civarında bir örgü etkisi görülmektedir. Bu etki kritik sıcaklık civarında örgüye bağlı olarak iç enerji değerlerinin birbirinden sapması şeklinde ortaya çıkmaktadır. Bu sapma daha küçük örgülerde kendini göstermektedir. Ancak iç enerji için ortaya çıkan örgü etkisi kendiliğinden mıknatıslanmadaki örgü etkisine göre beklenen davranıştan daha az bir sapmaya neden olmaktadır.

İç enerji dalgalanmalarından hesaplanan özısı denge ortalama değerlerinin sıcaklıkla değişimi her örgü için belirli sıcaklıklarda bir maksimum vermektedir. Kritik sıcaklıkta özısı singüler bir yapıya sahip olduğundan, her örgü için özısının maksimum verdiği sıcaklık değeri o örgünün kendi kritik sıcaklığına karşılık gelmektedir.



Şekil 4.2.a) İç enerjinin  $kT/J$  'ye değişimi. b) özısının  $kT/J$  'ye göre değişimi.

#### 4.2.Sonsuz Örgü Kritik Sıcaklığının Tesbiti



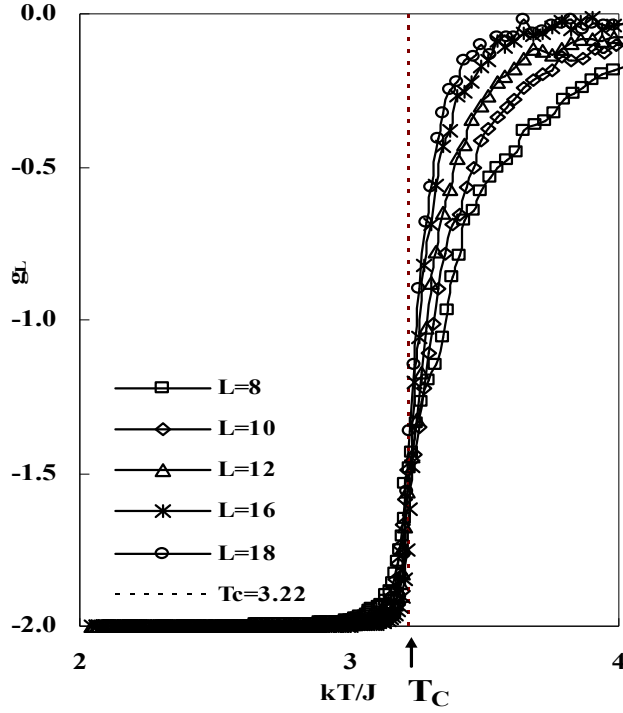
Şekil 4.3. Sonsuz Örgü Kritik Sıcaklığının Belirlenmesi

Sonsuz örgü kritik sıcaklık değerini ( $T_C(\infty)$ ) her bir sonlu örgü için kritik sıcaklık değeri ( $T_C(L)$ ) bilindiğinde aşağıdaki ifadeyi kullanarak elde etmek mümkündür.

$$T_C(L) = T_C(\infty) + aL^{-1/\nu} \quad (4.1)$$

Bu çalışmada her bir örgü için kritik sıcaklık değerleri manyetik alınganlığın pik verdiği sıcaklık değerinden tespit edilmiştir. Elde edilen bu sıcaklık değerleri yukarıdaki ifadeye uygun olarak  $1/L^{1/\nu}$ 'ye göre grafiğinin  $1/L^{1/\nu} \rightarrow 0$  için sıcaklık eksenini kestiği noktadan sonsuz örgü kritik sıcaklık değeri  $T_C(\infty) = 3,22 \pm 0,002$  olarak elde edilmiştir.

### 4.3. Binder Parametresi İle Kritik Sıcaklığın Tayini

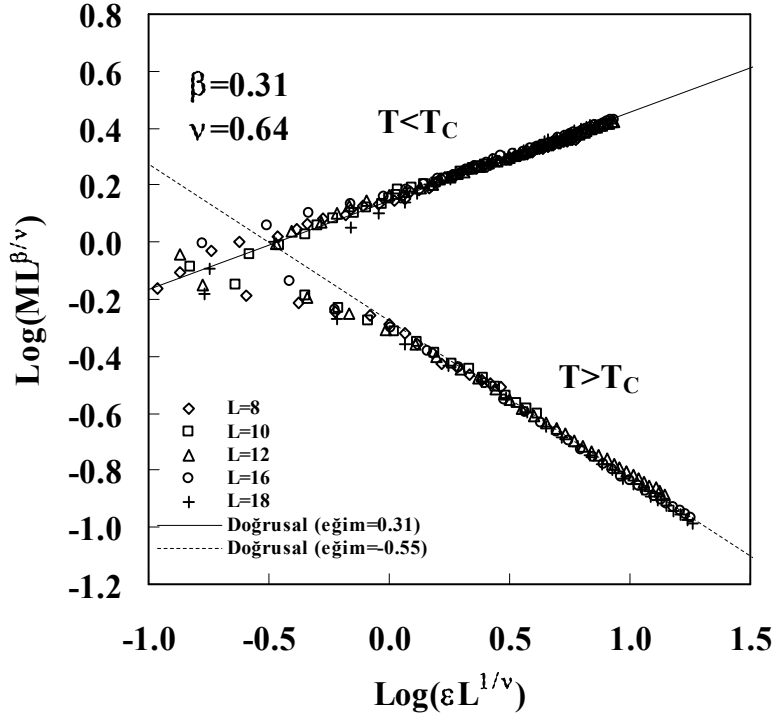


Şekil 4.4.  $g_L$  'nin  $kT/J$  'ye bağlı değişimi

Sonsuz örgü kritik sıcaklık değerini elde etmenin bir başka yolu da Binder oranı  $g_L$  'nin sonlu örgüler için sıcaklık değişim eğrilerini oluşturmaktır. Sonlu örgüler için Binder oranının sıcaklıkla değişim eğrilerinin kesişim noktası sonsuz örgü kritik sıcaklığına karşılık gelmektedir. Sonlu örgüler için Binder oranı  $g_L$  'nin hesaplanan değerlerinin sıcaklığa karşı değişimleri incelendiğinde eğrilerin bir noktada kesiştiği görülmektedir ve bu kesim noktasına karşılık gelen sıcaklık değeri  $T_C$  sonsuz örgü kritik sıcaklık değerini vermektedir. Şekil 4.4. incelendiğinde  $T_C = 3,22$  değerinde sonlu örgü Binder oranlarının değişim eğrilerinin kesiştiği görülmektedir. Bu sıcaklık değerleri sonsuz örgü kritik sıcaklık değerine karşılık gelmektedir. Binder oranı kullanılarak tespit edilen  $T_C = 3,22$  değeri manyetik alınganlık pik değerlerinden elde edilen sonsuz örgü kritik sıcaklık değeri ile tam bir uyum içersindedir.

