

**DÖRT BOYUTLU SPİN-1 ISING (BLUME CAPEL)
MODELİN KRİTİK DAVRANIŞI**

Saime ILDIRŞAHİN GÜNEŞ

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**ŞUBAT 2010
ANKARA**

Saime ILDIRŞAHİN GÜNEŞ tarafından hazırlanan DÖRT BOYUTLU SPİN-1 ISING (BLUME CAPEL) MODELİN KRİTİK DAVRANIŞI adlı bu tezin Yüksek Lisans Tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.

Prof. Dr. Bülent KUTLU
Tez Danışmanı, Fizik Anabilim Dalı

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

Prof. Dr. Abdullah GÜNEN
Fizik Anabilim Dalı, Gazi Üniversitesi
Prof. Dr. Bülent KUTLU
Fizik Anabilim Dalı, Gazi Üniversitesi
Prof. Dr. Bora ALKAN
Fizik Mühendisliği, Ankara Üniversitesi

Tarih: 19/02/2010

Bu tez ile G.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu Yüksek Lisans derecesini onamıştır.

Prof. Dr. Bilal TOKLU
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

TEZ BİLDİRİMİ

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

Saime ILDIRŞAHİN GÜNEŞ

**DÖRT BOYUTLU SPİN-1 ISING (BLUME CAPEL)
MODELİN KRİTİK DAVRANIŞI
(Yüksek Lisans Tezi)**

Saime ILDIRŞAHİN GÜNEŞ

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
Ocak 2010**

ÖZET

Bu tezde, 4-boyutlu Blume-Capel (BC) model hiperküp örgü için Creutz Cellular Automaton'dan geliştirilen soğutma ve ısıtma algoritmaları kullanılarak simüle edildi. Kritik sıcaklıklar (kT_c/J) ve statik kritik üslerin (α , β , γ ve ν) değerleri $d \geq 4$ için geçerli olan sonlu örgü ölçekleme teorisi ile belirlendi. Simülasyonlar Blume-Capel modelin "single-ion anisotropy" parametresinin $D/J=3.7$ değerinde üçlü kritik noktaya sahip olduğunu gösterdi. Bu noktada statik kritik üs değerleri $\alpha=0.03$, $\gamma=1.16$, $\beta=0.58$ ve $\nu=0.58$ olarak elde edildi. Bu değerler $\alpha=0$, $\beta=1/2$, $\gamma=1$ ve $\nu=1/2$ evrensel değerlerinden farklıdır. Diğer taraftan $D/J < 3.7$ parametre bölgesinde $D/J=3$ değeri için belirlenen statik kritik üs değerleri evrensel değerlerle iyi bir uyum içindedir. Bu durum BC modelin üçlü kritik nokta civarında evrensel olmayan bir kritik davranışa sahip olduğunu işaret eder. Simülasyonlar periyodik sınır şartlı sonlu hiperküp örgülerde gerçekleştirilmiştir.

Bilim Kodu : 202.1.147

Anahtar Kelimeler : Blume-Capel model, statik kritik üs, evrensellik, üçlü kritik nokta, sonlu örgü ölçekleme teorisi.

Sayfa Adedi : 59

Tez Yöneticisi : Prof. Dr. Bülent KUTLU

**THE CRITICAL BEHAVIOR OF FOUR DIMENTIONAL SPIN-1 ISING
(BLUME-CAPEL) MODEL
(M.Sc.Thesis)**

Saime ILDIRŞAHİN GÜNEŞ

**GAZİ UNIVERSITY
INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY
January 2010**

ABSTRACT

In this thesis, the 4-dimensional Blume-Capel(BC) model is simulated using the cooling and the heating algorithms which improved from the Creutz Cellular Automaton for hypercube lattice. The values of the critical temperatures(kT_c/J) and the static critical exponents(α , β , γ and ν) are estimated within the framework of the finite size scaling theory for $d \geq 4$. The simulations shown that the model has a tricritical point at the $D/J=3.7$ single-ion anisotropy parameter value. In this point, the static critical exponents are estimated as $\alpha=0.03$, $\gamma=1.16$, $\beta=0.58$ and $\nu=0.58$ values. These values are different from universal values($\alpha=0$, $\beta=1/2$, $\gamma=1$ and $\nu=1/2$). In the other hand, for $D/J=3$ value in the $D/J < 3.7$ parameter region the estimated statical critical exponents are in good agreement with universal values. This case indicated that the BC model exhibits an ununiversal critical behaviour near the tricritical point. The simulations were carried out on the finite hypercube lattices with periodic boundary conditions.

Science Code: 202.1.147

Key Words : Blume-Capel model, static critical exponent, universality, tricritical point, finite size scaling theory.

Page number : 59

Adviser : Prof. Dr. Bülent KUTLU

TEŐEKKÜR

Çalıőmalarım boyunca deęerli yardımlarını esirgemeyen, tecrübeleriyle beni yönlendiren Sayın Prof. Dr. Bülent KUTLU' ya teşekkürlerimi sunarım.

Yardımlarından dolayı Dr. Aycan ÖZKAN' a, sabır ve yardımını esirgemeyen eşim Aymer GÜNEŐ' e ve manevi desteęinden dolayı annem Bedriye ILDIRŐAHİN' e teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET.....	iv
ABSTRACT.....	v
TEŞEKKÜR.....	vi
İÇİNDEKİLER.....	vii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ.....	ix
ŞEKİLLERİN LİSTESİ.....	x
1. GİRİŞ.....	1
2. FAZ GEÇİŞLERİ VE KRİTİK OLAYLAR.....	4
2.1. Termodinamik Nicelikler ve Kritik Üsler.....	6
2.2. İkinci Derece Faz Geçişi.....	10
2.3. Birinci Derece Faz Geçişi.....	11
2.4. Sonlu Örgü Ölçekleme Teorisi.....	13
2.4.1. Termodinamik nicelikler için sonlu örgü ölçekleme bağıntıları.....	14
2.4.2. Dört boyutlu Ising model için sonlu örgü ölçekleme ifadeleri.....	16
2.5. Spin Modelleri.....	17
2.6. Ising Model.....	19
2.6.1. Spin-1/2 Ising modeli.....	19
2.6.2. Spin-1 Ising modeli.....	20
3. MODEL.....	24
3.1. Cellular Automaton.....	24
3.2. Cellular Automaton Algoritmaları.....	24
3.2.1. Standart algoritma.....	24

	Sayfa
3.2.2 Soğutma algoritması.....	28
3.2.3 Isıtma algoritması.....	29
4. SONUÇLAR VE TARTIŞMA.....	31
4.1. Termodinamik Niceliklerin (M, χ, C, H_i) Sıcaklıkla Değişimleri.....	31
4.2. Statik Kritik Üsler.....	37
4.3. Üçlü Kritik Nokta $D/J=3.7$ için Statik Kritik Üslerin Belirlenmesi.....	47
5. TARTIŞMA.....	50
KAYNAKLAR.....	52
ÖZGEÇMİŞ.....	59

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 2.1. Termodinamik nicelikler ile ilgili kritik üsler	10
Çizelge 2.2. Heisenberg, XY ve Ising modellerine ait hamiltonyenlerin gösterimi.....	19
Çizelge 3.1. Soyut küp örgüde bir spin ters çevrildiğinde ΔH_I Ising enerjisindeki değişimler.....	26
Çizelge 5.1. D/J parametrelerinin 3 ve 3.7 değerleri için statik kritik üsler ve sonsuz örgü kritik sıcaklığı.....	50

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.1. $M(H)$ grafikleri; a) $T < T_C$, b) $T \approx T_C$, c) $T > T_C$	5
Şekil 2.2. (T, H) yarı düzlemi. Hat boyunca M süreksiz diğer yerlerde H ve T ' nin analitik bir fonksiyonudur.....	5
Şekil 2.3. Kendiliğinden manyetizasyonun (M) sıcaklıkla değişimi. (T_C kritik sıcaklıktır).....	6
Şekil 2.4. İkinci derece faz geçişinde a)düzen parametresi olasılık dağılımı $P(M)$ ve b) serbest enerji $P(E)$ ' nin kritik sıcaklık civarındaki davranışı.....	11
Şekil 2.5. İkinci derece faz geçişinde a)düzen parametresi olasılık dağılımı $P(M)$ ve b) serbest enerji $P(E)$ ' nin kritik sıcaklık civarındaki davranışı.....	13
Şekil 2.6. Spin-1/2 Ising model için; a) ferromanyetik taban durum, b) antiferromanyetik taban durum.....	20
Şekil 2.7. 3-boyutlu Blume Capel modelin Creutz Cellular Automaton algoritmasından türetilen standart ve soğutma algoritmaları ile elde edilen $(kT_C/J, d)$ faz diyagramı.....	22
Şekil 3.1. (a): 4-boyutlu hiperküp, (b): izdüşümü.....	25
Şekil 3.2. Soğutma ve ısıtma algoritmalarının akış diyagramı.....	27
Şekil 4.1. $L=12$ kenar uzunluklu bir örgü için kristal alan parametresi d 'nin farklı değerlerinde (a) Kendiliğinden manyetizasyonun, (b) Manyetik alınganlığın sıcaklığa bağlı değişimi. s:soğutma, ı:ısıtma.	32
Şekil 4.2. $L=12$ kenar uzunluklu bir örgü için kristal alan parametresi d 'nin farklı değerlerinde (a) iç enerjinin, (b) özısının sıcaklığa bağlı değişimi.....	33
Şekil 4.3. Soğutma ve ısıtma algoritması kullanılarak elde edilen $(kT/J, D/J)$ faz diyagramı.....	35
Şekil 4.4. $D/J=3.8$ için soğutma(s) ve ısıtma(ı) algoritmaları kullanılarak elde edilen (a) kendiliğinden manyetizasyon, (b) manyetik alınganlık (c) iç enerji, (d) özısının sıcaklığa bağlı değişimi.....	36
Şekil 4.5. Binder parametresi (g_L) nin sıcaklığa karşı değişimi.....	37
Şekil 4.6. Binder parametresinin (a)klasik ölçekleme (b)logaritmik düzeltilmeli ölçekleme bağıntıları ile ölçeklenmiş sıcaklığa bağlı değişimi.....	38

Şekil	Sayfa
Şekil 4.7. L=6,8,10 ve 12 kenar uzunluklarına sahip hiperküp örgü için kristal alan parametresi d 'nin sıcaklığa bağlı değişimi.	39
Şekil 4.8. Kendiliğinden manyetizasyonun (a) klasik ölçekleme, (b) logaritmik düzeltilmiş ölçekleme bağıntıları ile ölçeklenmiş sıcaklığa bağlı değişimi.....	40
Şekil 4.9. Manyetik alınganlığın sıcaklığa bağlı değişimi.....	41
Şekil 4.10. D/J=3 için $T_c^C(L)$ ve $T_c^{\lambda}(L)$ 'nin $1/L$ 'ye karşı grafiği.....	42
Şekil 4.11. (a) L=6, 8, 10 ve 12 örgülerde klasik ölçekleme, (b)Logaritmik düzeltilmiş ölçekleme bağıntıları ile ölçeklenmiş manyetik alınganlık değişimleri.....	43
Şekil 4.12. D/J=3 parametresi için sonlu örgülerde (L=6, 8, 10 ve12) özısının sıcaklıkla değişim eğrileri.....	44
Şekil 4.13. L=6, 8, 10 ve 12 örgüleri için D/J=3 noktasında hesaplanmış özısının a)Klasik ölçekleme, b)Logaritmik düzeltilmiş ölçekleme bağıntıları ile ölçeklenmiş sıcaklığa bağlı değişim eğrileri.	45
Şekil 4.14. Binder parametresinin logaritmik düzeltilmiş ölçekleme bağıntıları ile ölçeklenmiş sıcaklığa bağlı değişimi.	47
Şekil 4.15. Kendiliğinden manyetizasyonun logaritmik düzeltilmiş ölçekleme bağıntıları ile ölçeklenmiş sıcaklığa bağlı değişimi.....	48
Şekil 4.16. Manyetik alınganlığın logaritmik düzeltilmiş ölçekleme bağıntıları ile ölçeklenmiş sıcaklığa bağlı değişimi.	48
Şekil 4.17. Özısının logaritmik düzeltilmiş ölçekleme bağıntıları ile ölçeklenmiş sıcaklığa bağlı değişimi.	49

1.GİRİŞ

Faz geçişleri; bir maddenin kararlı yapısının sıcaklık, basınç, manyetik alan, elektrik alan gibi değişimler sonucu bozulması olarak tanımlanabilir. Suyun sıcaklık etkisiyle fiziksel yapısının değişmesi, demir(Fe), nikel (Ni), kobalt(Co) gibi maddelerin kritik sıcaklık (Curie sıcaklığı) değerinin altındaki sıcaklıklarda ferromanyetik özellik gösterirken, kritik sıcaklığın üstündeki sıcaklık değerlerinde paramanyetik özellik göstermesi gibi; sıvıdan gaza, normal iletkenlikten süper iletkenliğe, paramanyetiklikten ferromanyetikliğe geçişler faz geçişleri için örneklerdir. Bu çalışmada 4-boyutlu hiperküp spin sisteminde oluşan manyetik faz geçişleri incelenmektedir.

Ferromanyetik maddenin sıcaklığı Curie sıcaklığı denilen kritik sıcaklıktan daha düşük olduğunda, atom spinleri bir mıknatıslanma oluşturacak şekilde aynı doğrultuya kendiliğinden kutuplanabilmektedir. Curie sıcaklığından daha büyük sıcaklıklarda spinler rastgele yöneldikleri için net bir mıknatıslanma oluşturamazlar. Kritik sıcaklığa her iki taraftan yaklaşıldığında ise özısı ve manyetik alınganlık ıraksamaktadır.

Faz geçişlerini incelenmesi ve sistemin Curie sıcaklığı civarındaki termodinamik davranışının ortaya konması amacıyla çeşitli mikroskobik modeller geliştirilmiştir. Ising model; ferromanyetik sistemlerdeki faz geçişlerinin anlaşılması amacıyla önerilen en basit modeldir.

Spin-1/2 Ising modelin iki boyutta dış manyetik alanın olmadığı durumdaki analitik çözümü Onsager tarafından gerçekleştirilmiştir [1]. 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-Griffits (BEG) model olarak bilinmektedir [2]. Biquadratik etkileşme parametresinin olmadığı (K=0) model ise Blume-Capel (BC) model olarak isimlendirilmektedir. 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, ilk olarak He³-He⁴ karışımlarındaki

faz yapılarının ortaya konmasında uygulanmıştır. Daha sonra katı-sıvı-gaz karışımları [3, 4], mikroemülsiyonlar [5], yarı iletken alaşımlar [6] gibi karışık faz yapılarına sahip olan fiziksel sistemlerin faz yapılarının araştırılmasında geniş uygulama alanı bulmuş, üçlü kritik davranışa sahip fiziksel sistemler için model olmuştur.

Ferromanyetik maddeler Ising model ile modellenmekte ve termodinamik özellikleri incelenmektedir. Faz geçişi gösteren sistemler için ortaya konulan modellerin analitik çözümleri zor ve nadiren başarılı olduğu için, çözümde bilgisayar simülasyonları kullanılır.

Cellular Automaton uzaysal düzenleme yöntemlerinin en basitidir. İlk olarak John Von Neumann tarafından 1952’de keşfedildi. Neumann dört komşulu ve 29 olası durumlu hücrelerden oluşan bir automaton geliştirdi. Bu 200 000 hücreli bazı konfigürasyonları teklif edebilen ‘‘Turing makinesi’’ idi. Diğer Cellular Automaton örnekleri Conway’ın ‘‘Hayat Oyunu’’ ve Langton’ın ‘‘karınca’’sıdır. Cellular Automaton ve örnekleri biyolojik kompleks sistemleri kurmakta oldukça başarılıdır. Cellular Automaton’da uzay ve zaman kesikli değerlere sahiptir. Uzay, sonsuza kadar genişletilebilen düzenli bir hücre örgüsünden meydana gelir. Model için ilk teoriler Wolfram tarafından sunulmuştur [7,8]. Bazı fiziksel problemlerin yanı sıra Ising modelin Cellular Automaton olarak simülasyonu Vichniac tarafından önerilmiştir [9]. Pomeau ve Herrmann, Vichniac’ın Ising model için önerdiği kuralı Q2R Ising model olarak geliştirdi [10,11,12]. Q2R’de toplam enerji spin-spin etkileşim enerjisine karşılık gelir. Q2R algoritması toplam enerjinin korunduğu mikrokanonik bir küme oluşturmakta, simülasyon boyunca herhangi bir spin değişimi sonucunda iç enerjinin korunduğu konfigürasyonlar üretilmektedir. İç enerji simülasyon boyunca değişmediğinden, iç enerjideki dalgalanmalardan özısı hesap edilememektedir. Creutz’un 1986 yılında sunduğu mikrokanonik Cellular Automaton algoritması bu kısıtlamayı ortadan kaldırmıştır [13]. Creutz algoritmasında iç enerji ve kinetik enerji, toplam enerji korunacak şekilde değişmektedir. Rastgele bir sayı üreticisine ihtiyaç duymayan ve tam sayılar ile işlem yapan bu algoritma Monte Carlo gibi yöntemlerden on kat hızlı çalışmaktadır [13].

Ising model için Creutz Cellular Automaton algoritması ile iki ya da daha büyük boyutta, dış alan yokluğunda, en yakın komşu etkileşimleri göz önüne alınarak yapılan hesaplamalar Creutz Cellular Automaton (CCA)'nın Ising modeli taklit etmekte başarılı olduğunu göstermektedir [14]. Creutz Cellular Automaton (CCA) algoritmasından üretilen çeşitli algoritmalar; dört-spin etkileşimi [15], dış alan [16], ikinci derece en yakın komşu etkileşimi içeren Ising model [17], iki boyutlu Blume Capel (BC) model [18] ve iki boyutlu spin-1 Ising model [19,20] hesaplamalarında kullanılmış ve diğer yöntemler ile uyumlu sonuçlar elde edilmiştir. Üç boyutlu BC model için yapılan çalışmada, standart algoritmanın modelin sergilediği birinci derece faz geçişlerini taklit etme yeteneği test edilmiş, birinci derece faz geçişlerinin özelliği olan yarı kararlı durumları üretmediği görülmüştür. Bu nedenle Creutz algoritmasını temel alan soğutma algoritması üretilmiş ve BC modelin faz diyagramı elde edilerek [21], kritik davranış [22] ve birinci derece faz geçişlerinin ölçeklenmesi [23] incelenmiştir.

Termodinamik nicelikler $L=6, 8, 10$ ve 12 kenar uzunluğuna sahip $L \times L \times L$ hiperküp örgü için kritik sıcaklık civarındaki sıcaklıklar için $500\ 000$ zaman adımı üzerinden ortalama alınarak hesaplanmıştır. Hesaplamalarda periyodik sınır şartı kullanılmıştır. Sonsuz örgü davranışını elde etmek için ise sonlu örgü ölçekleme teorisinden yararlanılmıştır. Parametrelerin farklı değeri için yapılan simülasyonlar sonucunda, termodinamik niceliklerin kritik sıcaklık civarındaki davranışları incelenerek kritik sıcaklıklar belirlenmiştir. Sonsuz örgü kritik sıcaklık değerleri belirlenirken, Binder parametreleri ve kritik sıcaklık için sonlu örgü ölçekleme ifadesi kullanılmıştır. Belirlenen bu kritik sıcaklıklar ve kendiliğinden mıknatıslanma (M), manyetik alınganlık (χ), özısı (C) için sonlu örgü ölçekleme teorisi uygulanmış, statik kritik üsler hesaplanarak evrensel değerleri ile karşılaştırılmıştır.