#### 4.4. $\alpha, \beta$ ve $\gamma$ Statik Kritik Üslerin Hesabı

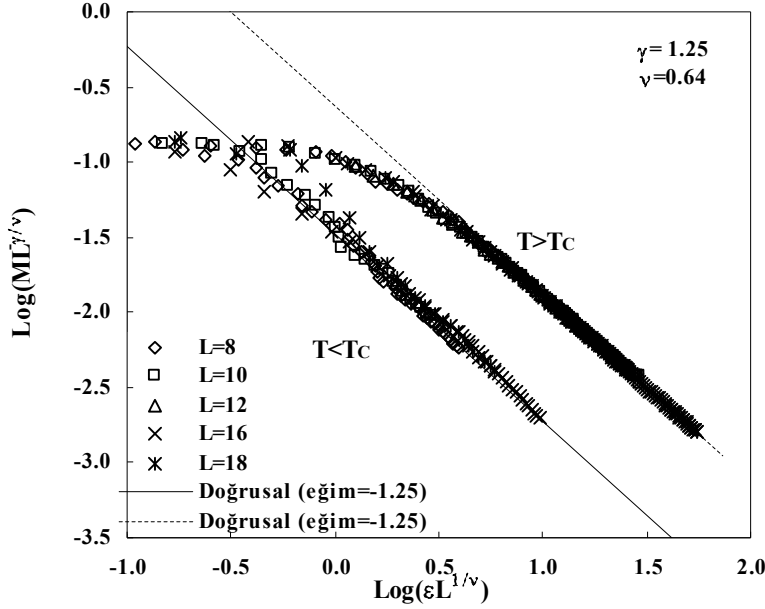
##### 4.4.1. Kendiliğinden manyetizasyon kritik üssü $\beta$



Şekil 4.5.  $T < T_C$  ve  $T > T_C$  için  $\text{Log}(ML^{\beta/\nu})$ 'nin  $\text{Log}(L^{1/\nu}\epsilon)$  'na karşı değişimi

Kendiliğinden manyetizasyon kritik üsleri  $\beta(T < T_C)$  ve  $\beta'(T > T_C)$  'nü Eş2.40 de verilen sonlu örgü ölçekleme bağıntısını kullanarak tespit etmek mümkündür. Bu bağıntıda görünen kritik üsler yerine sonsuz örgü için verilen değerler alınarak  $ML^{\beta/\nu}$  'nin  $\epsilon L^{1/\nu}$  'a karşı log-log grafiği çizildiğinde  $x = L^{1/\nu}\epsilon$  'nin büyük değerleri için verilerin tek bir doğruya uyması ve bu doğrunun eğiminin ilgili kritik üsleri vermesi beklenmektedir. Şekil 4.5'e  $T < T_C$  ve  $T > T_C$  için  $\text{log}(ML^{\beta/\nu})$  nin  $\text{log}(L^{1/\nu}\epsilon)$  'na karşı değişimleri verilmektedir. Bu grafikte her iki sıcaklık bölgesi için  $x = L^{1/\nu}\epsilon$  'nin büyük değerleri için tüm veriler tek bir doğruya uymakta ve bu doğruların eğimleri  $T < T_C$  için ve  $T > T_C$  için  $\beta = 0,31$  ve  $\beta' = 0,55$  değerlerini vermektedir.

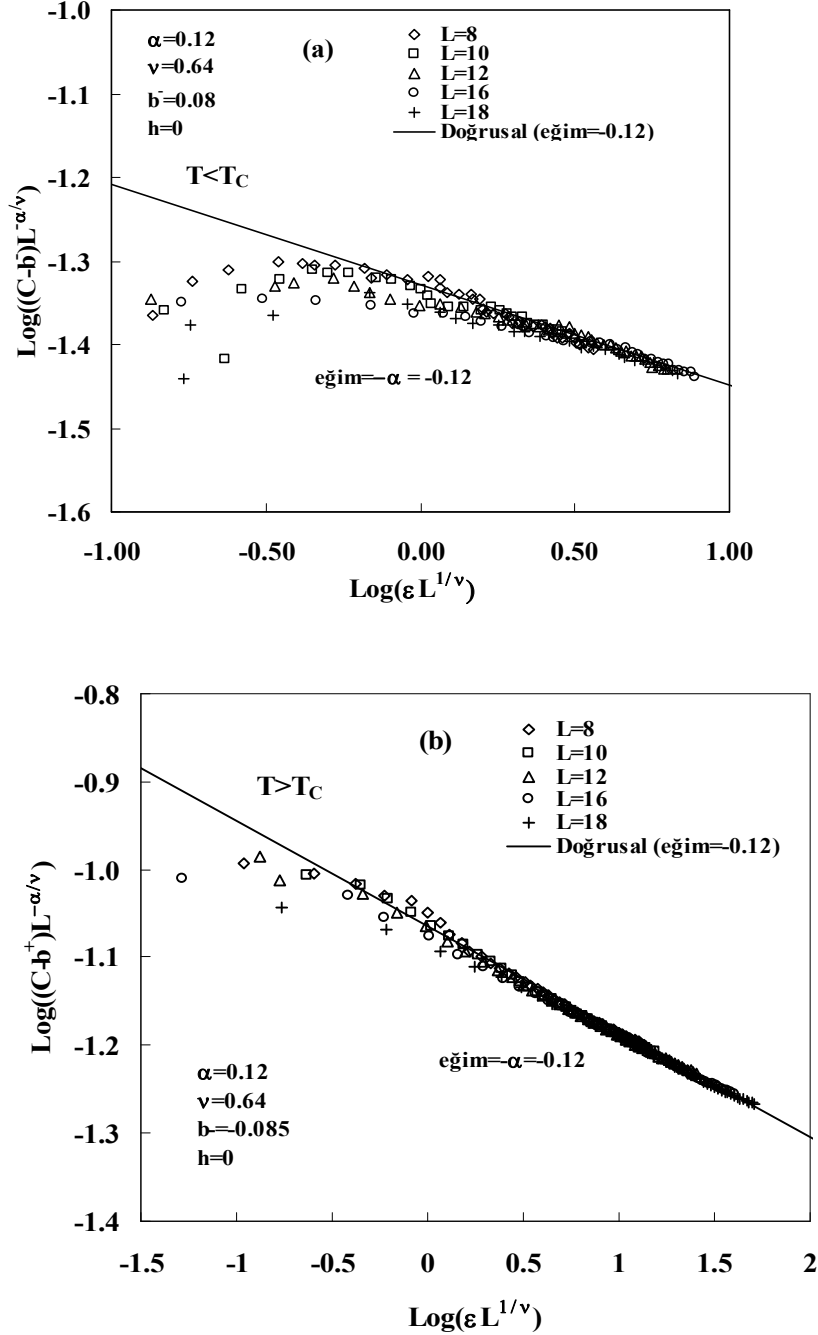
#### 4.4.2. Manyetik alınganlık kritik üssü $\gamma$