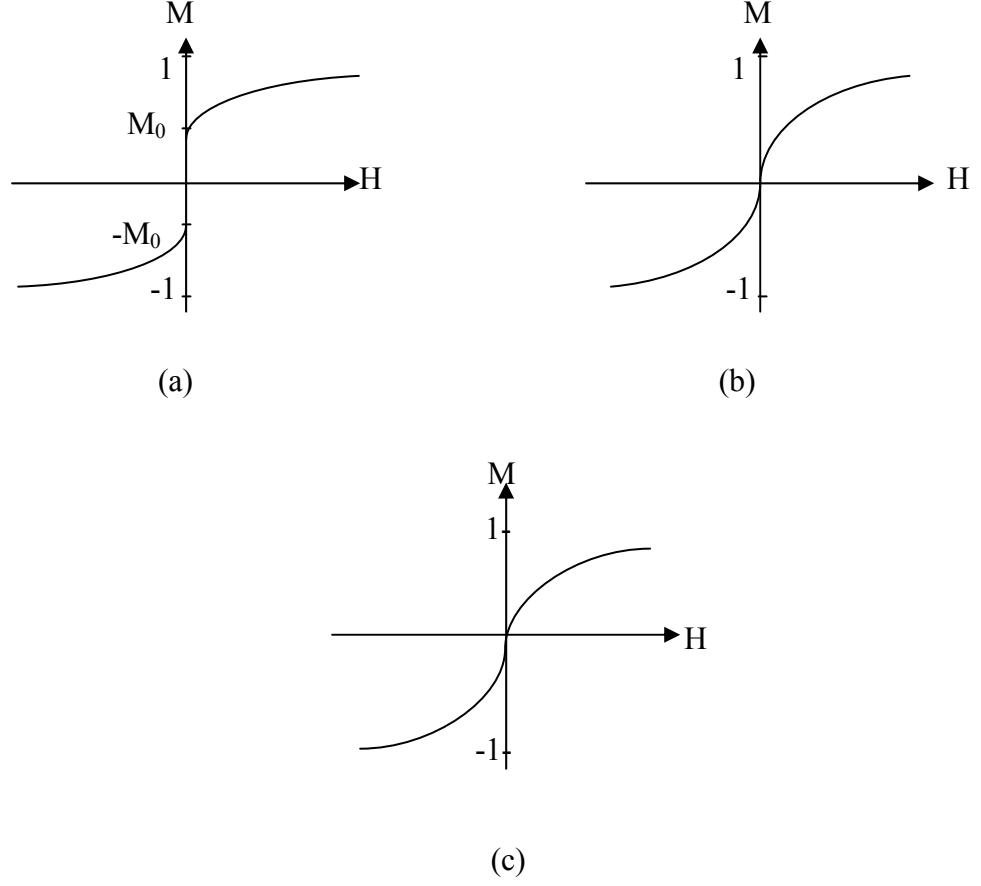
Bu tez kapsamında 4-boyutlu hiperküp örgüde spin-1 Ising modelin kritik davranışı Creutz Cellular Automaton algoritmasında geliştirilen ısıtma ve soğutma algoritmaları kullanılarak incelenmiştir.

2. FAZ GEÇİŞLERİ VE KRİTİK OLAYLAR

Doğadaki birçok sistemin fiziksel özellikleri istatistik mekaniksel olarak incelenebilir. Odadaki atmosfer, bardaktaki su, çubuk mıknatıs gözlenebilir mekanik sistemlere örnektir. Bu tür sistemlerin bileşenleri olan atom ya da moleküller üzerinde kontrole sahipsek, sistemin sıcaklık, yoğunluk, manyetizasyon gibi ortalama özelliklerini ölçebiliriz. İstatistik mekaniğin amacı bileşenler arasındaki mikroskobik özellikler hakkında bilgi vererek sistemin gözlenebilir makroskobik özelliklerini tahmin etmektir.

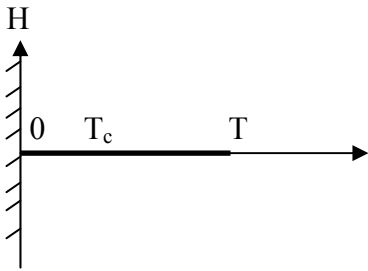
Ferromanyetik maddeler, birbirine paralel olarak yönelmeye çalışan atomik manyetik dipol momentlere sahiptir. Manyetik dipol momentler paralel hale getirildikten sonra dış alan kaldırılırsa bile madde mıknatıslanmış olarak kalacaktır. Ferromanyetizma aynı zamanda sıcaklığa bağlıdır. Sıcaklık mutlak sıfırda iken sistem en düşük enerji durumundadır, spinlerin hepsi aynı yöne yönelmiştir. Sistemin sıcaklığı yükseldikçe spinler rastgele yönelmeye başlar, maddenin mıknatıslanması azalır. Curie sıcaklığı adı verilen T_c sıcaklığında mıknatıslanma sıfır olur. T_c sıcaklığının üstündeki sıcaklıklarda madde paramanyetik faza geçer. Kritik sıcaklık değeri dış manyetik alanla değiştirilebilir. Örneğin oda sıcaklığındaki demir çubuk incelendiğinde sıcaklık artarken kendiliğinden manyetizasyonun (M_0) azaldığı görülür. Sıcaklık kritik sıcaklığa yükselirse M_0 sıfıra gider ve $M(H)$, $H=0$ 'da sonsuz eğimli sürekli bir fonksiyon haline gelir (şekil 2.1 (b)).

Paramanyetik maddeler bir dış alan içerisine konulduğu zaman atomik dipoller alan yönüne yönelmeye zorlanırlar. Bu durumda madde mıknatıslanmış olur. Eğer dış manyetik alan kaldırılırsa manyetik dipol momentler eski hallerini alırlar [24]. Atomları, sürekli manyetik dipol momente sahip olmayan maddelere ise diamanyetik maddeler denir. Faz geçişi yapan bir maddede T_c ' ye yakın T sıcaklığı için düzene olan eğilim ile düzensizliğe olan eğilim hemen hemen birbirini dengeler. $T < T_c$ durumunda düzen baskın çıkar ve bu düzenli faz ferromanyetik haldir. $T > T_c$ durumunda ise düzensizlik baskın olur ve düzensiz faz paramanyetik hal olarak bilinir [25].



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

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

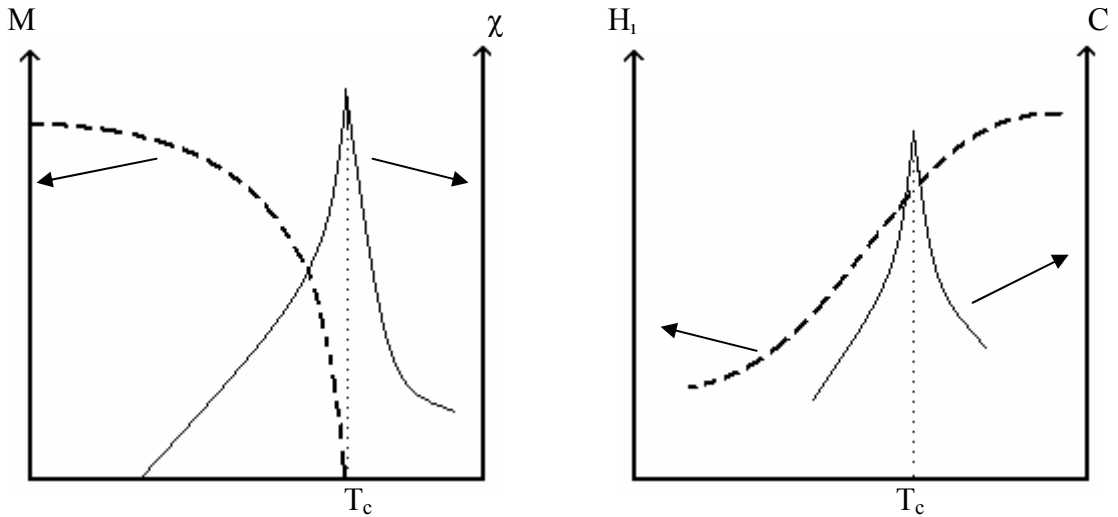


Şekil 2.2. (T, H) yarı düzlemi. Hat boyunca M süreksiz diğer yerlerde H ve T' nin analitik bir fonksiyonudur.

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

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

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



Şekil 2.3. Kendiliğinden manyetizasyon (M), manyetik alınganlık (χ), iç enerji (H_i) ve özısı (C)'nin sıcaklığa bağlı değişimi. (T_c kritik sıcaklıktır)

2.1. Termodinamik Nicelikler ve Kritik Üsler

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

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

$$f(H, T) = -kT \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \ln Z(H, T) \quad (2.2)$$

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

$$\begin{aligned} N &\approx 10^{23} \\ V &\approx 10^{23} \end{aligned} \quad (2.3)$$

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

$$\begin{aligned} N &\rightarrow \infty \\ V &\rightarrow \infty \end{aligned} \quad (2.4)$$

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

$$M(H, T) = -\partial(f(H, T)/kT)/\partial H \quad (2.5)$$

$$H_1(H, T) = -kT^2 \frac{\partial}{\partial T} [f(H, T)/kT] \quad (2.6)$$

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

$$\chi(H, T) = \partial M(H, T) / \partial H \quad (2.7)$$

$$C(H, T) = \frac{\partial}{\partial T} H_f(H, T) \quad (2.8)$$

ifadesi ile elde edilebilir.

Manyetizasyon cinsinden ifade edilebilen bir nicelik olan Binder parametresi aşağıdaki ifade ile tanımlanır [26].

$$g_L = 1 - \langle M^4 \rangle / (3 \langle M^2 \rangle^2) \quad (2.9)$$

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

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

$$t = (T - T_C) / T_C \quad (2.10)$$

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

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

$$M \sim (-t)^\beta \quad t \rightarrow 0^- \quad (2.11)$$

$$\sim (t)^{\beta'} \quad t \rightarrow 0^+$$

$$kT\chi \sim (-t)^{-\gamma} \quad t \rightarrow 0^- \quad (2.12)$$

$$\sim (t)^{-\gamma'} \quad t \rightarrow 0^+$$

Bu ifadelerdeki üslerden β manyetizasyon ve γ ise manyetik alınganlık kritik üsleri olarak adlandırılmaktadır.

Özısının kritik sıcaklık civarındaki davranışı α kritik üssü cinsinden,

$$C \sim (-t)^{-\alpha} + b^- \quad t \rightarrow 0^- \quad (2.13)$$

$$\sim t^{-\alpha'} + b^+ \quad t \rightarrow 0^+$$

ifadesindeki gibidir.

T_C civarında serbest enerjinin ıraksak kısmı kuvvet kanunu ile değişir ve özısı kritik üssü α ,

$$f(0, T) \sim t^{2-\alpha} \quad (2.14)$$

şeklinde de tanımlanabilir. Bu tanım; $H_1(0, T)$ ' nin sürekli, $C(0, T)$ ' nin T_C ' nin iki tarafında da ıraksadığı durumda, ($\alpha=\alpha'$) için Eş. 2.13' e eşittir. Bu $f(0, T)$ ' de tek olası ıraksamanın f ' nin herhangi bir türevindeki süreksizlik olduğunu düşündürür. Eğer ilk $r-1$ türev sürekli fakat r inci türev süreksiz ise sistem " r inci dereceden faz geçişi" yapıyor denir. Mesela H_1 ' daki süreksizlik (gizli ısı) "birinci derece faz geçişi"

nin varlığını işaret eder. Eş. 2.14' den $2 - \alpha = r'$ dir. Bu durumda birinci derece faz geçişi için $\alpha=1$ ' dir. Eş. 2. 13 ve 2. 14' den $H_I(0,T)$, $t^{1-\alpha}$ ile orantılı bir terim içerir. Bu nedenle α kritik üssü negatif değer alabilir ($\alpha \leq 1$).

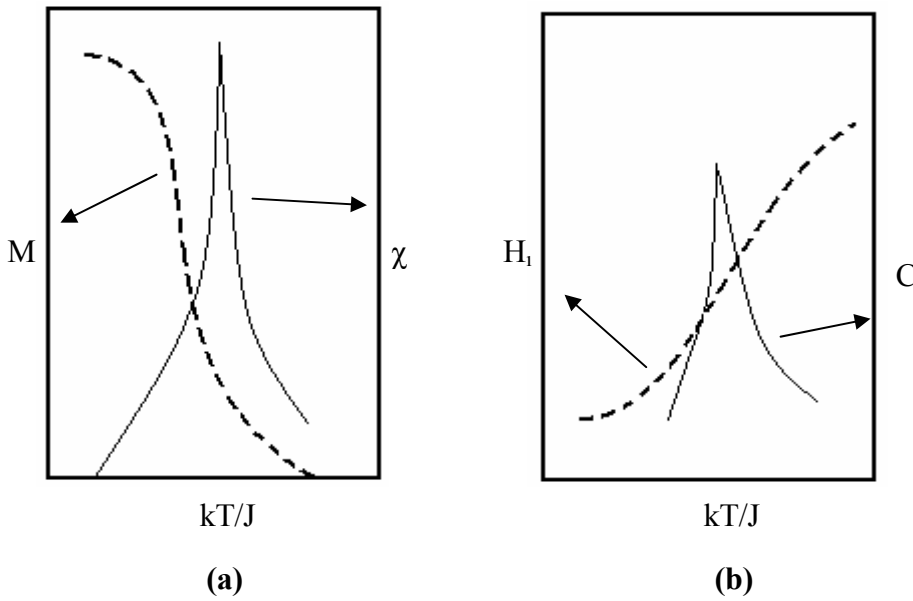
Çizelge 2.1. Termodinamik nicelikler ile ilgili kritik üsler [27,28,29]

Fiziksel nicelik	Kritik üs	d=2 Ising Model	d=3 Ising Model	d=4 Ising Model	Manyetik sistem(deneysel)
C (özısı)	α ($T < T_C$)	0	0.12	0	0~0.14
	α' ($T > T_C$)	0	0.12	0	0~0.14
M (düzen parametresi)	β ($T \leq T_C$)	0.125	0.31	0.5	0.33
χ (alınanlık)	γ, γ'	1.75	1.25	1	1.30~1.37
ξ (korelasyon uzunluğu)	ν	1	0.63	0,5	0.63~0.65

2.2. İkinci Derece Faz Geçişi

Fe, Co ve Ni gibi manyetik malzemelerde görülen ferromanyetizmadan paramanyetizmaya, ikili alaşımlarda görülen düzenden düzensizliğe ve süper akışkanlarda görülen süper akışkandan akışkana ikinci derece faz geçişi görmek mümkündür. İkinci derece faz geçişleri, serbest enerjinin birinci türevinin sürekliliği, ikinci türevinin süreksizliği ile tanımlanır. Manyetik malzemelerde düzen parametresi manyetizasyondur. Herhangi bir manyetik sistem için faz geçiş sıcaklığı civarında manyetizasyon ve iç enerjide görülen sürekliliğin yanı sıra alınanlık ve özısıda görülen ıraksama ikinci derece faz geçişinin karakteristik özelliğidir (Şekil 2.4).

İkinci derece faz geçişini tanımlamanın bir başka yolu ise düzen parametresi olasılık dağılımı $P(M)$ ve iç enerji olasılık dağılımı $P(E)$ 'yi incelemektir [30,31,32]. $P(M)$, faz geçişi kritik sıcaklığının altında düzeni ifade eden bir pike sahiptir. Kritik sıcaklıkta ise iki eşit yükseklikte pik göze çarpar. Sıcaklık arttıkça yaklaşan pikler kritik sıcaklığın üstünde düzensizliği işaret eden tek pike dönüşür.



Şekil 2.4. İkinci derece faz geçişinde (a) manyetizasyon ve manyetik alınganlığın, (b) iç enerji ve özısının sıcaklığa bağlı değişimi.

2.3. Birinci Derece Faz Geçışı

Birinci derece faz geçişi serbest enerjinin birinci türevindeki, dolayısıyla düzen parametresi ve iç enerjideki süreksizlik ile tanımlanır. Alınganlık ve özısı ise faz geçiş sıcaklığında δ -tekilliğine sahiptir. Katı-sıvı-gaz geçişleri ve Bose-Einstein yoğunlaşması birinci derece faz geçişlerine örnektir (Şekil 2.5).

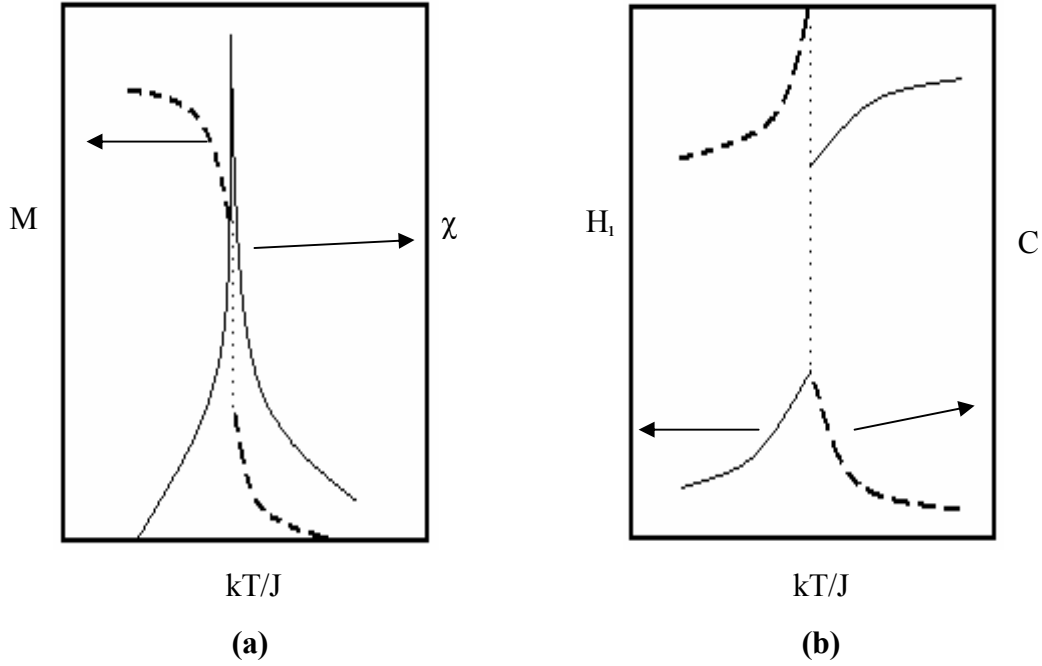
Birinci derece faz geçişi yapan sistemde olasılık dağılımı geçiş sıcaklığının altında iki pike sahiptir. Geçiş sıcaklığına yaklaşırken $P(M)$ düzenli ve düzensiz iki fazın “bir arada” bulunduğunu işaret edecek şekilde eşit yükseklikte üç pik sergiler. Geçiş sıcaklığının üzerinde ise $P(M)$ tek piklidir. Benzer olarak ikinci derece faz geçişi yapan sistemin serbest enerjisi $P(E)$; geçiş sıcaklığının altında ve üstünde tek pike, geçiş

sıcaklığında eşit derinlikte üç minimuma sahiptir. Birinci derece faz geçişlerinde iç enerji olasılık dağılımından elde edilen serbest enerji geçiş sıcaklığının altında tek minimuma sahiptir. Geçiş sıcaklığı civarında ortaya çıkan iki minimum arasında gidip gelen sistemin hangi minimumdaki durumda olduğunun ayırt edilebilmesi yarı kararlı durumları meydana getirir. Geçiş sıcaklığının üstünde ise serbest enerjide tek minimum görülür. Yarı kararlı durumlar düzen parametresi ve iç enerjinin faz geçiş bölgesinde S-şekli sergilemesine neden olur [33, 34, 35]. Yarı kararlı durumların meydana gelmesi birinci derece faz geçişinin ayırt edici özelliğidir.

Birinci ve ikinci derece faz geçişlerini birbirinden ayıran bir başka nicelik ise korelasyon uzunluğudur. İkinci derece faz geçişinde kritik noktada sonsuza giden korelasyon uzunluğu birinci derece faz geçişlerinde sonludur. Bu nedenle küçük örgülerde yapılan hesaplamalarda birinci derece faz geçişi korelasyon uzunluğunun örgü boyu nedeniyle sonsuz algılanmasından dolayı ikinci derece gibi görünebilir. Simülasyon çalışmalarında sonlu örgülerin çalışılması birinci derece faz geçişindeki süreksizliğin azalmasına ve δ -tekilliğinin genişlemesine neden olur [30,31,36-40,35, 41,42]. Aralarındaki bariyer yeterince yüksek olmadığında sistem iki minimumu ayırt edemez. Bu nedenle faz geçişi ikinci derece gibi görülebilir. Artan örgü uzunluğu ile beraber aradaki bariyerde yükselir ve serbest enerji yüzeyi simülasyon tarafından doğru algılanabilir. Bu sadece denge durumlarını algılayabilen teorik hesaplamalara kıyasla simülasyonun avantajıdır. Birinci derece faz geçişlerinde alınganlık ve özısı, yüksekliği hacimle değişen, hacim büyüdükçe δ -tekilliğine sahip olan bir fonksiyon gibi davranır. Bu nedenle faz geçişi sırasında ortaya çıkan tekil davranış ikinci derece faz geçişinde olduğu gibi kritik üslerle karakterize edilemez. Bunun yerine tekil davranışlar örgü hacmi ile ilişkilendirilir.

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

diyagramının yanı sıra geniş uygulama alanına sahip olan spin-1 Ising model incelenmiştir.



Şekil 2.5. Birinci derece faz geçişinde (a) manyetizasyon ve manyetik alınganlığın, (b) iç enerji ve özısının sıcaklığa bağlı değişimi.