Şekil 4.6. Manyetik alınganlık için sonlu ölçekleme grafiği

Manyetik alınganlık kritik üsleri  $\gamma(T < T_c)$  ve  $\gamma'(T > T_c)$  'nü "Eş.2.41" de verilen sonlu ölçekleme bağıntısını kullanarak tespit etmek mümkündür. Bu bağıntıda görünen kritik üsler yerine sonsuz örgü için verilen değerler alınarak  $kT\chi L^{-\gamma/\nu}$  'nün  $L^{1/\nu}\epsilon$  'e karşı log-log grafiği çizildiğinde, verilerin tek bir doğruya uyması ve bu doğrunun eğiminin ilgili kritik üsleri vermesi beklenmektedir. Şekil 4.6'de  $T < T_c$  ve  $T > T_c$  için  $\log(kT\chi L^{-\gamma/\nu})$  'nin  $\log(L^{1/\nu})$  'na karşı değişimleri verilmektedir. Grafikten de görüleceği gibi her iki farklı sıcaklık bölgesi için hesaplanan  $x = L^{1/\nu}\epsilon$  'in büyük değerleri üst üste binmekte ve tek bir doğruya uymaktadır. Bu doğruların eğimlerinden  $T < T_c$  ve  $T > T_c$  için  $\gamma = \gamma' = 1,25$  olarak elde edilmiştir.

#### 4.4.3. Özısı kritik üssü $\alpha$



Şekil 4.7.a) Özısı için sonlu örgü ölçekleme grafiği  $T < T_C$ . b) Özısı için sonlu örgü ölçekleme grafiği  $T > T_C$

Özısı kritik üssü  $\alpha$ 'nın belirlenmesinde, öncelikle özısının kritik sıcaklık civarındaki davranışına karşılık gelen "Eş.2.14." ifadesindeki  $b$  düzeltme teriminin belirlenmesi gerekmektedir. Düzeltme terimi  $b$ 'yi belirlemenin bir yolu denklem "Eş.4.1." de

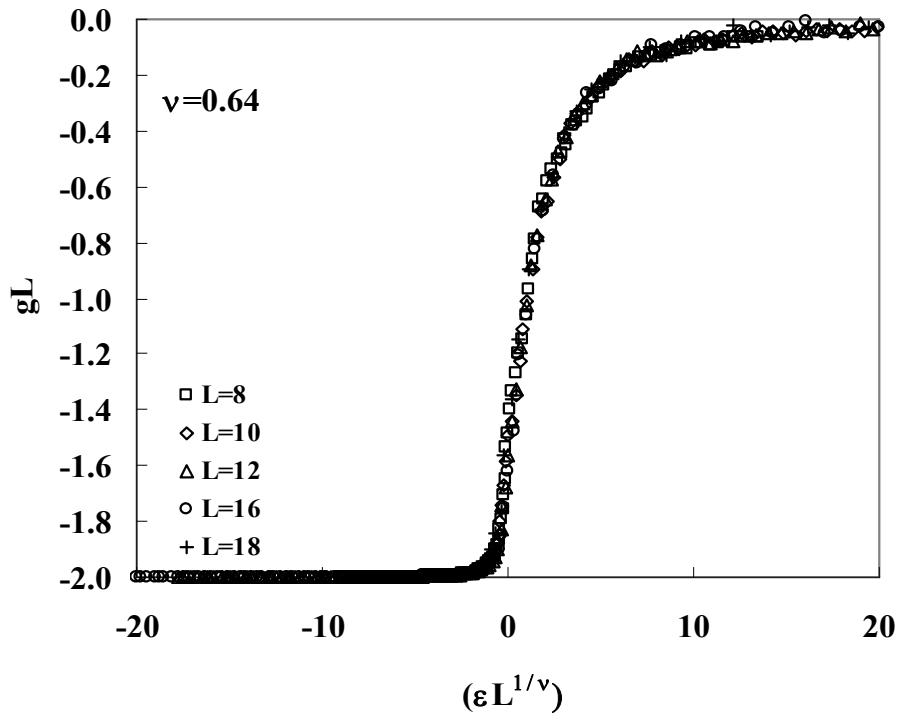


verilen sonlu örgü ölçekleme bağıntısının  $b^\pm$  'ye bağlı değişimini incelemektedir. Özısı için sonlu örgü ölçekleme bağıntısı

$$(C - b^\pm) = L^{\alpha/\nu} Z^0(L^{1/\nu}) \quad (4.2)$$

şeklinde verilmektedir. Bu bağıntıda  $\alpha = 0.12$  alınarak  $\log((C - b^\pm)L^{-\alpha/\nu})$ 'nın  $\log(L^{1/\nu} \varepsilon)$ 'na karşı değişiminde  $b^\pm$  'nin kademeli olarak değişen değerleri için data uyumuna bakılarak  $b^\pm$  düzeltme terimi tesbit edilmiştir. Sonuçta grafiğin eğimi bize  $\alpha$  kritik üssünü vermektedir. Farklı sonlu örgüler için verilerin uyduğu doğrunun eğimi  $\alpha$  kritik üssünü vermektedir.

#### 4.4.4. Binder parametresinden $\nu$ ' nün tayini



Şekil 4.8.  $g_L$  'nin Ölçekleme grafiği

Binder parametresi  $g_L$  'nin sonlu örgü ölçekleme ifadesi

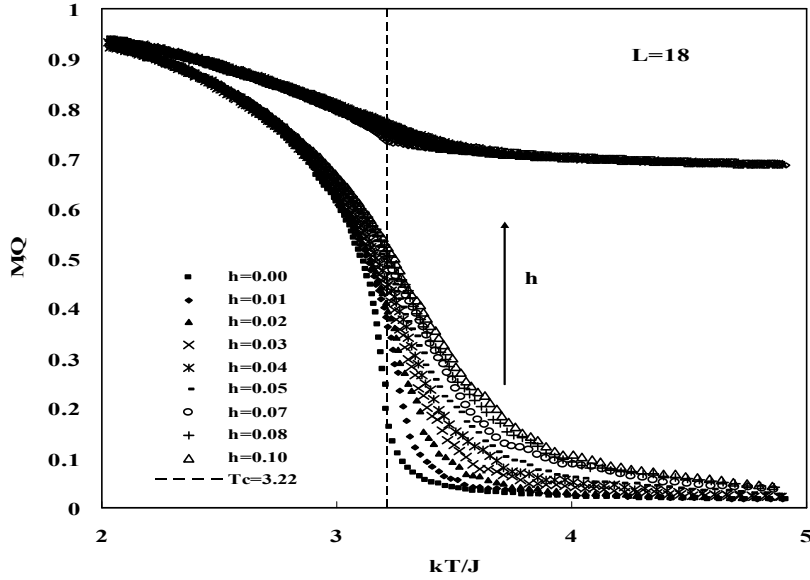
$$g_L = G(\varepsilon L^{1/\nu}) \quad (4.3)$$

ile verilmektedir  $g_L$  'nin ölçeklemesi ile  $\nu$  kritik üssü elde etmek mümkündür. Binder oranının farklı büyüklükteki örgülere ait verilerinin uygun  $\nu$  değerinde kritik sıcaklık civarında üst üste binmesi beklenmektedir. Bu grafikte büyük  $x$  değerleri için bir doğru üzerinde toplanmaktadır. Şekil 4.8'de  $g_L$  nin ölçekleme grafiği görülmektedir. Bu grafikte kritik sıcaklık civarında eğrilerin  $\nu = 0,64$  değeri için üst üste bindiği görülmektedir. Bu durum açıkça korelasyon uzunluğu kritik üssü  $\nu$  'nün beklendiği gibi 0,64 olduğunu göstermektedir.

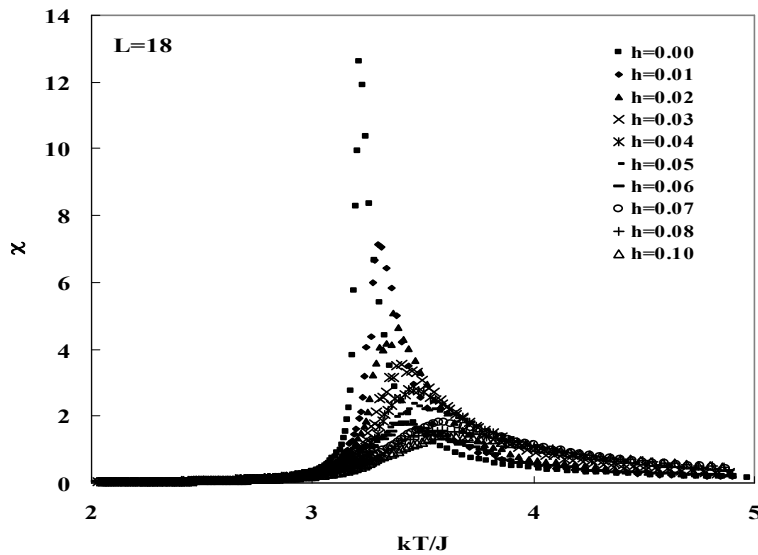
#### 4.5. Dış Manyetik Alanda Termodinamik Niceliklerin Sıcaklıkla Değişimi

Kendiliğinden mıknatıslanma mutlak sıfırda en büyük değerini alırken sıcaklık arttıkça sürekli bir şekilde azalarak kritik sıcaklıkta sıfır olur. Kritik sıcaklığın üstünde spinler gelişi güzel bir yönelime sahiptir. Dolayısıyla net bir manyetik alan meydana getirmezler. Bu halde sistem düzensiz durumdadır. Kritik sıcaklığın altında ise spinler belirli bir yönelime sahiptirler, Sistem belirli bir düzen gösterir. Dolayısıyla kritik sıcaklığın altında ferromanyetik olan bir metal bu sıcaklığın üstünde artık ferromanyetik değildir. Bu faz geçişi ikinci derece faz geçişidir. Gerçek ferromanyetler domain denilen yerel manyetizasyonu doyum momentine eşit olan küçük bölgelerden oluşur. Farklı bölgelerdeki domainlerin manyetizasyonu paralel olmak zorunda değildir. Kuvvetli bir manyetik alan içine yerleştirilmiş bir ferromanyette domainler manyetik alan yönüne yönelirler. Bu durumda iken ferromanyet ısıtıldığında  $h=0$  olduğu durumdaki gibi bir değişimin olmadığı görülmektedir. Alan artıkça faz geçişi ortadan kaybolacaktır.