2.4. Sonlu Örgü Ölçekleme Teorisi

Fiziksel sistemlerin kritik davranışlarını taklit etmek amacıyla yapılan hesaplamalar sonlu örgüler üzerinde gerçekleştirilebilmektedir. Bu nedenle sonlu örgülerdeki hesaplamalardan sonsuz örgü davranışını tahmin edebilmek için sonlu örgü ölçekleme teorisi geliştirilmiştir. Sonlu örgü ölçekleme bağıntıları; sistemin kritik nokta yakınlığında olması ve tüm uzunlukların, sisteme ait karakteristik uzunluk olan, ξ korelasyon uzunluğu cinsinden ifade edilmesi gibi kabullerden elde edilmektedir. Bu yüzden ölçekleme teorisi uzunluk ölçeğinin değişimine bağlı olarak termodinamik niceliklerde görülen değişimlerle ilgilidir. Boyutlu bir niceliğin değeri standart bir birim uzunluğa bağlı olarak değişir [43].

2.4.1. Termodinamik nicelikler için sonlu örgü ölçekleme bağıntıları

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

$$g(x) \approx x^{-p} \quad (2.17)$$

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

$$g(x/b) = b^p g(x) \quad (2.18)$$

şeklinde yazılabilir. Kritik noktada termodinamik fonksiyonlar korelasyon fonksiyonu gibi homojen fonksiyonlarla ifade edilebilir. Hacim başına serbest enerji

$$(f = F / kTV)$$

$$f(h', t') = b^d f(h, t) \quad (2.19)$$

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

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

$$t' = b^{1/\nu} t \quad (2.20)$$

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

$$h' = b^{\delta\beta/\nu} h \quad (2.21)$$

elde edilir [44]. Bu durumda $b \rightarrow L$ için serbest enerji ifadesi aşağıdaki gibidir.

$$f(h, t) = L^{-d} f(L^{\delta\beta/\nu} h, L^{1/\nu} t) \quad (2.22)$$

t , indirgenmiş sıcaklık olmak üzere sonsuz ve sonlu örgü kritik sıcaklıkları arasındaki fark,

$$\Delta t = \frac{T_c(\infty) - T_c(L)}{T_c(\infty)} \propto aL^{-1/\nu} \quad L \rightarrow \infty \quad (2.23)$$

şeklinde tanımlanır [42]. Ölçekleme bağıntısındaki L örgünün kenar uzunluğu, kritik üsler ise “ sonsuz örgü kritik üsleri ” dir. Tüm termodinamik nicelikler için sonlu örgü ölçekleme bağıntıları, serbest enerji için verilen sonlu örgü ölçekleme bağıntısından elde edilir. Kendiliğinden manyetizasyon, manyetik alınganlık ve özısı için sonlu örgü ölçekleme bağıntıları

$$M(h, t) = L^{-\beta/\nu} X^o(L^{\delta\beta/\nu} h, L^{1/\nu} t) \quad (2.24)$$

$$kT\chi = L^{\gamma/\nu} Y^o(L^{\delta\beta/\nu} h, L^{1/\nu} t) \quad (2.25)$$

$$C = L^{\alpha/\nu} Z^o(L^{\delta\beta/\nu} h, L^{1/\nu} t) \quad (2.26)$$

ifadeleri ile verilmektedir [42].

g_L oranlarının sonlu örgü ölçekleme teorisine göre ölçeklenmiş formu aşağıdaki şekildedir [42].

$$g_L = g(\varepsilon L^{1/\nu}) \quad (2.27)$$

g_L ' nin bu şekilde ölçeklenmesi sonucunda ν kritik üssünün değeri elde edilebilir [42].

2.4.2. Dört boyutlu Ising Model için sonlu örgü ölçekleme ifadeleri

Ising modeli ϕ^4 alan teorisi ile aynı evrensellik sınıfındadır. Bu teori için üst kritik boyut dördür. Dört boyutun üzerindeki boyutlarda bu teori kritik bölgede renormalize olmuş etkileşmenin ortadan kalkması ile önemsiz olmakta ve kritik üsler ϕ^4 alan teorisinin ortalama alan değerlerini almaktadır. Renormalize olmuş etkileşme (g_R) kritik nokta yakınında şu şekilde verilmektedir,

$$g_R \sim t^{u\omega^*} \quad (2.28)$$

Burada $t=(T-T_C)/T_C$ ve T_C kritik sıcaklıktır. İki boyutta kesin çözüm $\omega^* = 0$ durumunda görülmektedir. Model önemli bir etkileşme teorisidir. $d=4$ üst kritik boyutta renormalizasyon grup hesaplamalarıyla ortaya atılan ortak inanış Eş. 2.28 için logaritmik düzeltmenin kritik bölgede önemsiz olduğu sonucuna götürmektedir (Gaussian Teorisine göre). Gerçekte Gaussian teorisinin dört boyutta ϕ^4 teorisi için ispatlanması zordur.

- i) Kritik bölgede ortalama alan davranışından bir çok logaritmik sapma vardır.
- ii) $t \rightarrow 0$ iken $g_R \rightarrow 0$ olmakta ve renormalize olmuş etkileşme serbest alan limitinde yok olmaktadır. Bu tahminler bilgisayar simülasyonunda gözlenebilmektedir [45].

L^d hiperkübik sonlu bir sistemin serbest enerji yoğunluğunun ‘‘singüler’’ kısmı $f_L^S(t, h)$ Privman ve Fisher tarafından aşağıdaki şekilde verilmektedir [46].

$$f_L^{(s)}(t, h) = L^{-d} Y(C_1 t L^{1/\nu}, C_2 h L^{\Delta/\nu}) , \quad t \rightarrow 0, \rho^* h \rightarrow 0, L \rightarrow \infty \quad (2.29)$$

Burada Δ ‘‘gap’’ üssü, ν sonsuz sistem için korelasyon uzunluğu kritik üssü, $t = (T - T_c)/T_c$ indirgenmiş sıcaklık, h indirgenmiş dış manyetik alandır. C_1 ve C_2 ölçekleme çarpanları (faktörleri) sisteme bağlı evrensel olmayan parametrelerdir.

Yani ölçekleme fonksiyonu $Y(x, y)$ evrenseldir. Eş. 2.29 $d=4$ boyutlu Ising modeline $T = T_c$ ’deki χ_L ve C_L için mevcut olan ölçekleme bağıntıları göz önüne alınarak uygulanırsa periyodik sınır şartlı L^d hiperkübik sonlu bir sistemin serbest enerji yoğunluğunun singüler kısmı;

$$f_L^{(s)}(t, h) = L^{-4} Y(C_1 t L^2 \log^{1/6} L, C_2 h L^3 \log^{1/4} L) , \quad t \rightarrow 0, h \rightarrow 0, L \rightarrow \infty \quad (2.30)$$

olur. Eş. 2.30 kullanılarak manyetizasyon $M_L(t, h)$, manyetik alınganlık $\chi_L(t, h)$, özısının singüler kısmı $C_L^S(t, h)$ ve Binder parametresi $g_L(t, h)$ için aşağıdaki sonlu örgü ölçekleme ifadeleri elde edilebilmektedir.

$$M_L(t, h) = -\frac{\partial f_L}{\partial h} = L^{-1} \log^{1/4}(L) C_2 U(C_1 t L^2 \log^{1/6} L, C_2 h L^3 \log^{1/4} L) \quad (2.31)$$

$$\chi_L(t, h) = -\frac{\partial^2 f_L}{\partial h^2} = L^{-1} \log^{1/2}(L) C_2^2 V(C_1 t L^2 \log^{1/6} L, C_2 h L^3 \log^{1/4} L) \quad (2.32)$$

$$C_L^S(t, h) = -\frac{\partial^2 f_L}{\partial t^2} = \log^{1/3}(L) C_1^2 W(C_1 t L^2 \log^{1/6} L, C_2 h L^3 \log^{1/4} L) \quad (2.33)$$

$$g_L(t) = \frac{\chi_L^{(4)}}{L^4 \chi_L^2} = Y(C_1 t L^2 \log^{1/6} L, C_2 h L^3 \log^{1/4} L) \quad (2.34)$$

Bu denklemler daha genel şekilde aşağıdaki gibi yazılabilir,

$$M_L(t, h) = L^{-\beta/\nu} \log^{1/4}(L) C_2 U(C_1 t L^2 \log^{1/6} L, C_2 h L^3 \log^{1/4} L) \quad (2.35)$$

$$\chi_L(t, h) = L^{\gamma/\nu} \log^{1/2}(L) C_2^2 V(C_1 t L^2 \log^{1/6} L, C_2 h L^3 \log^{1/4} L) \quad (2.36)$$

$$C_L^{(s)}(t, h) = L^{\alpha/\nu} \log^{1/3}(L) C_2 W(C_1 t L^2 \log^{1/6} L, C_2 h L^3 \log^{1/4} L) \quad (2.37)$$

Burada α, β, γ ve ν sırasıyla sonsuz örgünün özısı, manyetizasyon, manyetik alınganlık ve korelasyon uzunluğu için kritik üslerdir. U, V, W ve G sonlu örgü ölçekleme fonksiyonlarıdır.

2.5. Spin Modelleri

Termodinamik özelliklerin, spin modellerinde incelenmesi ile faz geçişleri ile ilgili birçok önemli sonuç elde edilmiştir. Bunların en önemli özellikleri, Ising model, XY-model (iki boyutlu spin vektörleri), Heisenberg model (üç boyutlu spin vektörleri) dir.

Burada belirtilen modeller için en genel hamiltonyen aşağıda verilmiştir.

$$H_{Heisenberg} = J_x \sum_{\langle i, j \rangle} S_i^x S_j^x - J_y \sum_{\langle i, j \rangle} S_i^y S_j^y - J_z \sum_{\langle i, j \rangle} S_i^z S_j^z - H_z \sum_i S_i^z \quad (2.38)$$

J_x, J_y ve J_z etkileşme sabitlerini ve $\langle i, j \rangle$ de en yakın komşu çiftlerini temsil etmektedir. XY model için hamiltonyen ifadesinde J_x ve J_y sabitleri, Ising model için hamiltonyen ifadesinde ise sadece J_x sabiti bulunmaktadır. Bu modeller için hamiltonyen ifadeleri Çizelge 2.2'de görülmektedir.

Çizelge 2.2. Heisenberg, XY ve Ising modellerine ait hamiltonyenlerin gösterimi.

Etkileşim Sabitleri			Model
J_x	J_y	J_z	Heisenberg
J_x	J_y	0	XY
0	0	J_z	Ising

2.6. Ising Model

2.6.1. Spin-1/2 Ising modeli

1920' lerin başında Lenz tarafından ferromanyetizma için önerildi [47]. 1925 yılında Ising modelin bir boyutta analitik çözümünü yaptı ve faz geçişi olmadığını öne sürdü. Ising çeşitli yaklaşımlarla yüksek boyutlarda da faz geçişi olmadığını iddia etti [48]. Daha sonra Heisenberg, Ising modeli ele alarak faz geçişlerini gözledi [49]. 1936 ' da Peierls düşük sıcaklıklarda Ising model için kendiliğinden manyetizasyonu tanımladı ve yüksek boyutlarda faz geçişi olduğunu kanıtladı [50]. Modelin iki boyutta analitik çözümü 1944 yılında Onsager tarafından dikdörtgen örgüde sıfır alan için yapıldı [1]. Diğer boyutlarda modelin analitik çözümü henüz yapılmamıştır.

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

Ising model, N tane sabit noktadan oluşan n -boyutlu periyodik sistemleri inceler. İncelenen sistem, örgünün noktalarında bulunmaya zorlanmış spinlerden oluşur. Her bir spin, belli bir eksen boyunca veya bu eksene zıt yönde yönelmiş mikroskobik manyetizasyon olarak ele alınarak, iki olası biçim kazanır. Noktalar $+1$ (eksene paralel, spin yukarı) veya -1 (eksene zıt, spin aşağı) değerlerine sahip S_i değişkeni ile

işaretlenir. Verilen bir $S=\{S_i\}$ kümesi tüm sistemin konfigürasyonunu belirtmek üzere, sistemin Hamiltonyen'i S 'nin bir fonksiyonudur.

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j + h \sum_i S_i \quad (2.39)$$

$\langle ij \rangle$ en-yakın komşu çiftleri üzerinden toplamı, J_{ij} etkileşim enerjisini, h ise dış alan parametresini temsil eder. $J_{ij}=-J$ ise ferromanyetik, $J_{ij}=+J$ ise antiferromanyetik sistem için hamiltonyen ifadesi elde edilir. Etkileşimler izotropik ise $J_{ij}=J$ alınır. Şekil 2.6'da spin-1/2 Ising modelin sahip olduğu taban durumları görülmektedir.



Şekil 2.6. Spin-1/2 Ising model için; (a) ferromanyetik taban durum, (b) antiferromanyetik taban durum.

2.6.2. Spin-1 Ising modeli

1971 yılında Blume, Emery ve Griffiths ortalama alan yaklaşımı ile tamamlanmamış spin-1 Ising modeli ortaya koyarak He^3 - He^4 karışımına uyguladı [2]. Gaz-sıvı-katı sistemlere [3] ve hamiltonyene çift kutup-dört kutup etkileşim terimi eklenerek çok bileşenli akışkanlar ve sıvı kristal karışımlara [3,4,51] uygulanan model yarıiletken alaşımlar [6], mikroemülsiyonlar [52], absorbate sistemler [53] ve ferromanyetik ikili alaşımlar [54] gibi sistemlere de uygulanmıştır.

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

$$H = J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + K \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 S_j^2 + L \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^2 S_j + S_i S_j^2) + D \sum_i S_i^2 + h \sum_i S_i \quad (2.40)$$

İfadedeki S_i spin değişkeni ± 1 ve 0 değerlerinden birini alabilmektedir. J bilineer etkileşim parametresi, K bikuadratik etkileşim parametresi, L çift kutup-dört kutup etkileşim parametresi, D kristal alan parametresi ve h dış alan parametresidir. $\langle ij \rangle$ toplamın en-yakın komşu çiftleri üzerinden alındığını ifade etmektedir.

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

$$H = J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + D \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 + h \sum_i S_i \quad (2.41)$$

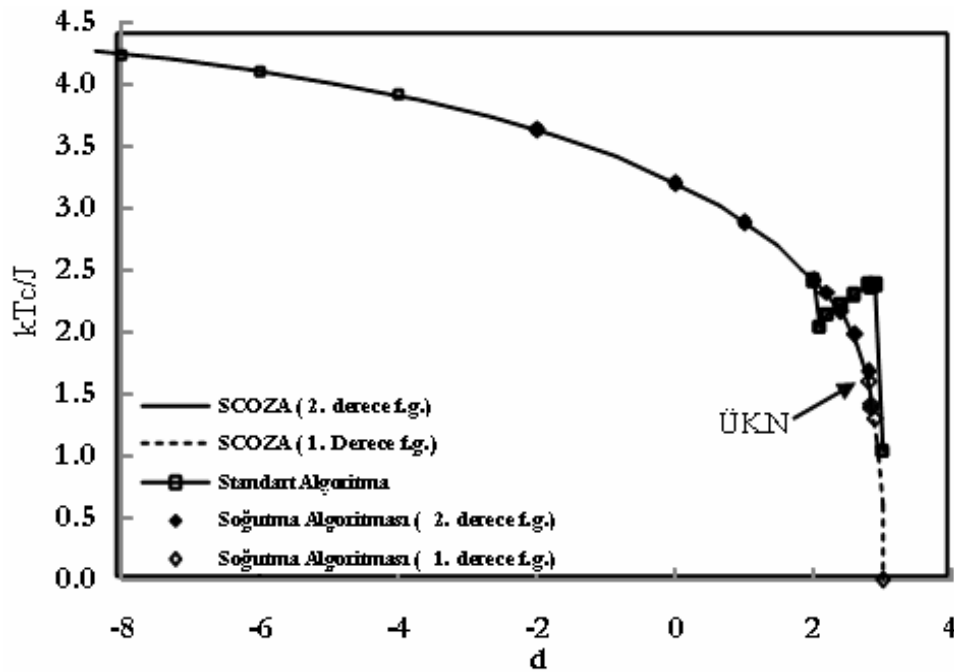
Üç durumlu ve iki düzen parametrelili(M,Q) bir spin-1 Ising model olan BC model, magnetik faz geçişleri [55,56], yapısal geçişler [57], seyreltilmiş Ising ferromagnetikleri [58] ve intercalated bileşikler [59] gibi çeşitli fiziksel durumlara uygulanmaktadır. İki ve üç boyutta tam çözümü bulunmayan BC model bugüne kadar sıkça farklı simülasyon ve yaklaşım metodları ile çalışılmıştır.

Modelin ayrıntılı analizleri; ortalama-alan yaklaşımı (MFA) [60,61], etkin alan teorisi (EFT) [62,63], Bethe-Peierls yaklaşımı [64,65], seri açılımı metodu [66,67], kendinden oluşumlu Ornstein-Zernike yaklaşımı (SCOZA) [68,69], normalize edilmiş grup teorisi (RG) [70,71], kümesel değişim metodu (CVM) [72,73] gibi yaklaşım metodlarının yanı sıra, monte carlo metodu (MC) [74,75] ve cellular automaton (CA) [76,77] gibi simülasyon teknikleri ile de yapılmıştır.

BC model (kT_C/J , $d=D/J$) faz diyagramı üzerinde, ikinci derece faz geçişinin birinci derece faz geçişine dönüştüğü, üçlü kritik noktaya sahiptir. Modelin iki boyutta sahip olduğu üçlü kritik nokta değeri monte carlo yöntemi ile $d=1,98$ [78], cellular automaton ile $1.5 \leq d \leq 2$ aralığında tahmin edilmiştir [79].

İki boyutlu spin-1 Ising model için yapılan hesaplamalar algoritmanın ikinci derece faz geçişlerini taklit etmekteki başarısını bir kez daha ortaya koymuştur [80,81]. BC

modelin üç boyutta sahip olduğu üçlü kritik nokta seri açılım metodu ile $d=2,82$ [82,83], CVM ile $d=2,817$ [84,85], EFT ile $d=2,82$ [86,87], Bethe-Peierls yaklaşımı ile $d=2,818$ [88,89] ve Creutz algoritmasından türetilen soğutma algoritması kullanılarak Cellular Automaton hesaplaması ile $d=2,82$ [90] olarak tahmin edilmiştir.



Şekil 2.7. 3-boyutlu Blume Capel modelin Creutz Cellular Automaton algoritmasından türetilen standart ve soğutma algoritmaları ile elde edilen $(kT_c/J, d)$ faz diyagramı. Boş simgeler ve kesikli çizgiler birinci derece faz geçişini, dolu simgeler ve sürekli çizgiler ikinci derece faz geçişlerini işaret etmektedir. ÜKN: Üçlü kritik nokta.

Üç boyutlu BC model için Cellular Automaton ile hesaplamalar Creutz algoritmasını temel alan standart ve soğutma algoritmaları ile yapılmıştır. Standart algoritma ile yapılan hesaplamalarda BC modelin $D/J=d=3$ parametresine kadar ikinci derece faz görülmüş, dolayısıyla üçlü kritik nokta $d=3$ olarak tespit edilmiştir. Yarı kararlı durumları üretemeyen standart algoritma ile birinci derece ve ikinci derece faz geçişlerini ayırt edilememektedir [91,92]. Bu nedenle standart algoritmayı temel alan soğutma algoritması üretilmiştir.

Soğutma algoritması ile yapılan hesaplamalarda üç boyutlu Blume Capel modelin, literatürle uyumlu olarak [93,94,95,96], $d=2.82$ ' de üçlü kritik noktaya sahip olduğu ve $2.82 \leq d \leq 3$ aralığında birinci derece faz geçişi sergilediği görülmüştür.

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 [97,98]. 1970 yılından itibaren John Conway’ in hayat oyunu [99] ile hızlanan cellular automaton çalışmaları 1980’ li yıllardan itibaren fiziksel sistemlere uygulanmaya başlamıştır. Spin 1/2 Ising model için ilk Cellular Automaton algoritması Creutz tarafından ileri sürülmüş [13] ve bu algoritmanın bir çok versiyonu farklı spin sistemleri için Kutlu ve arkadaşları tarafından üretilmiş ve test edilmiştir [14-21].

3.2. Cellular Automaton Algoritmaları

3.2.1. Standart algoritma

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

$$H_I = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + D \sum S_i^2 \quad (3.1)$$

ile ifade edilir. İkinci değişken spine eşlik eden momentum değişkenidir. Momentuma karşılık gelen kinetik enerji H_K , (0, 32) aralığında, herhangi bir spin değişimi için Ising enerjideki değişime eşit olan, tamsayı değerler almaktadır. Toplam enerji ise

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

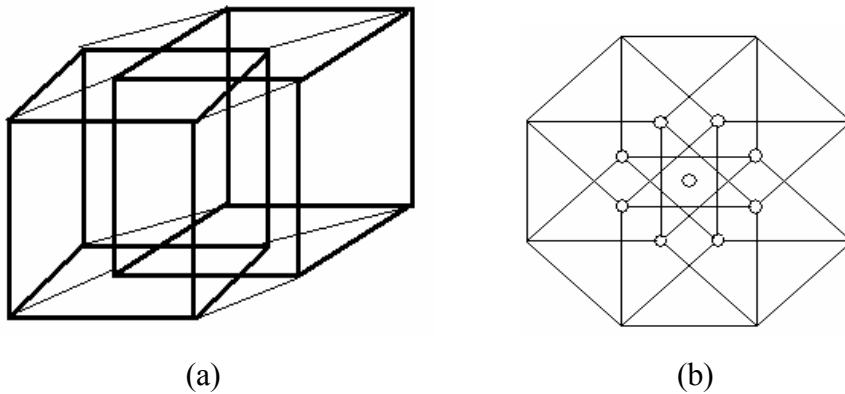
olmak üzere tüm zaman adımlarında korunur. Algoritmanın ilk adımı en düşük iç enerjili (Ising enerjisi) durumun taban durumu olarak tanımlanması ve başlangıç konfigürasyonu olarak alınmasıdır. İkinci adımda algoritma spin değişimine karar vermektedir. Bu aşamada spin konfigürasyonunun t zamanındaki H_I^t Ising enerjisi hesaplanır. Değeri değiştirilecek hücrenin spinini 1/2 olasılıkla diğer iki halden birine çevrilir ve t+1 zamanında H_I^{t+1} Ising enerjisi elde edilir. Daha sonra Ising enerjisindeki değişim, dH_I , hesaplanır. Ising enerjisindeki değişim bu hücrelerin momentum değişkenine aktarılabilir veya momentum değişkeninden alınabilecek bir değer ise ve toplam enerji korunuyorsa spin ters çevrilir ve yeni konfigürasyon kabul edilmiş olur. Buna uygun olarak momentum değiştirilir. Aksi halde spin ve momentum değiştirilmez. Bu işlem örgüdeki bütün siyah hücrelere aynı zaman adımında uygulanmaktadır. Ising enerji değişiminin, dH_I , hesaplanması aşağıdaki gibidir.

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

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

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

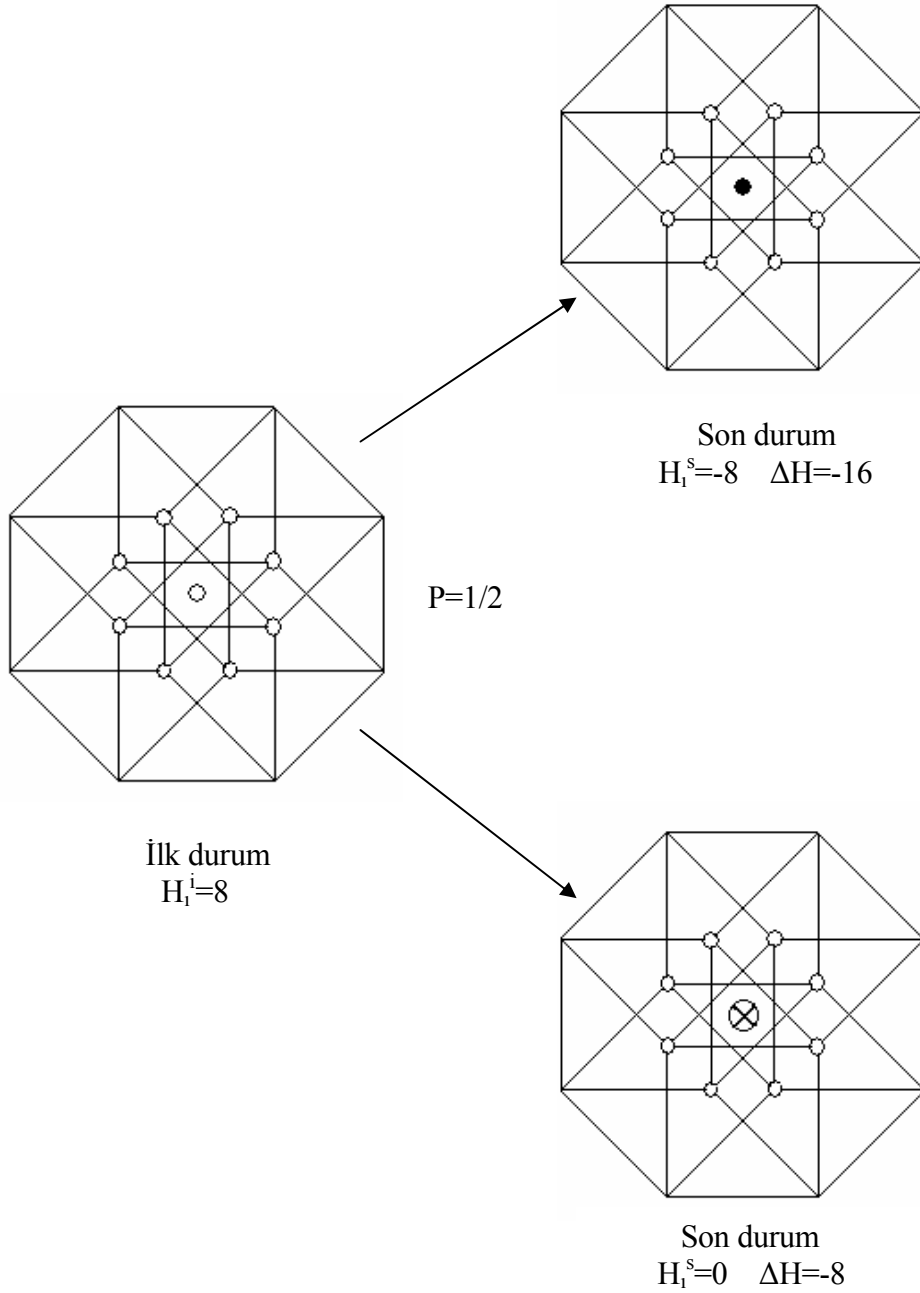
$$H_K^{t+1} = H_K^t + dH_I \quad (3.6)$$

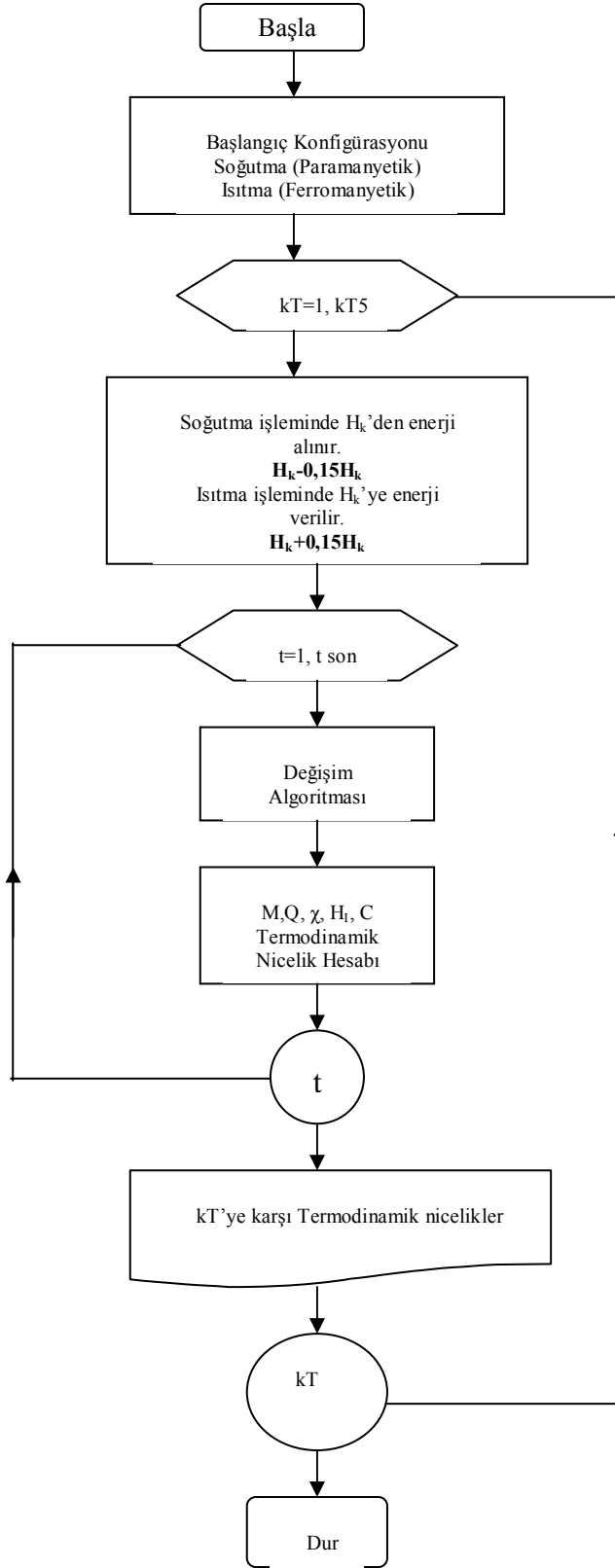


Şekil 3.1. (a): 4-boyutlu hiperküp, (b): izdüşümü

Dört boyutlu uzayda bir spin ters çevrildiğinde Ising enerjisinde meydana gelen değişim (ΔH_I) 16, 12, 8, 4, 0, -4, -8, -12, -16 değerlerini almaktadır.

Çizelge 3.1. Hiperküp örgüde merkezi bir spinin dönüşebileceği mümkün spin durumları için ΔH_I enerji değişimleri (• : $S=-1$, ° : $S=+1$, ⊗ : $S=0$)





Şekil 3.2. Soğutma ve ısıtma algoritmalarının akış diyagramı

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

$$\langle E_i \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{32} n e^{-4n\beta}}{\sum_{n=0}^{32} e^{-4n\beta}} \quad (3.7)$$

Termodinamik niceliklerin spin başına ve zaman adımı başına ortalama değerleri

$$M = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i \quad , \quad Q = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i^2 \quad (3.8)$$

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

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

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

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

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

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

ile hesap edilir.

3.2.2. Soğutma algoritması

Soğutma algoritması, başlangıç prosedürü ve ölçümlerin alınması olmak üzere iki temel bölümden oluşmaktadır. Başlangıç prosedüründe, ilk olarak örgü üzerindeki spinler modelin mutlak sıfırda sahip olduğu taban durumda alınır. İkinci adımda göz başına düşen kinetik enerji, her spin dönmesi için gerekli Ising spin enerjisindeki maksimum değişime eşit alınarak, ikinci değişken yoluyla, sisteme verilir. Bu konfigürasyon 10 000 CA (Cellular Automaton) adımı için çalıştırılır. Böylece başlangıç prosedürü tamamlanır. Soğutma işleminin ilk adımında, düzensiz yapıdaki son konfigürasyon soğutma işlemi için başlangıç konfigürasyonu olarak alınır. Soğutma işlemi boyunca enerji spin sisteminden ikinci değişken (demon) yardımıyla alınır ve T zaman adımı boyunca çalıştırılır. Demon tarafından H_k kinetik enerjili hücreden alınan enerji miktarı (soğutma hızı $\times H_k$) kadardır. Her toplam enerjiye karşılık gelen sonuç konfigürasyon bir sonraki için başlangıç teşkil eder.

İki boyutlu Blume Capel (BC) modelin cellular automaton ile incelenebilmesi için Creutz Cellular Automaton algoritmasından standart algoritma türetilmiştir. Standart algoritma $0 \leq D/J \leq 1.5$ aralığında ikinci derece faz geçişi gösterirken $D/J=2'$ de birinci derece faz geçişi sergilemiş, modeli sahip olduğu üçlü kritik nokta $1.5 < D/J < 2$ aralığında tahmin edilmiştir [97]. Bu tahmin üçlü kritik noktayı $D/J=1.98$ olarak tahmin eden MC hesaplamaları ile uyumludur [98]. 2-boyutlu spin-1 Ising model için yapılan hesaplamalar algoritmanın ikinci derece faz geçişlerini taklit etmekteki başarısını bir kez daha ortaya koymuştur [99,100]. Üç boyutlu Blume Capel için cellular automaton ile yapılan hesaplamalar ise standart algoritmanın yarı kararlı durumları üretememesinden dolayı modelin $D/J=3'$ e kadar birinci derece faz geçişlerini ikinci derece faz geçişlerinden ayırt edemediği görülmüştür [101,102]. Bu nedenle standart algoritmayı temel alan soğutma algoritması türetilmiştir.

3.2.3. Isıtma algoritması

Çift tekrarlayan faz geçişlerinde düşük sıcaklık bölgesinde görülen faz geçişlerini kolayca elde edebilmek için soğutma algoritmasından türetilen ısıtma algoritması,

başlangıç prosedürü ve ölçümlerin alınması olmak üzere iki temel bölümden oluşmaktadır. Başlangıç prosedüründe, ilk olarak örgü üzerindeki spinler modelin mutlak sıfırda sahip olduğu taban durumda alınır. İkinci adımda göz başına düşen kinetik enerji, örgü noktalarının bir kısmına ikinci değişken yoluyla rastgele dağıtılır. Bu konfigürasyon 10 000 CA (cellular automaton) adımı için çalıştırılır ve düzenli yapıda bir konfigürasyon elde edilir. Üçüncü adımda, düzenli yapıdaki son konfigürasyon ısıtma işlemi için başlangıç konfigürasyonu olarak alınır ve Isıtma işlemi boyunca enerji spin sistemine ikinci değişken (demon) yardımıyla verilir. Demon tarafından H_k kinetik enerjili hücreye verilen enerji miktarı (ısıtma hızı $\times H_k$) kadardır. t zaman adımı boyunca uygulanan ısıtma işleminin sonunda termodinamik nicelikler hesaplanır. Üçüncü değişkenden dolayı iki Cellular Automaton adımı bir Monte Carlo adımına karşılık gelir.

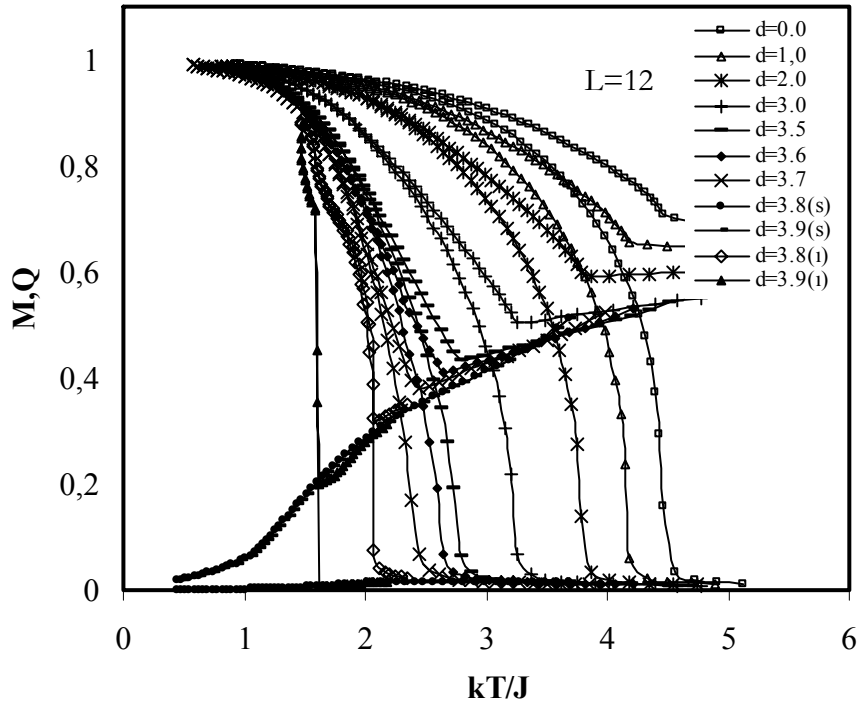
Bu çalışmada Creutz Cellular Automaton algoritmasını temel alan soğutma algoritması kullanılmıştır. Ancak kritik nokta civarında, faz geçişlerinin düşük sıcaklıkta meydana gelen kısmını daha iyi ortaya koyduğu için ısıtma algoritması ile simülasyon yinelenmiştir. Isıtma ve soğutma oranı örgünün %25'inden $0.15H_k$ kadar enerji verilmesi veya alınması suretiyle hesaplanmıştır. Isıtma hızlarının değerleri elde edilen sonuçlar referans alınan çalışmalarla uyumlu olacak şekilde seçilmiştir. Soğutma algoritmasında olduğu gibi her sonuç konfigürasyon bir sonraki için başlangıç konfigürasyonu teşkil eder.

4. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

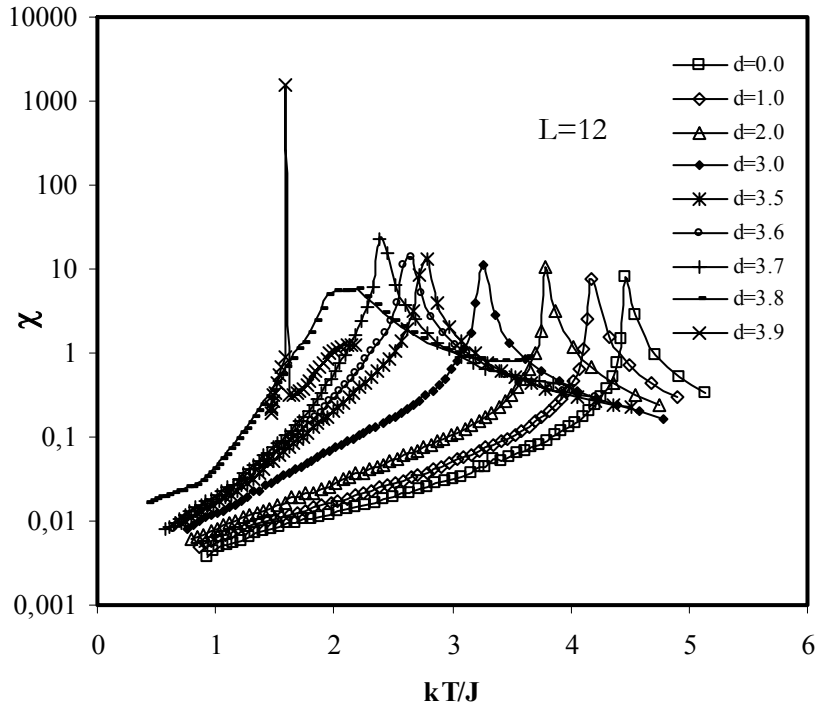
Bu çalışmada Blume-Capel (BC) modelin hamiltonyeni temel alınarak, D/J oranının farklı değerleri için “Cellular Automaton” modeli kullanılarak termodinamik niceliklerin (M, χ, C, H_1) kritik sıcaklık civarındaki davranışları incelenmiştir. Termodinamik niceliklerin kritik sıcaklık civarındaki davranışlarını karakterize eden statik kritik üsleri belirlemek amacıyla kenar uzunluğu $L=6, 8, 10, 12$ ve 14 olan sonlu ($L \times L \times L \times L$) hiperküp örgüler kullanılmıştır. Statik kritik üsler (ν, β, γ ve α) kritik nokta civarında klasik ve dört boyut için türetilen sonlu örgü ölçekleme bağıntıları kullanılarak elde edilmiş ve bu değerler evrensel değerleriyle karşılaştırılmıştır. BC model hamiltonyeniindeki bilineer etkileşme sabiti (J), ve kristal alan parametresi (D) nin belirlenen birtakım değerleri için yapılan simülasyonlar sonucunda kritik sıcaklıklar belirlenmiştir. Sonsuz örgü kritik sıcaklık değerleri Binder parametresinin sonlu örgüler için sıcaklıkla değişim eğrilerinin kesişim noktasından ve manyetik alınganlık ve öz ısının pik verdiği sıcaklık değerlerinden elde edilmiştir. Elde edilen sonsuz örgü kritik sıcaklıkları için sonlu örgü ölçekleme teorisinin manyetik alınganlık χ , öz ısı C , kendiliğinden mıknatıslanma M ifadelerinde kullanılarak ilgili statik kritik üsler belirlenmiştir. Diğer taraftan $L=12$ kenar uzunluklu örgüde $D/J=0.0, 1.0, 2.0, 3.0, 3.5, 3.6, 3.7, 3.8, 3.9$ ve 4.0 değerleri için ($kT/J, D/J$) faz diyagramı elde edilmiştir. Termodinamik nicelikler spin başına ve ilk 50 000 hariç 500 000 Cellular Automaton zaman adımı üzerinden ortalama alınarak hesaplanmıştır.

4.1. Termodinamik Niceliklerin (M, χ, C, H_1) Sıcaklıkla Değişimleri

Bu çalışmada Creutz Cellular Automaton algoritmasını temel alan soğutma algoritması kullanılmıştır. Ancak kritik nokta civarında, faz geçişlerinin düşük sıcaklıkta meydana gelen kısmı için ısıtma algoritması ile simülasyonlar yinelenmiştir.