#### 4.5.1. Küçük bir dış alanda kendiliğinden manyetizasyon $M$ ve manyetik alınganlık $\chi$ niceliklerinin sıcaklıkla değişimi



Şekil 4.9. Kendiliğinden mıknatıslanma  $M$  ve quadropol moment  $Q$  'nun  $kT/J$  'ye göre değişimi



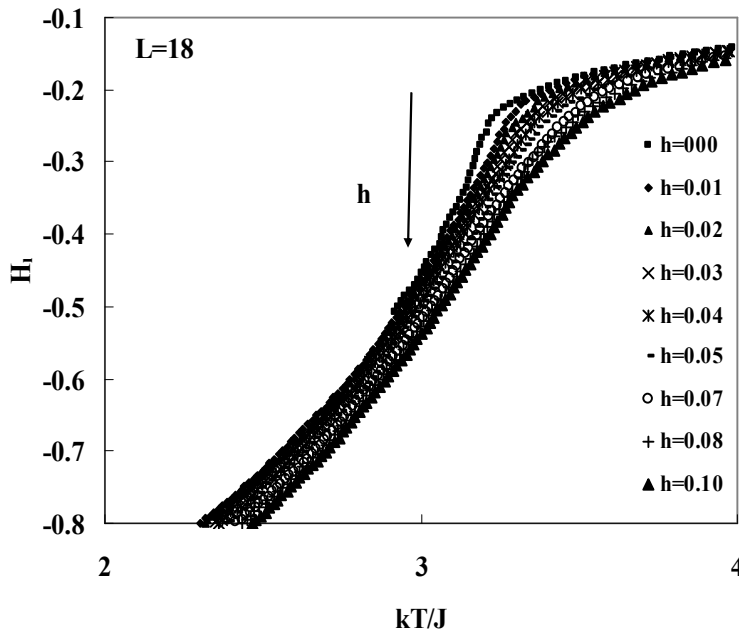
Şekil 4.10. Manyetik alınganlık  $\chi$  'nin  $kT/J$  'ye göre değişimi

Şekil 4.9'a bakıldığında dış alan attıkça kendiliğinden manyetizasyonun kritik sıcaklığın üzerindeki sıcaklıklar için sıfırdan uzaklaştığı, faz geçişinin ortadan

kaybolma eğiliminde olduğunu görülmektedir. Sonuç olarak alan değeri sonsuza giderken sistemdeki bütün spinlerin alan doğrultusuna yöneleceği açıktır.

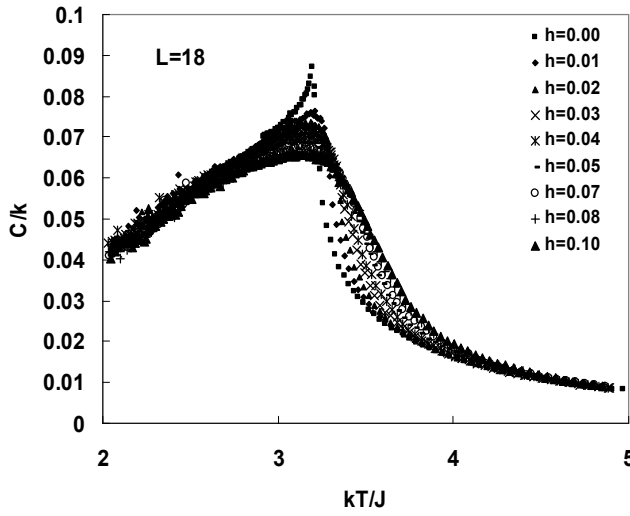
Diğer taraftan, manyetik alınganlıkta da  $h$  arttıkça alınganlığın pik yüksekliklerinin azalma eğiliminde olduğu keskin piklerin yumuşadığı görülmektedir(Şekil4.10). Bu durum faz geçişinin artan alanla ortadan kalktığını işaret etmektedir.

#### 4.5.2. Küçük bir dış alanda iç enerji ve özısı niceliklerinin sıcaklığa bağlı değişimi



Şekil 4.11. İç enerjinin  $kT/J$  ye göre değişimi

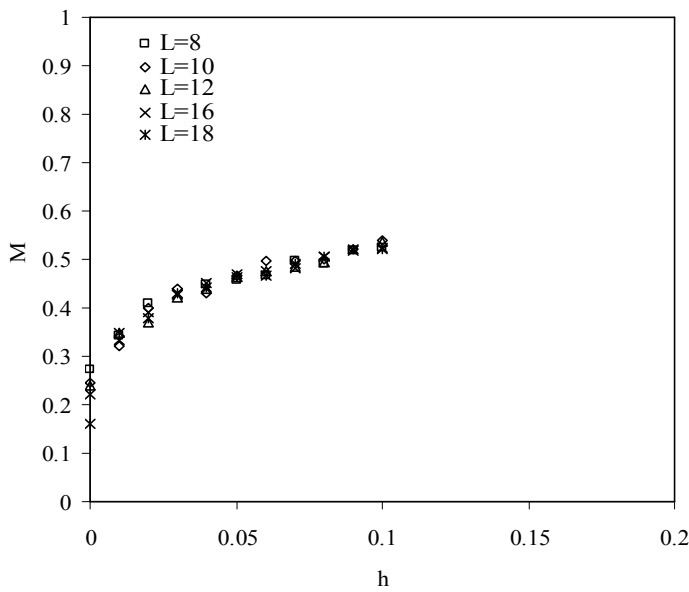
Bu değişimlerden,  $h=0$  durumunda çizilen grafikten farklı olarak özısının sıcaklıkla değişiminde dış alan  $h$ 'nin değeri arttıkça faz geçiş noktasını bakarak görmekteyiz(Şekil4.11). Yani dış alan arttıkça faz geçişi ortadan kalkmakta baskılanmaktadır. Pik oluşumunun yumuşadığını görmekteyiz. Dış alanın artması faz geçişini yok etmekte, baskılamaktadır.



Şekil 4.12. özısının  $kT/J$  göre değişimi

Şekil 4.12’de  $L=18$  kenar uzunluğuna sahip basit kübik örgü için özısının sıcaklıkla değişim eğrileri farklı alan değerleri için verilmektedir. İç enerjinin sıcaklıkla değişiminde de alan arttıkça özısının davranışına paralel olarak faz geçiş noktasındaki değişim belirsizleşmektedir(Şekil4.11).