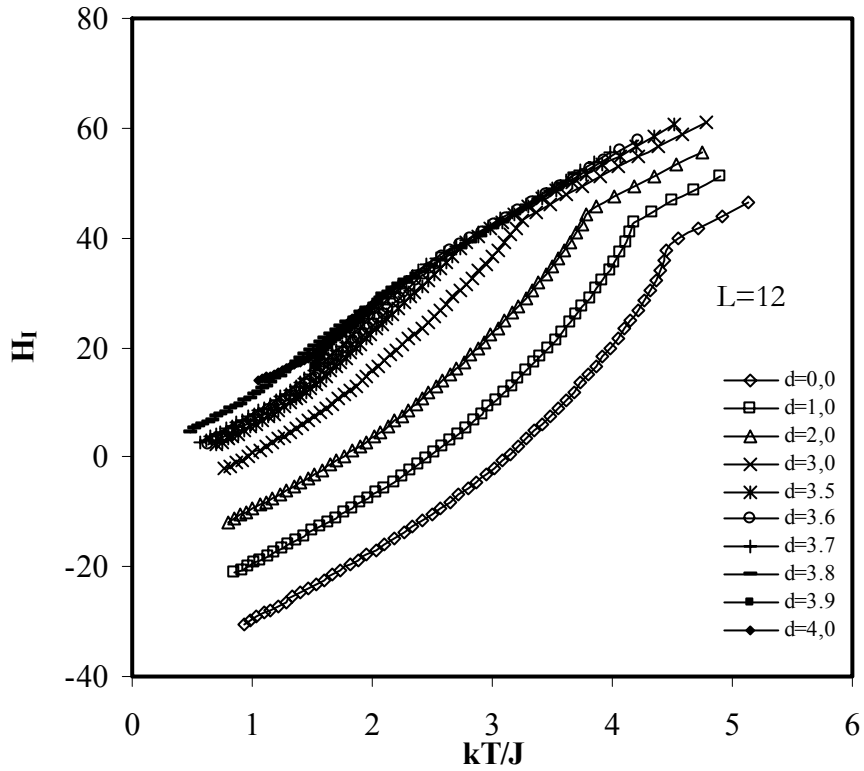


(a)

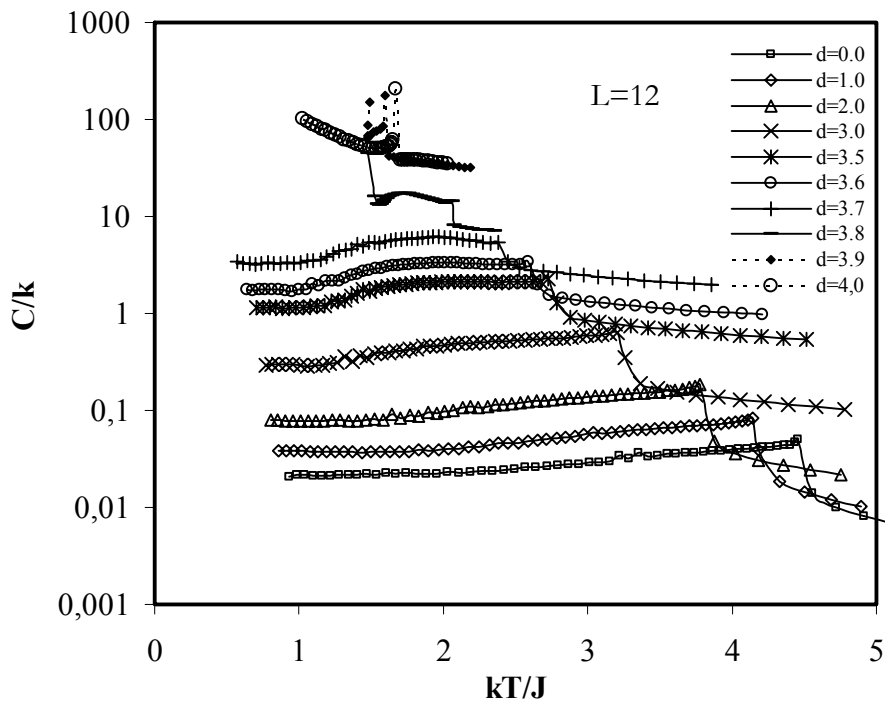


(b)

Şekil 4.1. $L=12$ kenar uzunluklu bir örgü için kristal alan parametresi d 'nin farklı değerlerinde (a) Kendiliğinden manyetizasyonun, (b) Manyetik alınganlığın sıcaklığa bağlı değişimi. s:soğutma, i:ısıtma



(a)



(b)

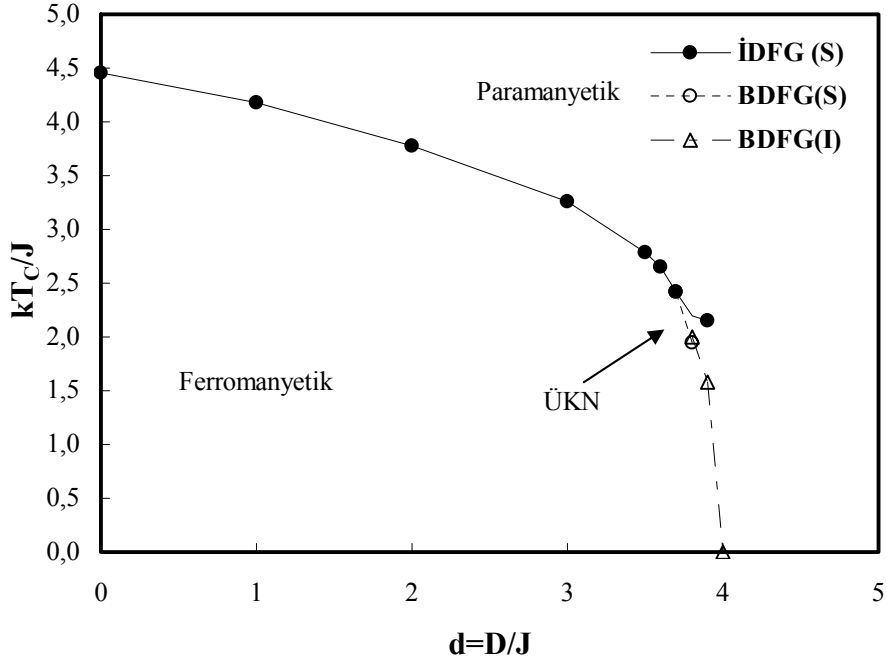
Şekil 4.2. $L=12$ kenar uzunluklu bir örgü için kristal alan parametresi d 'nin farklı değerlerinde (a) iç enerjinin, (b) özısının sıcaklığa bağlı değişimi.

Şekil 4.1 ve 4.2.'de $d=0.0, 1.0, 2.0, 3.0, 3.5, 3.6, 3.7, 3.8, 3.9$ ve 4.0 değerleri için yapılan hesaplamalar sonucunda elde edilen düzen parametreleri (M, Q), manyetik alınganlık (χ), özısı (C) ve iç enerji (H_I) nin sıcaklıkla değişimleri görülmektedir. Şekil 4.1 (a) dan görüldüğü gibi kendiliğinden manyetizasyon (M), büyüyen D/J oranları için daha düşük sıcaklıklarda sıfıra gitmektedir. Yani D/J oranı büyüdükçe kT_c/J kritik sıcaklık değerleri küçülmektedir. Şekil 4.1 (a)' dan görüldüğü gibi M ve Q düzen parametreleri $D/J=0.0, 1.0, 2.0, 3.0, 3.5$ ve 3.6 değerleri için sürekli bir davranışa sahiptir ve bu bölgede ikinci dereceden faz geçişi gerçekleşmektedir. Diğer taraftan $D/J=3.8$ değeri için süreksizlik gösteren birinci dereceden faz geçişi gerçekleşmektedir. Bu parametre değeri için manyetik alınganlık (Şekil 4.1(b)) ve özısının (Şekil 4.2 (b))keskin bir maksimum verdiği gözlenmektedir. Şekil 4.2 (a)'da ise D/J oranı arttıkça iç enerjinin arttığı görülmektedir.

Kendiliğinden manyetizasyonun hızla sıfıra gittiği sıcaklık değerlerinde manyetik alınganlığın maksimum verdiği gözlenmektedir. D/J değeri büyüdükçe maksimum değerler sola kaymakta ve pik yükseklikleri artmaktadır. Manyetik alınganlığın maksimumuna sahip olduğu değerler, farklı D/J parametreleri için kT_c/J kritik sıcaklık değerleridir.

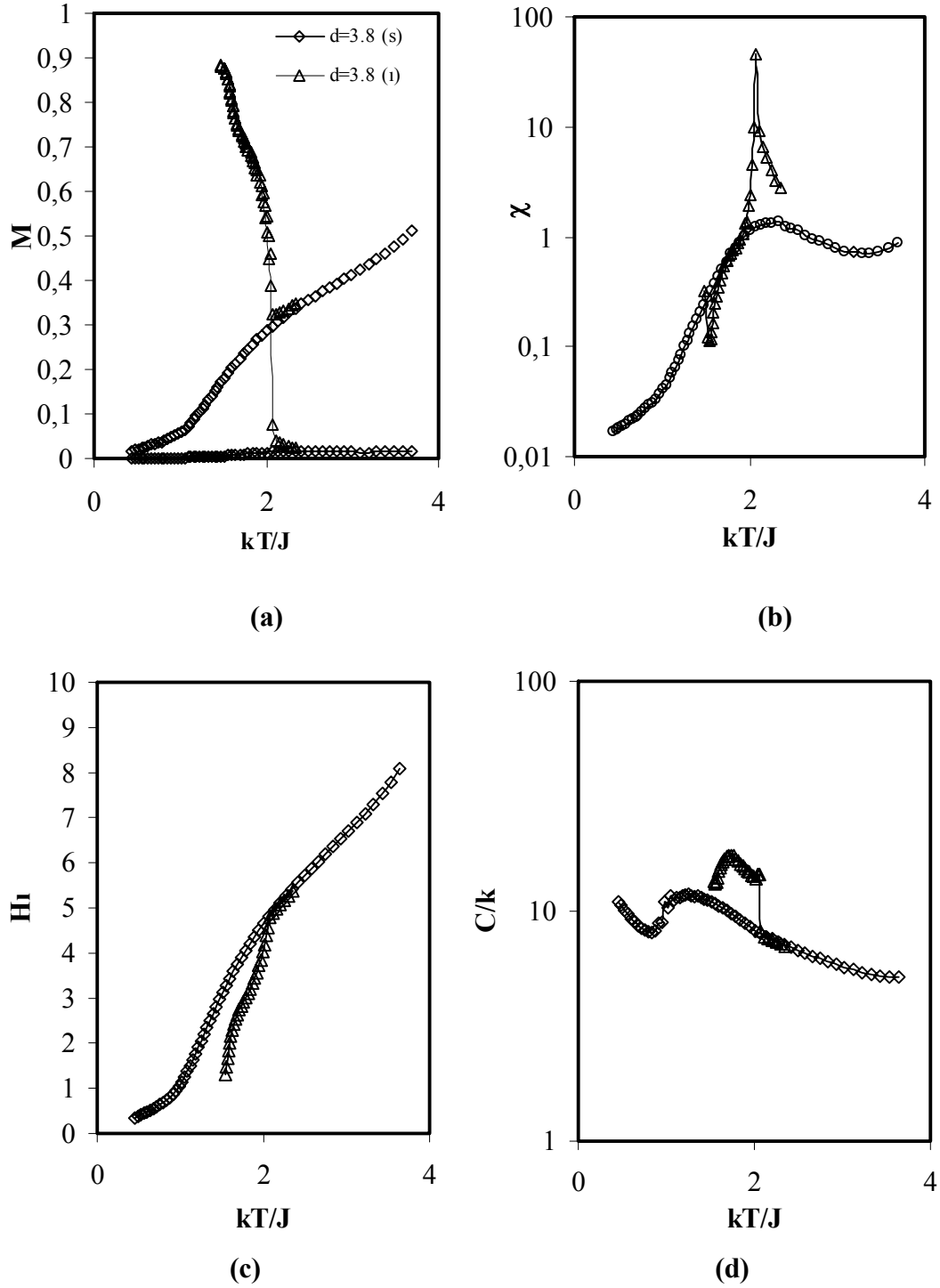
Şekil 4.3'de D/J 'nin artan değerleri için tespit edilen kritik sıcaklıklara ait faz diyagramı verilmektedir. D/J değerleri için soğutma algoritması kullanılarak yapılan simülasyonlar $D/J=4$ değeri hariç ikinci derece faz geçişi sergilemekte ancak $D/J \leq 3.7$ değerleri için ($M=0, Q \neq 0$) paramanyetizmadan ($M=Q=1$) ferromanyetizmaya ikinci derece faz geçişi oluşurken $3.7 \leq D/J < 4$ aralığında paramanyetizmadan sıfır ($M=Q=0$) düzene ikinci derece faz geçişi oluşmaktadır. Mutlak sıfırda $3.7 \leq D/J < 4$ aralığında spin sistemi sıfır fazın yanı sıra ferromanyetik düzene de sahip olabileceğinden bu aralıktaki hesaplamalar ferromanyetik düzenden başlayan ısıtma algoritması için tekrarlanmış, $D/J > 3.7$ için faz geçişlerinin ferromanyetizmadan paramanyetizmaya birinci dereceden olduğu görülmüştür. ($kT_c/J, D/J$) faz diyagramı incelendiğinde faz diyagramının $D/J=3.7$ değerinde üçlü kritik noktaya sahip olduğu görülmektedir. Bilindiği gibi faz geçiş diyagramında faz geçiş çizgisinin ikinci dereceden birinci dereceye döndüğü nokta üçlü kritik noktaya karşılık gelmektedir. Bu davranış $d < 4$

boyutta spin-1 Ising model sonuçları ile uyumludur. Faz diyagramı açıkça ferromanyetik ve paramanyetik olmak üzere iki bölgeye ayrılmaktadır.



Şekil 4.3. Soğutma ve ısıtma algoritması kullanılarak elde edilen (kT_c/J , D/J) faz diyagramı. İDFG: ikinci dereceden faz geçişi, BDFG: birinci dereceden faz geçişi, ÜKN: üçlü kritik nokta.

Şekil 4.4'e $D/J=3.8$ değeri için soğutma ve ısıtma algoritmalarından elde edilen termodinamik niceliklerle ilgili sıcaklık eğrileri görülmektedir. Şekil 4.4 (a) ve (b) 'de $D/J=3.8$ için verilen kendiliğinden mıknatıslanma ve manyetik alınganlık grafikleri incelendiğinde sistemin soğutma işlemi sırasında düzensiz fazdan (paramanyetizmadan) sıfır faza ($M=Q=0$) ikinci derece faz geçişi oluşurken, ısıtma işleminde ferromanyetizmadan ($M=Q=1$) paramanyetizmaya ($M=0, Q \neq 0$) birinci dereceden bir faz geçişinin gerçekleştiği görülmektedir. Ancak şekil 4.4 (c)' de verilen iç enerji sıcaklık eğrileri incelendiğinde düşük sıcaklık bölgesinde ferromanyetik spin sisteminin iç enerjisinin soğutma algoritmasındaki sıfır fazın iç enerjisinden daha düşük enerjiye sahip olduğu görülmektedir. Bu durum ferromanyetik düzenin sıfır faza göre sistem tarafından daha çok tercih edileceğini ve dolayısıyla $D/J>3.7$ için birinci derece faz geçişlerinin daha büyük olasılıkla oluşacağını göstermektedir. Diğer taraftan, $D/J=3,8$ için farklı örgüler için soğutma algoritması ile yapılan simülasyonlarda da birinci ve ikinci derece faz geçişi görülmektedir.



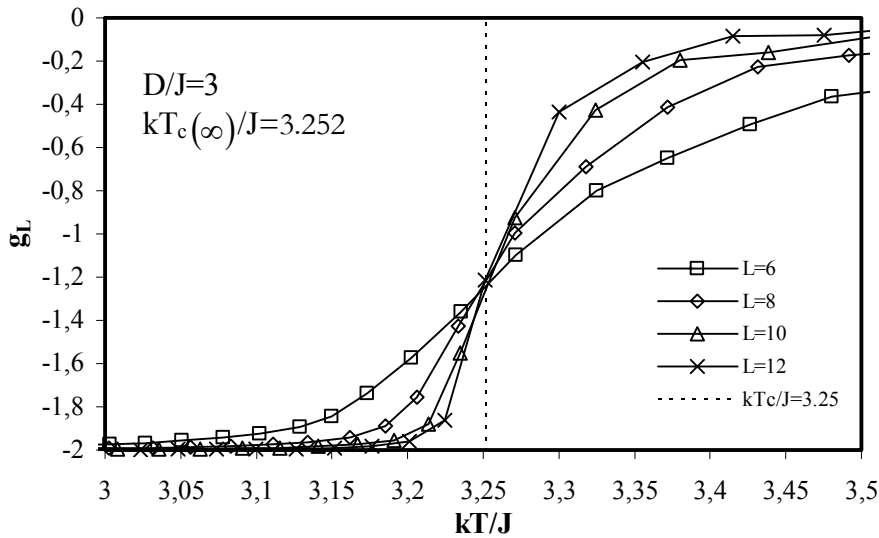
Şekil 4.4. $D/J=3.8$ için soğutma(s) ve ısıtma(i) algoritmaları kullanılarak elde edilen (a) kendiliğinden manyetizasyon, (b) manyetik alınganlık (c) iç enerji, (d) özısının sıcaklığa bağlı değişimi.

Birinci derece faz geçişlerinde iç enerjinin $T < T_c$ için değerleri ikinci derece faz geçişindekinden daha küçüktür. Bu durum ısıtma ve soğutma algoritmasında karşılaştırmayla uyuşmaktadır. Modelin $D/J=3.8$ için birinci ve ikinci derece faz geçişini birlikte gösterebilmesi bu noktanan üçlü kritik nokta olduğunu işaret etmektedir. Bu yüzden $(kT_c/J, D/J)$ faz diyagramında $D/J \geq 3.8$ için ısıtma algoritması kullanılarak yapılan simülasyonlar sonucunda elde edilen kritik sıcaklık değerleri yerleştirilmiştir.

4.2. Statik Kritik Üsler

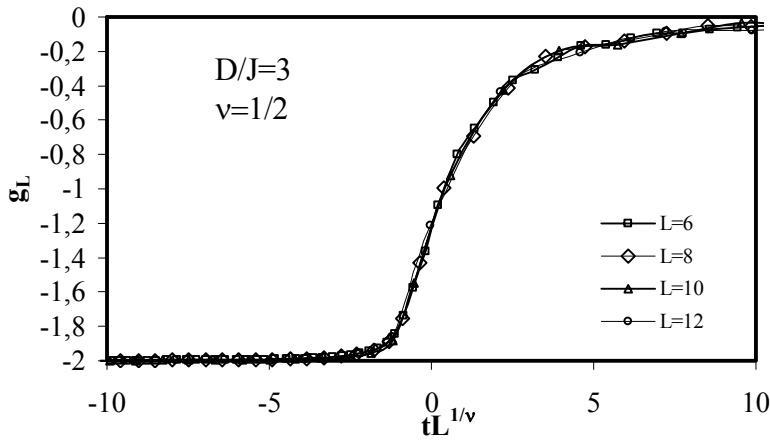
$D/J < 3.7$ bölgesinde modelin evrenselliğini belirlemek amacı ile $L=6, 8, 10$ ve 12 örgü uzunlukları için $D/J=3$ değerinde yapılan simülasyonlar sonucu termodinamik niceliklerin sıcaklığa bağlı değişimleri elde edilmiş, klasik ve logaritmik sonlu örgü ölçekleme bağıntıları kullanılarak statik kritik üs değerleri belirlenmiştir. $D/J=3$ kristal alan parametresi için termodinamik nicelikler ikinci derece faz geçişi sergilemektedir.

Şekil 4.5’de Binder parametresi (g_L) nin sıcaklığa karşı değişimi görülmektedir. Farklı örgü büyüklükleri ($L=6,8,10,12$) için çizilen g_L eğrileri belirli bir noktada kesişmekte, o noktadan sonra ise birbirinden uzaklaşmaktadır. Eğrilerin kesiştikleri nokta sonsuz örgü için kritik sıcaklık $(kT_c(\infty)/J)=3.25$ değerine karşılık gelmektedir .

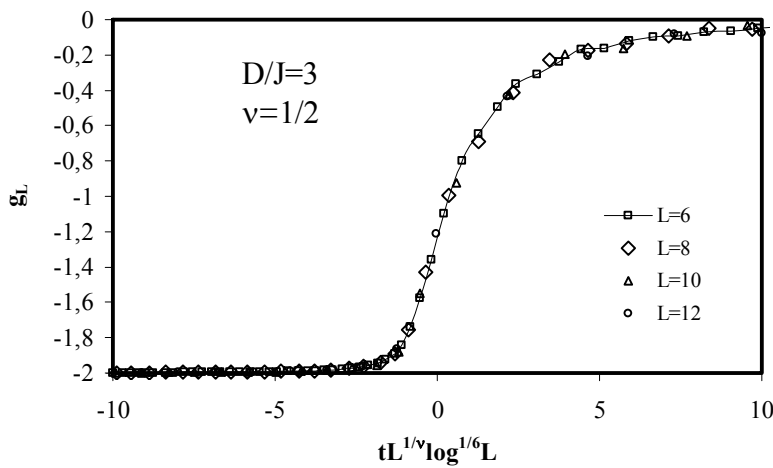


Şekil 4.5. Binder parametresi (g_L) nin sıcaklığa karşı değişimi.

$D/J=3.0$ değeri için Binder parametresi klasik ve logaritmik düzeltmeli sonlu örgü ölçekleme bağıntıları ile ölçeklendiğinde $\nu=0.5$ değeri için farklı örgülerde elde edilen g_L eğrileri bir doğruya uymaktadır. Binder parametresi klasik sonlu örgü ölçekleme bağıntıları ile $\nu=0.5$ değeri için yapılan ölçekleme sonucu Şekil 4.6 (a)'da ve Binder parametresi için boyuta bağlı logaritmik düzeltmeler içeren sonlu ölçekleme bağıntısı kullanılarak yapılan ölçekleme sonucu Şekil 4.6 (b)'de görülmektedir. Ölçekleme için yapılan teşebbüsler en iyi ölçeklemenin $\nu=0.5$ değerinde gerçekleştiğini göstermiştir. ν için elde edilen bu değer evrensel sonuç olarak beklenen $\nu=1/2$ değeri ile büyük bir uyum içindedir.



(a)

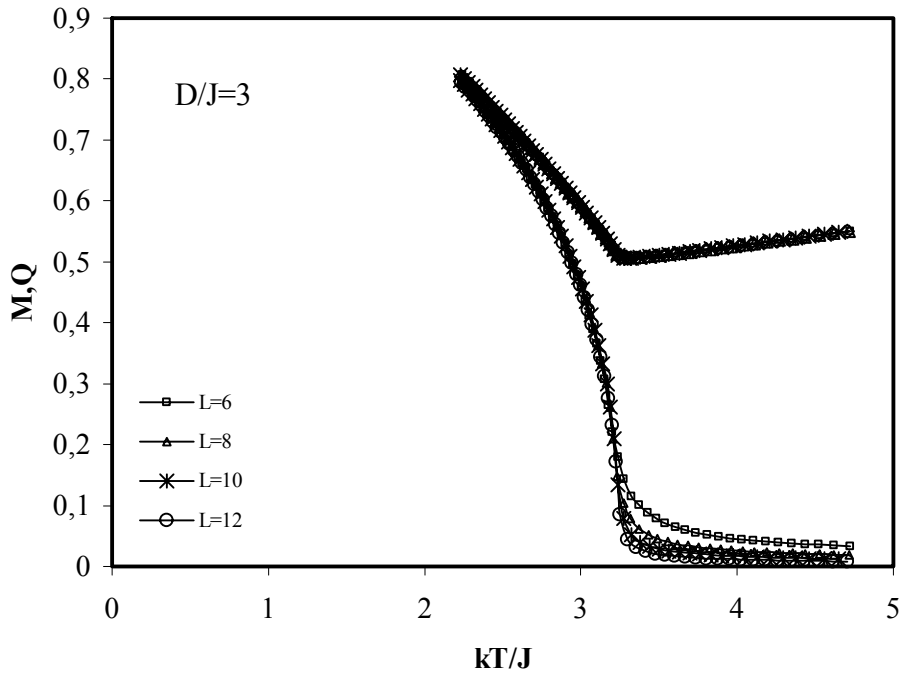


(b)

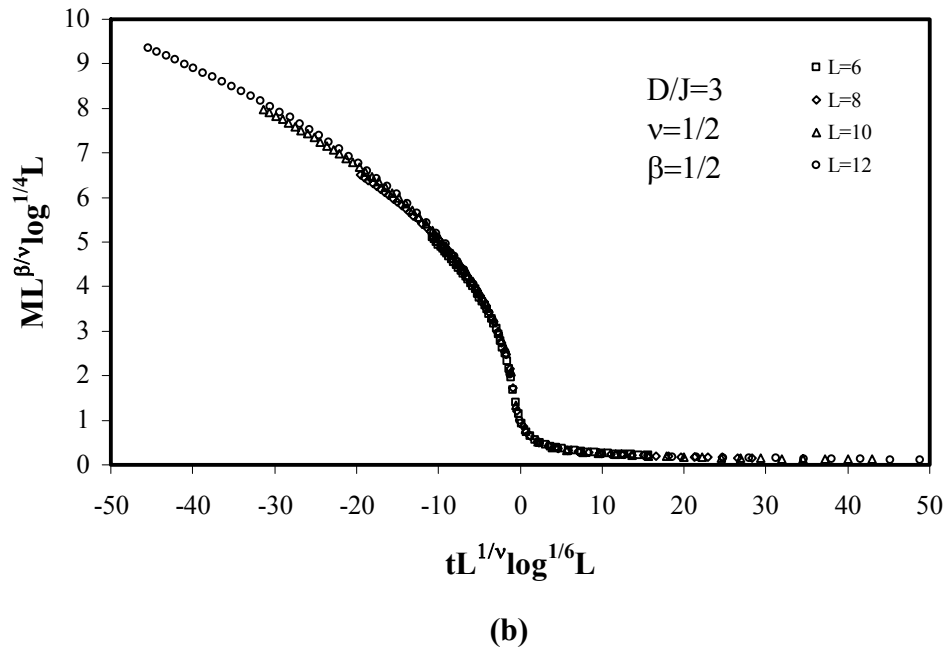
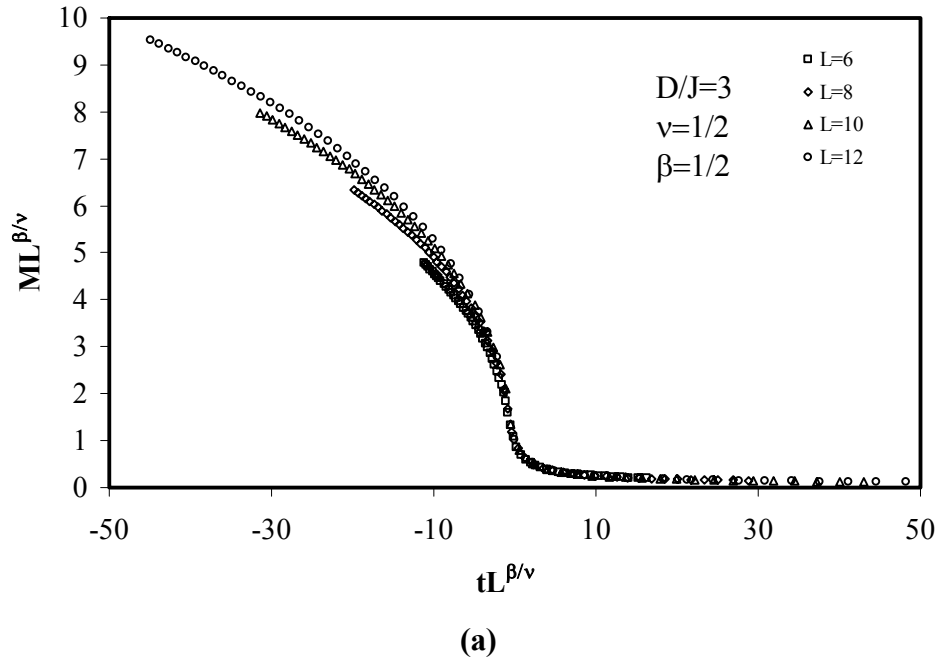
Şekil 4.6. Binder parametresinin (a)klasik ölçekleme (b)logaritmik düzeltmeli ölçekleme bağıntıları ile ölçeklenmiş sıcaklığa bağlı değişimi.

Şekil 4.7 $L=6, 8, 10$ ve 12 kenar uzunluğuna sahip $d=4$ boyutlu örgüde kendiliğinden manyetizasyonun sıcaklığa bağlı değişimini göstermektedir. Şekilde örgü kenar uzunluğuna bağlı olarak kritik sıcaklık bölgesinde düzen parametresi daha hızlı sıfıra gitmekte, sistem $M=Q=1$ ferromanyetik düzenden $M=0, Q \neq 0$ paramanyetik düzene ikinci derece faz geçişi sergilemektedir. Şekil 4.8 (a) da düzen parametresi klasik ölçekleme bağıntısı kullanılarak β değeri için evrensel değer olan 0.5 alınarak ölçeklenmiştir. Şekil 4.8 (b)'de ise logaritmik düzeltmeli ölçekleme bağıntısı kullanılarak, $\beta=0.5$ değeri için ölçeklenmiştir. Her iki şekil karşılaştırıldığında dört boyutlu örgü için logaritmik düzeltmeli sonlu örgü ölçekleme bağıntısına göre düzen parametresinin düşük sıcaklık bölgesinde tek bir eğriye uyduğu, klasik ölçekleme bağıntısına göre daha iyi ölçeklendiği görülmektedir.

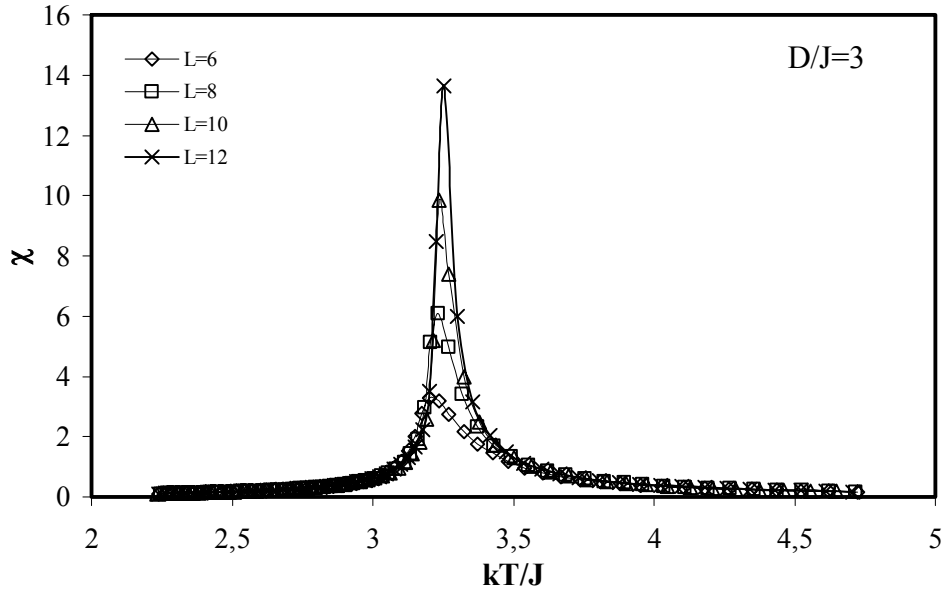
Burada β kendiliğinden mıknatıslanma kritik üssü olarak adlandırılmakta ve evrensel değeri iki boyutlu Ising model için $\beta=0.125$, üç boyutlu Ising model için $\beta=0.30$ ve dört boyutlu Ising model için $\beta=0.50$ [29] olarak verilmektedir. Bu çalışmada logaritmik düzeltmeli ölçekleme bağıntısından bulunan β değeri evrensel değerle uyumaktadır.



Şekil 4.7. $L=6,8,10$ ve 12 kenar uzunluklarına sahip hiperküp örgü için kristal alan parametresi d 'nin sıcaklığa bağlı değişimi.



Şekil 4.8. Kendiliğinden manyetizasyonun (a)klasik ölçekleme, (b) logaritmik düzeltmeli ölçekleme bağıntıları ile ölçeklenmiş sıcaklığa bağlı değişimi.

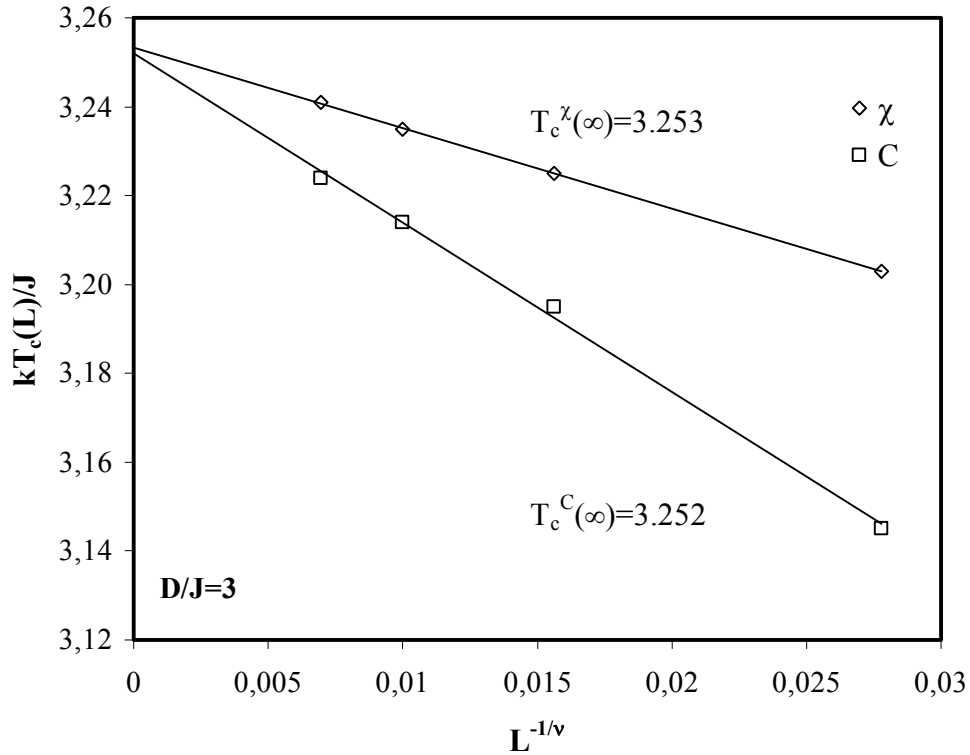


Şekil 4.9. Manyetik alınganlığın sıcaklığa bağlı değişimi.

$L=6, 8, 10$ ve 12 kenar uzunluklarına sahip sonlu hiperküp örgülerde mıknatıslanmanın dalgalanmaları kullanılarak hesaplanan manyetik alınganlığın sıcaklığa bağlı değişim eğrileri Şekil 4.9'da verilmiştir. Şekil 4.9'dan açıkça örgü kenar uzunluğu L büyüdükçe manyetik alınganlığın pik değerinin beklendiği gibi büyüdüğü ve piklerin oluştuğu sıcaklık değerinin sola doğru kaydığı görülmektedir. Her bir örgü için manyetik alınganlık maksimumlarına karşılık gelen sıcaklık değeri o örgünün $T_c(L)$ kritik sıcaklık değerini verir. Sonlu örgü kritik sıcaklıklardan sonsuz örgü kritik sıcaklık değeri $d \geq 4$ için,

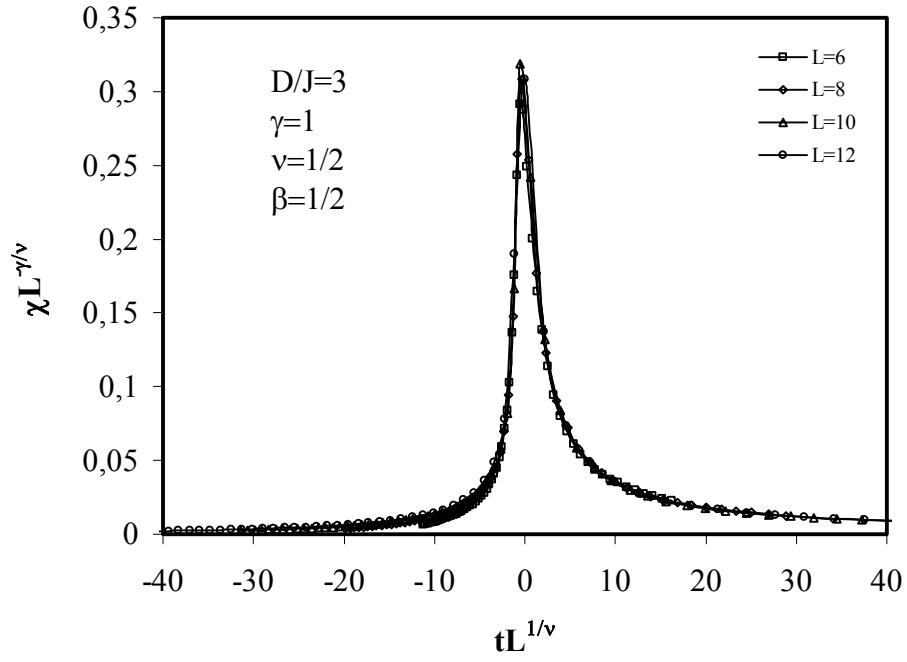
$$T_c(L) = T_c(\infty) + aL^{-1/\nu}$$

ifadesine göre $T_c(L)$ 'nin $L^{-1/\nu}$ grafiğinde $L \rightarrow \infty$ için ekstrapolasyon yapılarak $T_c^\infty = 3.253$ elde edilmiştir (Şekil 4.10). Manyetik alınganlığın pik verdiği kritik sıcaklık değerlerinde elde edilen sonsuz örgü kritik sıcaklık değeri Binder parametresinden elde edilen ile büyük bir uyum içindedir.

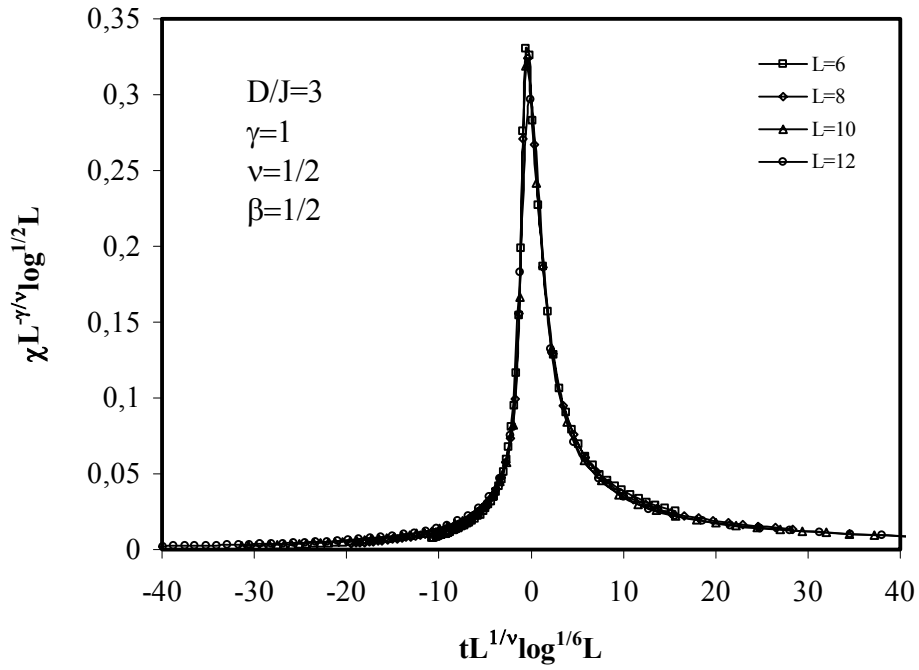


Şekil 4.10. $D/J=3$ için $T_c^C(L)$ ve $T_c^{\chi}(L)$ 'nin $1/L$ 'ye karşı grafiği.

Şekil 4.11 (a) ve (b)'de $D/J=3$ için sonlu örgülerde hesaplanan manyetik alınganlık eğrilerinin klasik ölçekleme ve logaritmik düzeltmeli ölçekleme bağıntılarına göre sonsuz örgü kritik sıcaklık değerinde $\gamma = 1$ ve $\nu=0.5$ kritik üs değerleri için ölçekleme grafikleri verilmiştir. Bu eğriler incelendiğinde evrensel kritik üs değerleri için logaritmik ölçekleme bağıntısına göre çizilen eğrilerin $t=0$ civarında klasik ölçeklemeye göre daha iyi üst üste geldiği yani tek bir eğriye uyduğu görülmektedir. Manyetik alınganlık kritik üssü γ iki boyutlu Ising model için $\gamma = 1.75$, üç boyutlu Ising model için $\gamma = 1.25$ ve dört boyutlu Ising model için $\gamma = 1.00$ [29] evrensel değerlere sahiptir. Manyetik alınganlık için boyuta bağlı logaritmik düzeltme içeren sonlu ölçekleme bağıntısı kullanılarak yapılan ölçekleme $\gamma=1$ ve $\nu=0.5$ değerleri için şekil 4.11 (b)'de görülmektedir. Farklı örgüler için çizilen eğriler bir doğruya uymaktadır. γ için elde edilen bu değer evrensel sonuç olarak beklenen $\gamma = 1$ değeri ile uyum göstermektedir.