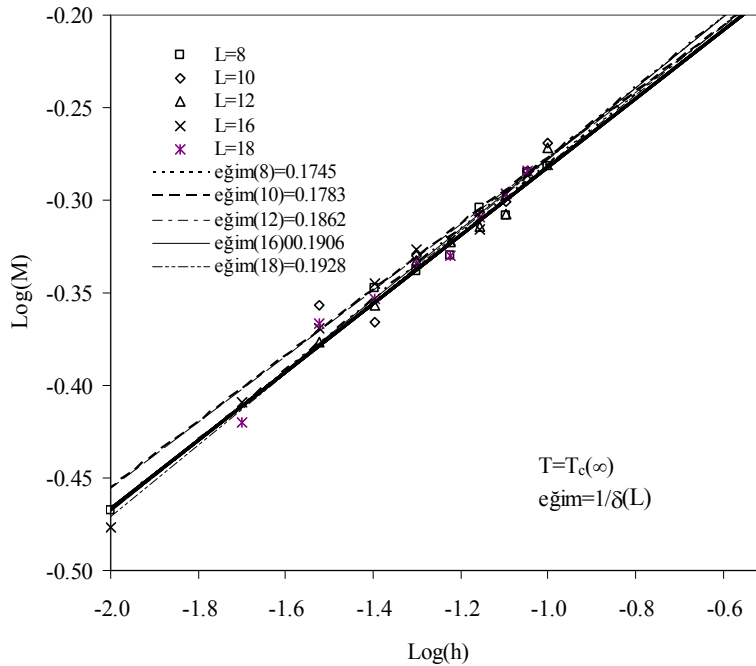
#### 4.6. Alan Kritik Üssü Deltanın ( $\delta$ ) Hesabı



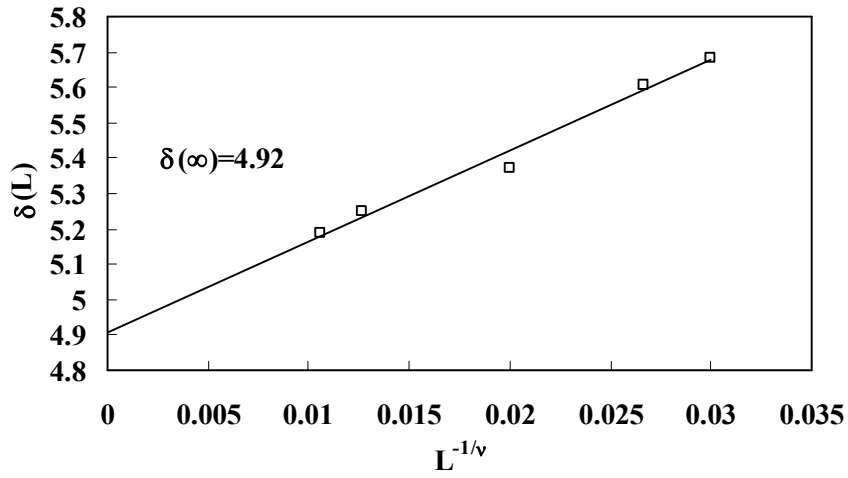
Şekil 4.13. Kendiliğinden Mıknatıslanmanın ( $M$ ) nin dış alan ( $h$ )’a karşı grafiği

Şekil 4.12’de  $\varepsilon = 0$ ’da yani  $T = T_c(\infty)$ ’da düzen parametresinin dış alana bağlı değerinin doyum alan değeri ( $T = T_c$ ) de verilmekte ve sabit bir değere gitmektedir. Şekil4.12 incelendiğinde  $h$ ’nın büyük değerlerine gidilirken bütün örgüler için  $M$  değerinin bir doyum noktasına gittiği ve örgü etkisinin ortadan kaldırdığı görülmektedir. Diğer taraftan  $h \rightarrow 0$  için açık bir örgü etkisi oluşmaktadır. Beklendiği gibi  $T=T_c$ ’ de  $h \rightarrow 0$  için örgü kenar uzunluğu sonsuza giderken durum parametresi sıfıra gitme eğilimindedir.

$T = T_c$  de  $M$ ’nin  $H$ ’ye (alana) karşı değişimi  $M \propto H^{1/\delta}$  olduğundan  $M$ ’nin  $H$ ’ye karşı Log-Log grafiğinin eğimi  $1/\delta$  ’yı vermektedir. Şekil 4.12’ de farklı örgüler için  $M$ ’nin  $h$ ’ye karşı grafiği verilmektedir. Bu grafikte örgü için verilerin farklı bir doğruya uyduğu görülmektedir. Bu doğruların eğiminden elde edilen sonlu örgü  $1/\delta(L)$  kritik üs değerlerinin sonsuza ekstrapolasyonundan  $\delta(\infty) = 4.92$  olarak tespit edilmiştir.(Şekil4.14) Alan kritik üssü için elde edilen bu sonsuz örgü değeri evrensel değer  $\delta = 5$  ile uyum içindedir.



Şekil 4.14.  $\text{Log}(h)$  nin  $\text{Log}(M)$  ye karşı değişim grafiği

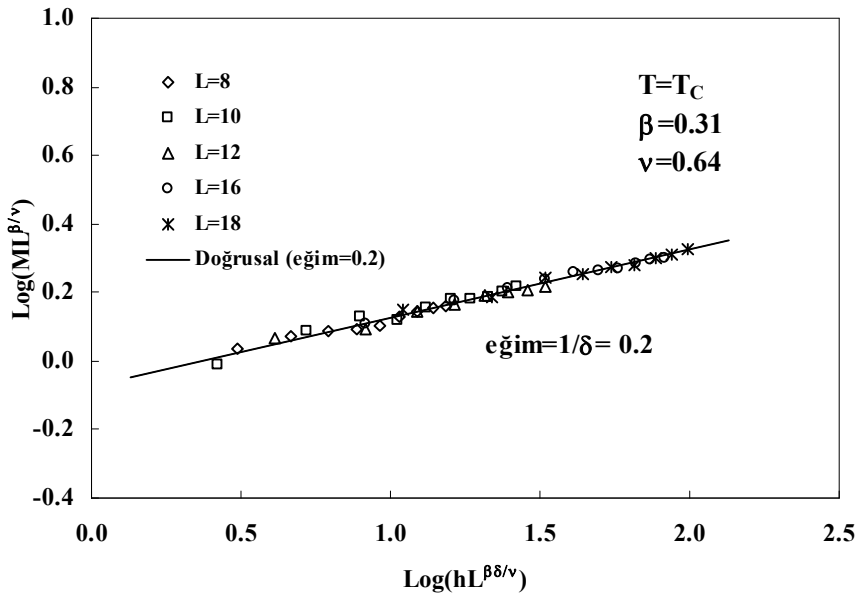


Şekil 4.15  $\delta(L)$  nin  $1/L^{1/\nu}$  ye karşı değişim grafiği

Delta alan kritik üssünü hesaplamannın bir yolu da  $T = T_c(\infty)$  ( $\varepsilon = 0$ ) için manyetizasyon ve manyetik alınganlık ölçkleme bağıntılarını kullanmaktır.

$$M(h,0) = L^{-\beta/\nu} X^0(L^{\delta\beta/\nu} h,0)$$

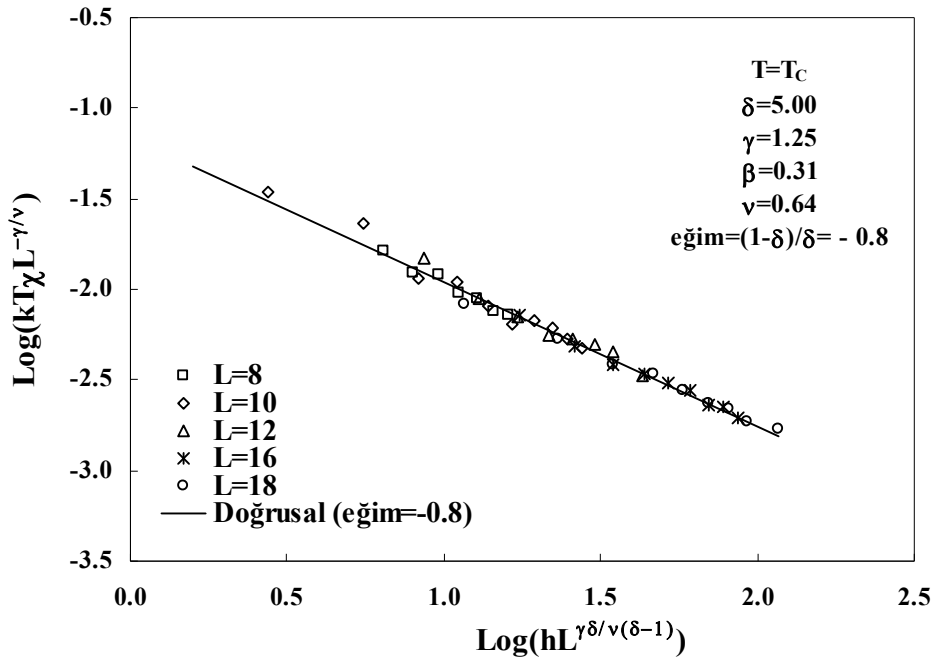
$$kT\chi = L^{\gamma/\nu} Y^0(L^{\beta\delta/\nu} h,0)$$



Şekil 4.16.  $\text{Log}(hL^{\beta\delta/\nu})$  ya karşı  $\text{Log}(ML^{\beta/\nu})$  'nin değişim grafiği

$T = T_C(\infty)$ 'da  $ML^{\beta/\nu}$ 'nün  $hL^{\delta\beta/\nu}$ 'ye karşı log-log grafikleri farklı örgüler için Şekil 4.15'de çizilmiştir. Bu grafiklerde  $\delta$ ,  $\beta$  ve  $\nu$  kritik üs değerleri için evrensel değerler alınmıştır. Bu evrensel değerler için çizilen grafiklerin 0,2 eğimli bir doğru üzerinde toplandığı görülmektedir. Eğim  $1/\delta$ 'ya karşılık geldiğinden bu ölçekleme ilişkisi deltanın 5 olduğunu göstermektedir.

$T = T_C(\infty)$ 'da manyetik alınganlık için elde edilen grafik Şekil4.16'de verilmektedir. Bu grafikte  $\delta$ ,  $\beta$ ,  $\nu$  kritik üs değerleri için evrensel değerler alınmaktadır. Bu evrensel değerler için çizilen grafiklerin -0,8 eğimli bir doğru üzerinde toplandığı görülmektedir. Eğim  $(1-\delta)/\delta$  ya karşılık geldiğinden bu ölçekleme ilişkisi deltanın 5 olduğunu göstermektedir.



Şekil 4.17.  $\text{Log}(hL^{\gamma\delta/\nu(\delta-1)})$  nün  $\text{Log}(kT\chi L^{-\gamma/\nu})$  ye karşı değişim grafiği



## 5. ÖNERİLER VE SONUÇLARI

Bu çalışmada üç boyutta dış manyetik alan etkili spin-1 (Blume-Capel) modelin bir Cellular Automaton algoritması kullanılarak simülasyonu gerçekleştirilmiştir. Simülasyonlarda termodinamik niceliklerin kritik sıcaklık civarındaki dış manyetik alan yok iken ve dış manyetik alan varlığında davranışlarını karakterize eden statik kritik üsleri belirlemek için  $L= 8,10,12,16$  ve  $18$  sonlu örgüler kullanılmıştır. Statik kritik üsler genel olarak, ilgili termodinamik niceliklerin kritik sıcaklık ve kritik sıcaklık civarında sonlu örgülerde yapılan ölçümlerden, sonlu örgü ölçekleme teorisi kullanılarak hesaplanabilmektedir. Bu çalışmada ilk olarak termodinamik niceliklerin  $h=0$  durumunda sıcaklığa bağlı değişim grafikleri oluşturulmuştur. Kritik sıcaklığın tespitinde iki yöntem kullanılmıştır. Bunların ilkinde manyetik alınganlığın maksimum verdiği sıcaklık değerinde kritik sıcaklık değeri tespit edilerek sonsuza ekstrapolasyon işlemi ile ( $1/L \rightarrow 0$  giderken) sonsuz örgüler için sıcaklık değerleri tespit edilmiştir. İkinci olarak binder parametresinin sıcaklığa göre değişim grafikleri oluşturulmuş ve bu grafiklerdeki kesişim noktasına karşılık gelen sıcaklık kritik sıcaklık olarak tespit edilmiştir. Bu iki yöntemle elde edilen sonuçlar birbiriyle uyum içindedir. Elde edilen bu kritik sıcaklık değerleri Transfer Matris Hesapları (5), Monte Carlo(8), ve Etkin Alan Teorisi (12) simülasyonları ile uyum içindedir. Bu sıcaklık değerleri kullanılarak sonlu örgü ölçekleme bağıntıları yardımıyla  $\alpha, \beta, \gamma, \nu$  ve  $\delta$  statik kritik üsleri ;  $\alpha = 0,12, \beta = 0,31, \gamma = 1,25, \nu = 0,64$  değerleri elde edilmiştir. Bu değerlerin evrensel değerlerle uyum içinde olduğu görülmüştür. Dış manyetik alan varlığında ortaya çıkan  $\delta = 5$  statik kritik üs değeri üç farklı yöntemle ilk defa bu çalışmada hesaplanmıştır Ayrıca dış manyetik alan varlığında termodinamik niceliklerin sıcaklığa bağlı değişimleri çizilmiştir. Termodinamik niceliklerin sıcaklıkla değişim eğrilerini oluştururken farklı sıcaklığa karşılık gelen başlangıç konfigürasyonları örgünün tüm spinleri ferromanyetik düzende seçilerek (yani tüm spinler 0 veya 1 alınarak) ve knetik enerji momentum değişkenleri kullanılarak sisteme rastgele olarak aktarılmıştır. Başlangıçta verilen knetik enerji değeri etrafı 1'le sarılı bir spini diğer durumlara dönüştürebilecek taban enerji olarak verilmektedir.