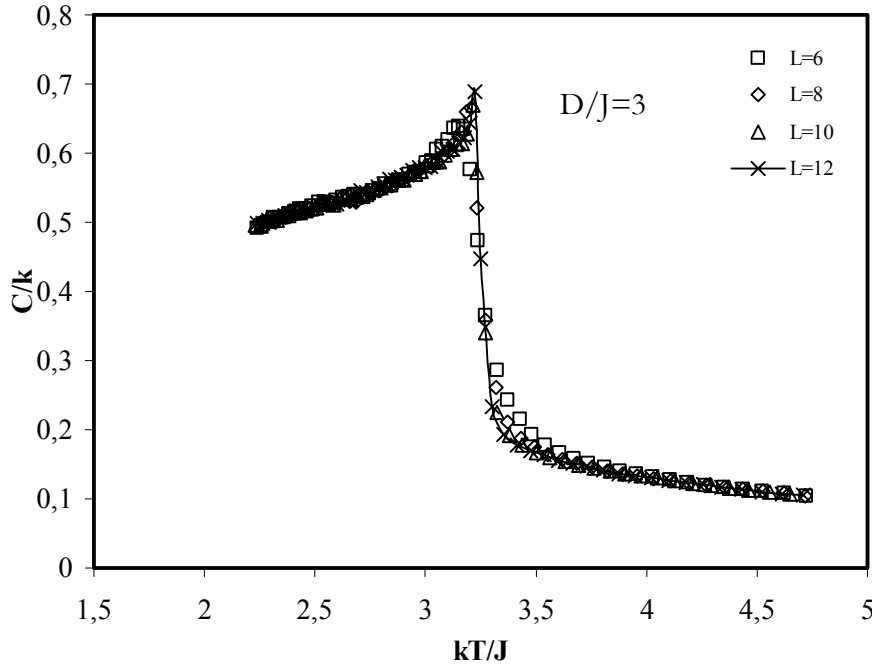


(a)



(b)

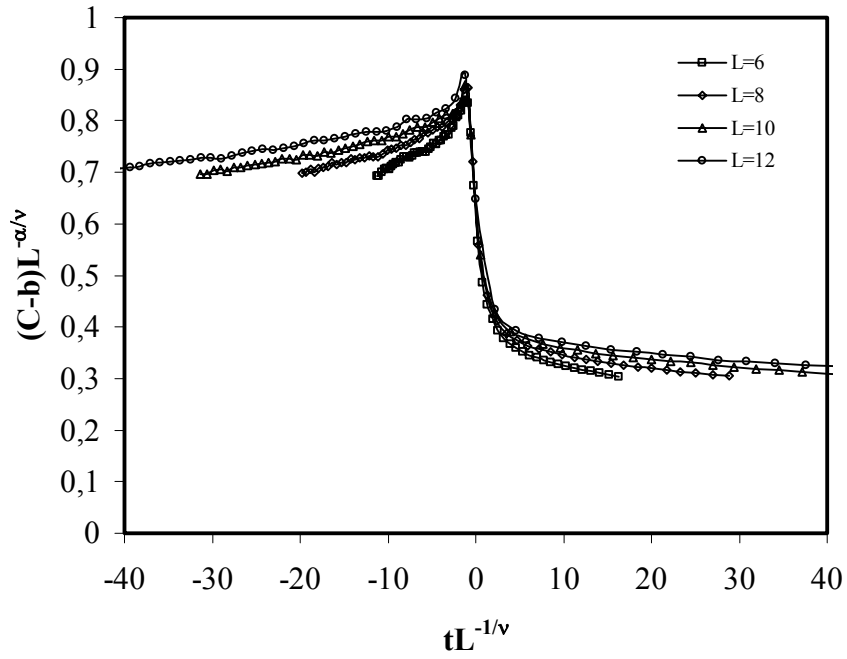
Şekil 4.11. (a) $L=6, 8, 10$ ve 12 örgülerde klasik ölçekleme, (b) Logaritmik düzeltmeli ölçekleme bağıntıları ile ölçeklenmiş manyetik alınganlık değişimleri.



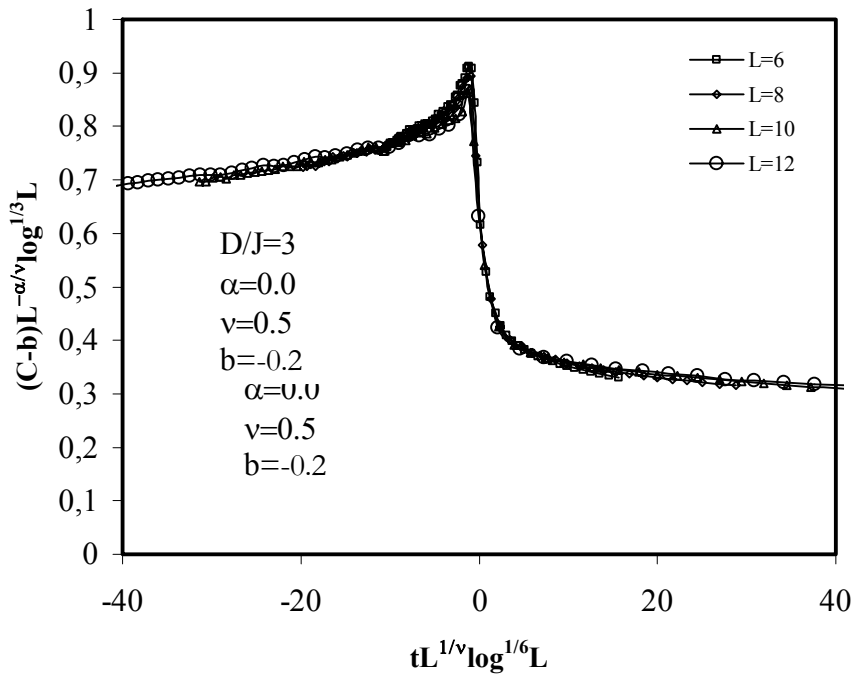
Şekil 4.12. $D/J=3$ parametresi için sonlu örgülerde ($L=6, 8, 10$ ve 12) özısının sıcaklıkla değişim eğrileri.

Şekil 4.12’de sonlu kenar uzunluklu hiperküp örgüler için $D/J=3$ kristal alan parametre değeri için özısının sıcaklıkla değişim eğrileri verilmektedir. Bu eğriler özısı üzerinde örgü etkisinin kritik sıcaklık civarında örgü ile birlikte büyümesi ve piklerin oluştuğu sıcaklıkların artması şeklinde ortaya çıktığını göstermektedir. Özısı piklerinin oluştuğu sıcaklık değerleri $T_c^c(L)$ ’lerin $L^{-1/\nu}$ ’ye göre grafiğinin sonsuza ekstrapolasyonu sonsuz örgü kritik sıcaklığı olarak $T_c^c(\infty)=3.252$ değerini vermektedir (Şekil 4.12). Elde edilen bu değer manyetik alınganlıktan ve Binder parametresinde elde edilen değer ile büyük bir uyum içindedir.

$D/J=3$ için $\alpha=0$ ve $\nu=0.5$ evrensel kritik üs değerleri kullanılarak $b=-0.2$ düzeltme parametrelili özısının klasik ve logaritmik düzeltmeli ölçekleme bağıntıları ile ölçeklenmiş eğrileri Şekil 4.13’te verilmektedir. Şekilde $d=4$ için evrensel kritik üs değerleri için klasik ölçekleme bağıntılarına göre (Şekil 4.13 (a)) logaritmik düzeltmeli ölçekleme bağıntıları ile ölçeklenmiş (Şekil 4.13 (b)) özısı değerlerinin daha iyi bir şekilde tek bir eğriye uyduğu görülmektedir.



(a)



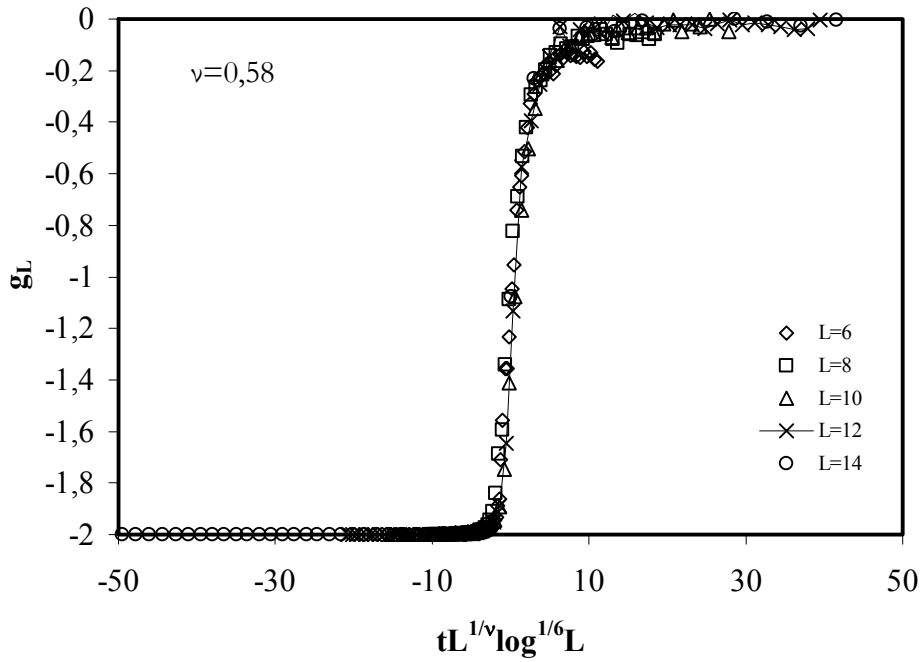
(b)

Şekil 4.13. $L=6, 8, 10$ ve 12 örgüleri için $D/J=3$ noktasında hesaplanmış özısının (a)Klasik ölçekleme, (b)Logaritmik düzeltmeli ölçekleme bağıntıları ile ölçeklenmiş sıcaklığa bağlı değişim eğrileri.

$D/J=3$ deęerinde Blume-Capel model iin Binder parametresi (g_L), mıknatıslanma (M), manyetik alınganlık (χ) ve özısı (C)'nın klasik ve logaritmik dzeltmeli lekleme baęıntıları kullanılarak yapılan leklemeler $d=4$ boyutta spin-1/2 Ising model iin verilen logaritmik dzeltmeli lekleme baęıntılarının spin-1 (Blume-Capel) Ising model iinde geerli olduęunu gstermiřtir. Elde edilen statik kritik sler $d=4$ boyutta Ising model iin beklenen evrensel deęerler ($\alpha=0$, $\nu=0.5$, $\beta=0.5$, $\gamma=1$) ile uyum iindedir.

4.3. Üçlü Kritik Nokta Civarı $D/J=3.7$ için Statik Kritik Üslerin Belirlenmesi

$(kT_c/J, D/J)$ faz uzayında belirlenen üçlü kritik nokta $D/J=3.7$ değeri için $L=6, 8, 10, 12$ ve 14 örgü uzunlukları için yapılan simülasyonlar sonucu termodinamik niceliklerin sıcaklığa bağlı grafikleri çizilmiş, logaritmik sonlu örgü ölçekleme bağıntıları kullanılarak statik kritik üs değerleri belirlenmiştir.

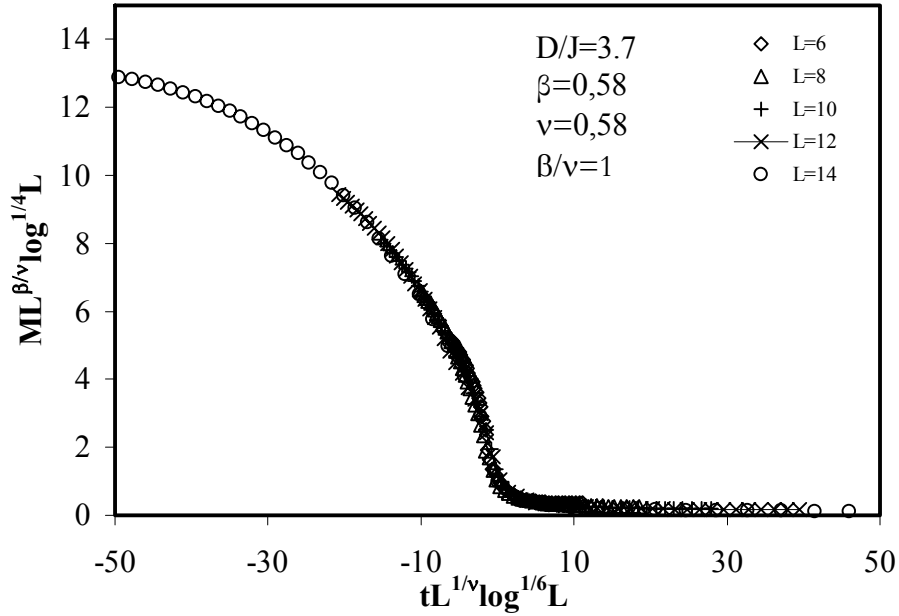


Şekil 4.14. Binder parametresinin logaritmik düzeltmeli ölçekleme bağıntıları ile ölçeklenmiş sıcaklığa bağlı değişimi.

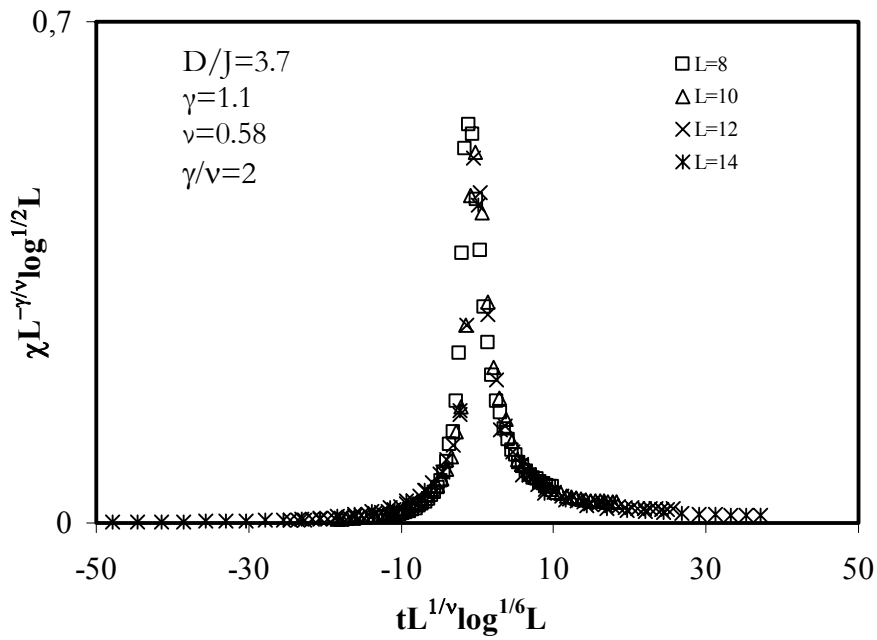
Binder parametresi için boyuta bağlı logaritmik düzeltmeler içeren sonlu ölçekleme bağıntısı kullanılarak yapılan ölçekleme sonucu Şekil 4.14 'de verilmektedir. Ölçekleme için yapılan teşebbüsler en iyi ölçeklemenin $v=0.58$ değerinde gerçekleştiğini göstermiştir. Sonuç olarak v için elde edilen bu değer evrensel $v=1/2$ değeri ile uyuşmamakla birlikte üçlü kritik nokta için korelasyon uzunluğu kritik üssü değeri $v=0.58$ dir.

Şekil 4.15 $D/J=3.7$ değeri için $L=6,8,10,12$ ve 14 kenar uzunluğuna sahip örgülerde kendiliğinden manyetizasyonun logaritmik düzeltme içeren sonlu örgü ölçekleme bağıntısı kullanılarak yapılan ölçekleme sonucunu göstermektedir. Burada $\beta/v=1$ değeri

için tüm eğrilerin bir doğru üzerinde toplandığı görülmektedir. $\beta/\nu=1$ ve $\nu=0.58$ için düzen parametresinin sonlu örgülerdeki değerlerin ölçeklenmiş üçlü kritik noktada M 'nin kritik üssünün $\beta=0.58$ olduğunu gösterir.

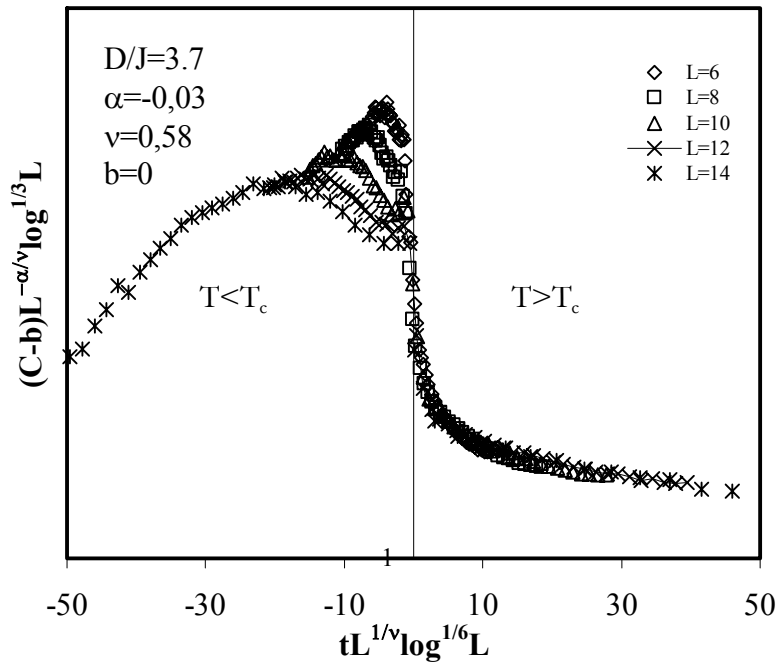


Şekil 4.15. Kendiliğinden manyetizasyonun logaritmik düzeltmeli ölçekleme bağıntıları ile ölçeklenmiş sıcaklığa bağlı değişimi.



Şekil 4.16. Manyetik alınganlığın logaritmik düzeltmeli ölçekleme bağıntıları ile ölçeklenmiş sıcaklığa bağlı değişimi.

Şekil 4.16'da $D/J=3.7$ parametresi için $L=8, 10, 12$ ve 14 kenar uzunluklu sonlu örgülerde hesaplanmış manyetik alınganlık sıcaklık eğrilerinin $\gamma/v=2$ ve $v=0.58$ değerleri ile ölçeklenmiş eğriler görülmektedir. Yapılan ölçekleme teşebbüsleri en iyi ölçeklemenin $\gamma/v=2$ değerinde gerçekleştiğini göstermiştir. γ/v için elde edilen bu değer üçlü kritik noktada γ için 1.16 değerini verir.



Şekil 4.17. Özısının logaritmik düzeltmeli ölçekleme bağıntıları ile ölçeklenmiş sıcaklığa bağlı değişimi.

$L=6, 8, 10, 12$ ve 14 kenar uzunluklu sonlu örgülerde hesaplanan özısı sıcaklık eğrilerinin $\alpha=0.03$ ve $v=0.58$ değeri için ölçeklenmiş eğrileri Şekil 4.17'de verilmiştir. Şekilden açıkça görüldüğü gibi özısı eğrileri $T > T_c$ bölgesinde bu statik kritik üs değerleri için iyi bir şekilde ölçeklenirken $T < T_c$ sıcaklık bölgesinde ölçeklenmemektedir. $T < T_c$ bölgesinde T_c 'ye yakın sıcaklıklarda ölçeklemenin oluştuğu bir parametre bulunmamıştır.

Üçlü kritik noktada özısı için $\alpha=0.03$, düzen parametresi $\beta=0.58$, manyetik alınganlık için $\gamma=1.16$ ve korelasyon uzunluğu için $v=0.58$ olarak elde edilen statik kritik üs değerleri üçlü kritik noktada kritik davranışın evrensel davranışa uymadığı $D/J=3$ 'te olduğu gibi kendine özgü bir kritik davranış sergilediğini göstermektedir.