## KAYNAKLAR

1. Onsager I., "Crystal Statistics. I.A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition", *Phys.Rev.*65: 117 (1944).
2. Huang,K.,*Statistical Mechanics*, 2, Ed.,John Wiley andSons, New York (1987)
3. Pirivman y.,*Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Stastical Systems* World Scientific,Singapor,1990
4. Creutz, M.,”Microcannical Monte Carlo Simulation”, *Phys, Rev Lett.*,50:1411 (1983).
5. Hoogland A.,Spaa, J, Selman,B., And Compagner., A.,”A Special-Purpose Processor for Monte Carlo Simulation of Ising Spin Systems”,*J.Of.Comput Phys.*, 51:241 (1983).
6. Pearson ., R.B., Richardson, J.L.,and Toussaint ,D.,”A Fast Processor for Monte Carlo Simulation”, *J.Of comput. Phys.*, 51:241 (1983).
7. Frenkel, D.,*Molecular Dynamics Simulation of Stastical Mechanical Sistems*, Proceedings of The International School of Physics , Ed: G,Ciccotti and W.G.Hoover , Nerth-Holland, , p: 151 (1986).
8. Spohn. H., *Molecular Dynamics Simulation of Statistical Mechanical Systems*, Proceedings of the Interational School of Physics, Ed:GCiccotti and W:G:Hoover , North-Holland, , p:304 (1986).
9. Creutz, M., “Deterministic Ising Dynamics”, *Annzls of Physics*, 167:62 (1986)
10. Wolfram, S.,”Statistical Mechanics of Cellular Automata”, *Reviews of Modern Physics*, 55:601 (1983).
11. Wolfram, S., “Universality and Complexity in Cellular Automata “, *Physica 10D*,(1984).
12. Vihniac, G,Y., “Simulating Physics With Cellular Automata “ , *Ph10D* ,96 (1984).
13. Pomeau., Y.,”Invariant In Cellular Automata “ *J, Phys. A; Math. Gen.*, 17:1415 (1985).
14. Herrmann, H,J, “Fast Algorithm for the Simulation of Ising Model“,*J.of Stat Phys.*, 45:145 (1987).
15. Herrmann, H.J., Carmesin , H,O, and Sauffer D.,” Periods and Clusters IN Ising Cellular Automata “ , *J.Phys,A;Math.Gen.*,20:4939 (1987).

16. Parodi, O., And Ottavi, H., *Cellular Automata And Modelling Of Complex Physical Systems*, Springer Proceeding in Physics, Vol 46, Ed.: Mannevil P; Baccara N., Vichniac G.Y., Bidaux R., Springer Verlag Berlin, Heidelberg (1990).
17. Landau, D.P., "Finite-Size Behavior of The Ising Square Lattice" *Phys.Rev.B.*, 13:2997 (1976).
18. Landau, D.P., "Finite-Size Behavior of The Ising Square Lattice" *Phys.Rev.B.*, 14:2997 (1976).
19. Kutlu B., "Critical Exponents of The Two – Dimensional Ising Model With Next-Nearest-Neighbor and Four-Spin Interactions on The Creutz Cellular Automaton " *Physica A.*, 243: 199-212 (1997).
20. Kutlu B. "Critical Exponents of The Two –Dimensional Ising Model With Next-Nearest -Neighbor and Four-Spin Interactions on The Creutz Cellular Automaton " *Physica A.*, 243: 807-818 (1997).
21. N.W.Dalton and D.W.Wood, J. Math. *Phys.* **10.**,127 (1969).
22. Oitmaa, J., "The square-lattice Ising model with first and second neighbour interactions", *J. Phys A* **14** .,1159 (1981).
23. Landau, D., "Phase transitions in the Ising square lattice with next-nearest Neighbor interactions", *Phys, Rev.* **B21.**, 1285 (1980).
24. Binder, K., and Landua, D.P., "Phase diagrams and critical behavior In Ising square lattices with nearest-and next-nearest-neighbor interations", *Phys.Rev.* **B21.**, 1941 (1980).
25. Blote, H.W.J., A. Compagner and. A.Hooland, *Physica A.*,141 (1987).

## ÖZGEÇMİŞ

### Kişisel Bilgiler

Soyadı,adı : DEMİREL,Hacer  
Uyruğu : T.C.  
Doğum tarihi ve yeri : 01.12.1980 Ankara  
Medeni hali : Bekar  
Telefon : 0 312 370 35 49  
e-mail : [zeycan1980@hotmail.com](mailto:zeycan1980@hotmail.com).

Eğitim	Eğitim Birimi	Mezuniye Tarihi
Lisans	Gazi Üniversitesi/Fizik Bölümü	2004
Yüksek lisans	Gazi Üniversitesi/Fizik Bölümü	2004-2007

### İş deneyimi

Yıl	Yer	Görev
2004-2007	Dersane	Fizik Öğretmenliği

### Yabancı Dil

İngilizce

### Hobiler

Araştırma yapma, Gezilere katılma ,