5. TARTIŞMA

Bu çalışmada dört boyutta en yakın komşu spin etkileşmeli ferromanyetik Blume Capel modelin kritik davranışı Creutz Cellular Automaton algoritmasından geliştirilen bir algoritma kullanılarak incelenmiştir. Hesaplamalar dört boyutlu hiperküp örgülerde $L \times L \times L \times L$; $L=6, 8, 10, 12, 14$ için gerçekleştirilmiş ve sonsuz örgü davranışı sonlu örgü ölçekleme teorisi yardımıyla belirlenmiştir. İkinci derece faz geçiş bölgesinde seçilen $D/J=3$ parametre değeri için $d=4$ boyutta evrensel kritik üsler kullanılarak yapılan ölçekleme teşebbüsleri klasik ölçekleme bağıntılarına göre termodinamik niceliklerin ölçeklenmediğini göstermiştir. Diğer taraftan logaritmik düzeltmeli ölçekleme bağıntıları ile farklı örgülerde hesaplanan termodinamik niceliklerin sıcaklık değişimleri tek bir eğriye uymaktadır. Bu sonuç spin-1/2 Ising model için verilen logaritmik düzeltmeli ölçekleme bağıntılarının spin-1 Ising model için de geçerli olduğunu ortaya koymaktadır. Spin-1 Ising modelin $(kT_c/J, D/J)$ faz uzayı, $L=12$ kenar uzunluğuna sahip 4-boyutlu sonlu hiperküp örgüde $0 < D/J < 4$ parametre aralığında değişen D/J değerleri için ısıtma ve soğutma algoritmaları ile yapılan simülasyonlarda manyetik alınganlık ve öz ısı maksimumlarına karşılık gelen sıcaklıklar kullanılarak çizilmiştir. 4-boyut için elde edilen $(kT_c/J, D/J)$ faz uzayı modelin 3- boyutta olduğu gibi üçlü kritik noktaya $(D/J=3.8)$ sahip olduğunu göstermiştir.

Çizelge 5.1. D/J parametrelerinin 3 ve 3.7 değerleri için statik kritik üsler ve sonsuz örgü kritik sıcaklığı

D/J	α	β	γ	ν	$kT_c(\infty)/J$
3	0	1/2	1	1/2	3.252
3.7 (ÜKN)	0.03	0.58	1.16	0.58	2.381
Evrensel değerler	0	1/2	1	1/2	-----

Termodinamik niceliklerin kritik sıcaklık civarındaki davranışlarını karakterize eden statik kritik üslerin (ν , β , γ , α) ikinci derece faz geçişi sergileyen bölgede $D/J=3$ için sonlu örgü ölçekleme teorisi kullanılarak tespit edilen değerleri 4- boyutlu Ising modelin evrensel davranışını belirleyen $\nu=0.5$, $\beta=0.5$, $\gamma=1$ ve $\alpha=0$ değerleri ile uyum içerisindedir. $D/J=3.7$ için elde edilen kritik üsler, kritik davranışın D/J 'ye bağlı olarak değiştiğini, faz uzayındaki üçlü kritik nokta civarında modelin evrensel davranışla uyumlu olmadığını göstermiştir.

KAYNAKLAR

1. Onsager, L., "Crystal statistics I.A two dimensional model with an order-disorder transition", *Phys. Rev.*, 65:117-149 (1944).
2. Blume, M., Emery, V.J., Griffiths, R.B., "Ising model for the λ transition and phase separation in He³-He⁴ mixtures", *Phys. Rev. A.*, 4: 1071-1077 (1971).
3. Lajzerowicz J., Sirardiere J., "Spin-1 lattice-gas model. I. condensation and solidification of a simple fluid", *Phys. Rev. A.*, 11, 2079-2089 (1975).
4. Sivardière J., Lajzerowicz J., "Spin-1 lattice gas model. I. condensation and phase separation in a binary fluid", *Phys. Rev. A.*, 11: 2090-2100 (1975).
5. 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 (GaAs)_{1-x}Ge_{2x} alloys", *Phys. Rev. B.*, 27: 7495-7508 (1983).
7. Wolfram, S., "Statistical mechanics of Cellular Automata", *Reviews of Modern Physics*, 55: 601-621(1983).
8. Wolfram, S., "Universality and complexity in Cellular Automata", *Physica D.*, 10: 1-57(1984).
9. Vichniac, G.Y., "Simulating physics with Cellular Automata", *Physica D.*, 10: 96-116(1984).
10. Pomeau, Y., "Invariant in Cellular Automata", *J. Phys.A: Math. Gen.*, 17: L415-425(1984).
11. Herrmann, H.J., "Fast algorithm for the simulation of Ising model", *J. of Stat. Phys.*, 45: 145-170(1986).
12. Herrmann, H.J., Carmesin, H.O. and Stauffer D., "Periods and clusters in Ising Cellular Automata", *J. Phys. A:Math. Gen.*, 20: 4939-4941(1987).
13. Creutz, M., "Deterministic Ising dynamics", *Annals of Physics*, 167: 62-89(1986).
14. Kutlu, B., "İki boyutlu Ising modelin Creutz Cellular Automaton ile incelenmesi", Doktora Tezi, *Gazi Ünv. Fen Bilimleri Enstitüsü*, Ankara, 37-38 (1995).
15. 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).

16. Aktekin, N., “The simulation of the Ising model on Creutz Cellular Automaton”, annual reviews of computational physics VII, ed. D. Stauffer (World Scientific, Singapore), pp. 1-23., (2000).
17. Kutlu, B., Kasap, M., Turan, S., “The Simulation of the two-dimensional Ising model in presence of an external magnetic field on the Creutz Cellular Automaton”, *Int. J. Mod. Phys C.*, 11:561-572 (2000).
18. Kutlu, B., “The Simulation of the 2D ferromagnetic Blume-Capel model on a Cellular Automaton, *Int. J.of Mod.Phys. C.*,12: 1401-1413(2001).
19. Kutlu, B., “The Simulation of 2D Spin-1 IsingModel with the bilinear and positive biquadratic interaction on a Cellular Automaton”, *Int. J. of Mod. Phys. C.*, 10:1305-1320 (2003).
20. Solak, A., Kutlu, B., “The critical behavior of the 2D Ising model with the bilinear and positive biquadratic nearest neighbor interactions on a Cellular Automaton”, *Int. J. Mod. Phys. C.*,15:1425-1438 (2004).
21. Kutlu, B., Özkan, A., Seferoğlu, N., Solak, A., Binal, B., “The tricritical behavior of the 3D Blume-Capel model on a Cellular Automaton”, *Int. J. Mod. Phys.C.*, 16: 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”, *Chinese Phys.Lett.*, 23: 2526-2529 (2006).
24. Serway A.R., “Physics for scientists engineers & with modern physics”. Sanders College Publishing 852-860 (1992).
25. Binney J.J., Dawrick, N.J., Fisher, A.J., and Newnam, M.E.J., “The theory of critical phenomena”, *Clarendon Press*, Oxford, 26-27 (1992).
26. Privman, V., “Finite size scaling and numerical simulation of statistical systems”, *World Scientific*, Singapore, 225-260 (1990).
27. Yeomans, J.M., “Statistical mechanics of phase transition”, *Clarendon Pres*, Oxford: 45-47 (1992).
28. Huang, K., “ Statistical mechanics”, *John Wiley and Sons, Inc.*,: 341-398 (1987).
29. Mülazımoğlu Kızılırmak G., “Dört boyutlu Ising modelin Creutz Cellular Automaton ile incelenmesi”, Doktora Tezi, *Gazi Üniv. Fen Bilimleri Enstitüsü*, Ankara, 69-80 (2009).

30. Challa, M.s.s., Landau, D.P., Binder, K., "Finite Size effects at temperature driven first order transitions", *Phys. Rev. B.*, 34: 1841-1852(1984).
31. Binder, K., Landau,D.P., " Finite-size scaling at first order phase transitions", *Phys. Rev. B.*, 30: 1477-1485(1984).
32. Mouritsen, O., G., "Computer studies of phase transitions and critical phenomena", *Springer*, Berlin, 22-26 (1984).
33. Deserno M., "Tricriticality and the Blume-Capel model: A Monte Carlo study within the microcanonical ensemble ", *Phys.Rev.E.*, 56: 5204-5205(1997).
34. Ota S., Ota S.B., " Negative specific heat and finite-size effects at the first-order transition", *Phys.Lett.A.*, 285: 247-250 (2001).
35. Rikvold, P.A., German, B.M., In. Annual reviews of comput. phys.I, ed. Stauffer, D., (World Scientific, Singapore, 1994), 149-191.
36. Deserno M., "Tricriticality and the Blume-Capel model: A Monte Carlo study within the microcanonical ensemble ", *Phys.Rev.E.*, 56: 5204-5210(1997).
37. Wilson W.G., Vause C.A., "Multilattice microcanonical simulation of the three-dimensional three-state Potts model ", *Phys Rev.B.*, 36: 587-597(1987).
38. Puha I., Diep H.T., "Random-bond and random-anisotropy effects in the phase diagram of the Blume-Capel model", *J.Magn.Mater.*, 224: 85-92 (2001).
39. Ota S.B., Ota S., " Microcanonical Monte Carlo imulations of the first order transition in two-dimensional Potts model", *J.Phys:Cond.Matt.*,12: 2233-2243 (2000).
40. Ota S., Ota S.B., " Negative specific heat and finite-size effects at the first-order transition", *Phys.Lett.A.*, 285: 247-250 (2001).
41. Mouritsen, O., G., "Computer studies of phase transitions and critical phenomena", *Springer*, Berlin, 22-26 (1984).
42. Privman, V., "Finite size scaling and numerical simulation of statistical systems", *World Scientific*, Singapore, 225-260 (1990).
43. Fisher, M.E. and Barber, M.N., "Scaling theory for finite-size effects in the critical region", *Phys. Rev. Lett.*, 28: 1516-1519 (1972).
44. Huang, K., " Statistical mechanics", *John Wiley and Sons, Inc.*: 341-398 (1987).

45. Mülazımoğlu Kızılırmak, G., “Dört boyutlu Ising modelin Creutz Cellular Automaton ile incelenmesi”, Doktora Tezi, *Gazi Üniv. Fen Bilimleri Enstitüsü*, Ankara, 37-38 (2009).
46. Privman, V. And Fisher, M. E., *Phys. Rev. B* 30:332 (1984); Privman, V., in “Finite-size scaling and numerical simulation of statistical systems”, *World Scientific*, Singapore, 1-98 (1990).
47. Heisenberg, W., “Theory of ferromagnetism”, *Z.Physik* ,49: 619-621 (1928).
48. Peierls, R., “On Ising's model of ferromagnetism”, *Proc. Camb. Phil. Soc.*, 32: 477-481 (1936).
49. Lee, T.D., Yang, C.N., “Statistical theory of equations of state and phase ... II. Lattice gas and Ising model”, *Phys. Rev.*, 87: 410-415 (1952).
50. Gu B., Newman K., Fedders P.A., “Role of correlations in $(\text{GaSb})_{1-x}\text{Ge}_{2x}$ alloys” *Phys. Rev. B.*, 35: 9135-9148 (1987).
51. Sivardière J., Lajzerowicz J., “Spin-1 lattice-gas model. III. Tricritical points in binary and ternary fluids”, *Phys. Rev. A* ,11: 2101-2110 (1975).
52. Shick, M., Shih, W.H., “ Spin-1 model of a microemulsion”, *Phys. Rev. B.*, 34: 1797-1801 (1986).
53. Kundrotas, P., J., Lapinskas S., Rosengren, A., “Model of adsorbate-induced missing-row reconstructions of the (100) surface of fcc metals”, *Phys. Rev. B.*,56: 6486-6489 (1997).
54. Lapinskas, S., Rosengren, A., “ Blume-Emery-Griffiths model on three-dimensional lattices: Consequences for the antiferromagnetic Potts model”, *Phys. Rev. B.*, 49: 15190-15196 (1994).
55. Tanaka M., Kawabe T., “ Spin-One Ising model including biquadratic interaction with positive coupling constant”, *J. Phys. Soc. Japan* ,54: 2194-2203 (1985).
56. Gu B., Ni J., Zhu J., “Structure of the alloy $(\text{GaAs})_{1-x}\text{Ge}_{2x}$ and its electronic properties” , *Phys. Rev. B.*, 45: 4071-4076; Stauffer, D., *Phys. Rep.*, 54: 1-12(1979).
57. Davidovich M., Koiller B., Osório R., Robbins M.O., “Electronic theory of ordering in $(\text{GaAs})_{1-x}\text{Ge}_{2x}$ alloys”, *Phys. Rev. B.*, 38: 10524-10532 (1988).
58. Davis L. C., Holloway H., “Properties of $(\text{GaAs})_{1-x}\text{Ge}_{2x}$ and $(\text{GaSb})_{1-x}\text{Ge}_{2x}$: Consequences of a stochastic growth process”, *Phys. Rev. B.*, 35: 2767-2780 (1986); Holloway H., Davis L. C., *Solid State Commun.*,64: 121-140(1987).

59. Keskin M., Arı M., Meijer P.H.E., “Stable, metastable and unstable solutions of a spin-1 Ising system obtained by the molecular-field approximation and the path probability method”, *Physica A* ,157:1000-1017 (1988).
60. Temirci C., Kökçe A., Keskin M., “Equilibrium properties of a spin-1 Ising system with bilinear, biquadratic and odd interactions”, *Physica A*, 231:673-686 (1996).
61. Blume M.B., “Theory of the first-order magnetic phase change in UO_2 “, *Phys.Rev.B.*, 141: 517-524 (1966).
62. Capel H.W., “On the possibility of first-order phase transitions in Ising system of triplet ions with zero-field splitting”, *Physica(Utrecht)*., 32: 966-967 (1966).
63. Yelon W.B., Cox D.E., Kortman P.J., Daniels W.B., “Neutron-diffraction study of ND_4Cl in the tricritical region”, *Phys. Rev. B.*, 9: 4843-4856 (1974).
64. Wortis M., *Phys.Lett.A.*, 47: 445-446 (1974).
65. Safran S.A., “Phase Diagrams for staged intercalation compounds“, *Phys.Rev.Lett.*,44: 937-940 (1980).
66. Siqueira A.F., Fittipaldi I.P., “ New effective-field theory for the Blume-Capel model”, *Physica A*, 138: 592-611 (1986).
67. Tucker J.W., “ The tri-critical point in the Blume-Emery-Griffiths model”, *J.Phys: Cond. Matt.*, 1: 485-489 (1989).
68. Du A., Liu H.J., Yü Y.Q., *Phys.Stat.Sol.B.*, 241: 175-176 (2004).
69. Du A., Yü Y.Q., Liu H.J., “ Expanded Bethe-Peierls approximation for the Blume-Capel model”, *Physica A*, 320: 387-397 (2003).
70. Saul D.M., Wortis M., Stauffer D., “Tricritical behavior of the Blume-Capel model”, *Phys. Rev.B.*, 9: 4964-4680 (1974).
71. Brankov J.G., Przystawa J., Pravecki E., *J.Phys.C.*, 5: 3384-3387 (1972).
72. Grollau S., Kierlik G., Rosinberg M.L., Tarjus G., “Thermodynamically self-consistent theory for the Blume-Capel model “, *Phys.Rev.E.*, 63: 041111-041123 (2001).
73. Grollau S. “ Phase diagram of the spin3/2 Blume-Capel model in three dimensions”, *Phys.Rev.E* ,65: 056130-056135 (2002).
74. Falicov A., Berker A.N., “Tricritical and critical-end point phenomena under random bonds”, *Phys.Rev.Lett.*, 76: 4380-4381(1996).

75. Mahan G.D., Girvin S.M., “Blume-Capel model for plane-triangular and fcc lattices “, *Phys.Rev.B.*, 17: 4411-4415 (1978).
76. Buzano C., Pelizzola A., “ New topologies in the phase diagram of the semi-infinite Blume-Capel model”, *Physica A.*, 216: 158-168 (1995).
77. Ng.W.M., Barry J.H., “Cluster-variation method applied in the pair approximation to the $S=1$ Ising ferromagnet having additional single-ion-type uniaxial anisotropy “, *Phys.Rev.B.*, 17: 3675-3683 (1978).
78. Deserno M., “Tricriticality and the Blume-Capel model: A Monte Carlo study within the microcanonical ensemble “, *Phys.Rev.E.*, 56: 5204-5205(1997).
79. Wilson W.G., Vause C.A., “Multilattice microcanonical simulation of the three-dimensional three-state Potts model “ , *Phys Rev.B.*, 36: 587-588(1987).
80. Puha I., Diep H.T., “Random-bond and random-anisotropy effects in the phase diagram of the Blume-Capel model” , *J.Magn.Mater.*, 224: 85-92 (2001).
81. Ota S.B., Ota S., “ Microcanonical Monte Carlo imulations of the first order transition in two-dimensional Potts model”, *J.Phys.Cond.Matt.*,12: 2233-2243 (2000).
82. Ota S., Ota S.B., “ Negative specific heat and finite-size effects at the first-order transition”, *Phys.Lett.A.*, 285: 247-250 (2001).
83. Kimel J.D., Rikvold P.A. and Wang Y.L., “Phase diagram for the antiferromagnetic Blume-Capel model near tricriticality “, *Phys. Rev. B.*, 45: 7237-7243 (1992).
84. Koza, Z., Jasuukiewicz, C., Pekalski, A., “ Trnsfer-matrix methods in the Blume-Emery-Griffiths Model”, *Physica A.*, 164: 191-192(1990).
85. Berker, A.N., Wortis, M., “ Blume-Emery-Griffiths-Potts model in two dimensions: Phase diagram and critical properties from a position-space renormalization group “, *Phys.Rev.B.*, 14: 4946-4963 (1974).
86. Takahashi, K., Tanaka, M., *J.Phys.Soc.Japan*, 46: 1428(1979); Takahashi,K., Tanaka, M., *J.Phys.Soc.Japan* ,46: 1423-1424(1980).
87. Albayrak, E., Keskin, M., “Phase diagram of the Blume-Emery-Griffiths model on the simple cubic lattice calculated by the linear chain approximation”, *J.Magn.Magn.Mater.* ,213: 201-212(2000).
88. Keskin, M., Ekiz, C., Yalçın, O., “Stable, metastable and unstable solutions of the Blume–Emery–Griffiths model”, *Physica A* ,267: 392-405(1999).

89. Jain, A.K. and Landau, D.P., "Monte Carlo study of the fcc Blume-Capel model", *Phys. Rev. B.*, 22: 445-452 (1980).
90. Hoston, W., and Berker, N., "Dimensionality effects on the multicritical phase diagrams of the Blume-Emery-Griffiths model with repulsive biquadratic coupling: Mean-field and renormalization-group studies", *J. Appl. Phys.*, 70: 6101-6103 (1991).
91. Ekiz, C. and Keskin, M., "Multicritical phase diagrams of the Blume-Emery-Griffiths model with repulsive biquadratic coupling including metastable phases", *Phys. Rev. B.*, 66: 054105-054115 (2002).
92. Keskin, M., Erdinç, A., "Multicritical phase diagrams of the Blume-Emery-Griffiths model with repulsive biquadratic coupling including metastable phases: the pair approximation and the path probability method with pair distribution", *J. Magn. Mater.*, 283: 392-408 (2004).
93. Tucker, J.W., Balcerzak, T., Gzik, M., Sukiennicks, A., "Phase diagram of the spin-1 magnetic bilayer by cluster variational theory: Exact results for a BEG model on a Bethe lattice with five-fold coordination", *J. Magn. Mater.*, 187: 381-382 (1998).
94. Kasono, K., Ono, I., "Re-entrant phase transitions in the Blume-Emery-Griffiths model", *Z. Phys. B: Condens. Matter*, 88: 205-206 (1992).
95. Wang, Y.L., Wentworth, C., "Phase diagrams of three-dimensional Blume-Emery-Griffiths model", *J. Appl. Phys.*, 61: 4411-4412 (1987).
96. Tanaka, M., Kawabe, T., "Spin-1 Ising model including biquadratic interaction with positive coupling constant", *J. Phys. Soc. Japan*, 54: 2194-2195 (1985).
97. Privman, V., Fisher, M.E., "Finite-size effects at first-order transitions", *J. Stat. Phys.*, 33: 385-417 (1983).
98. Cardy, J.L., Nightingale, M.P., "Finite-size analysis of first-order phase transitions : Discrete and continuous symmetries", *Phys. Rev. B.*, 27: 4256-4260 (1983).
99. Wolfram, S., "Statistical mechanics of Cellular Automata", *Reviews of Modern Physics*, 55: 601-607 (1983).
100. Fisher, M.E. and Barber, M.N., "Scaling theory for finite-size effects in the critical region", *Phys. Rev. Lett.*, 28: 1516-1519 (1972).
101. Lenz, W., *Z. Physik*, 21: 613-615 (1920).
102. Ising, E., "Beitrag zur theorie des ferromagnetismus", *Z. Physik*, 31: 253-258, (1925).

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı, adı : ILDIRŞAHİN GÜNEŞ, Saime
Uyruğu : T.C.
Doğum tarihi ve yeri : 06.08.1982 Ankara
Medeni hali : Evli
Telefon : 0 (505) 708 59 09
e-mail : s2118@mynet.com

Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet tarihi
Yüksek lisans	Gazi Üniversitesi /Fizik Bölümü	2010
Lisans	Gazi Üniversitesi/ Fizik Bölümü	2004
Lise	Kaya Beyazıtöđlu Lisesi	2000

İş Deneyimi

Yıl	Yer	Görevi
2009-	Yükselen Koleji	Fizik Öğretmeni
2004-2009	Jale Tezer Dersanesi	Fizik Öğretmeni

Yabancı Dil

İngilizce