

**DÖRT BOYUTLU İSİNG MODELİN (6)⁴ ÖRGÜSÜNDE
CREUTZ CELLULAR AUTOMATON İLE İNCELENMESİ**

134127

GANİMET MÜLAZIMOĞLU

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
(FİZİK)**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**Ağustos 2003
ANKARA**

134127
GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
13.08.2003

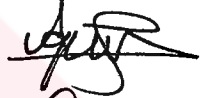
Ganimet MÜLAZIMOĞLU tarafından hazırlanan DÖRT BOYUTLU ISING MODELİN $(6)_4^4$ ÖRGÜSÜNDE CREUTZ CELLULAR AUTOMATON İLE İNCELENMESİ adlı bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.



Prof. Dr. Abdullah GÜNEN

Tez Yöneticisi

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

Başkan: : Prof. Dr. Abdullah GÜNEN 

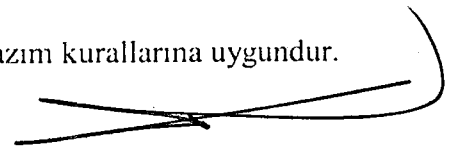
Üye : Dr. Dr. Cemalettin ÇAN 

Üye : Dr. Dr. Bülent KUTLU 

Üye : _____

Üye : _____

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



İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET.....	i
ABSTRACT.....	ii
TEŞEKKÜR.....	iii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ.....	iv
ŞEKİLLERİN LİSTESİ.....	v
1. GİRİŞ.....	1
2. TEORİ.....	6
2.1 Düzen Parametresi.....	6
2.2 Evrensel Davranış.....	6
2.3 Ising Model.....	7
2.3.1 Dört boyutlu Ising model.....	9
2.4 Serbest Enerji, İç Enerji ve Öz Isı.....	10
2.5 Kendiliğinde mıknatıslanma M , manyetik alınganlık χ , özısı C 'nin sıcaklık bağımlılıkları.....	12
3. ISING MODELİN SİMÜLASYONU İÇİN ALGORİTMALAR.....	14
3.1 Metropolis Algoritması.....	16
3.2 Swendsen-Wang Algoritması.....	16
3.3 Wolff Algoritması.....	17
3.4 Creutz'un Gezgin "Demon" Algoritması.....	18
3.5 "Cellular Automaton" lar.....	19
3.5.1 Q2R "Cellular Automaton"ı.....	20
3.5.2 Creutz "Cellular Automaton"ı.....	21
3.5.3 Creutz "Cellular Automaton"ında termodinamik niceliklerin hesabı.....	22

4. BULGULAR.....	25
4.1 Termodinamik Niceliklerin Sıcaklık Değişimleri.....	26
4.1.1 Kendiliğinden mıknatıslanma M	26
4.1.2 Manyetik alınganlık χ	30
4.1.3 Özısı C	35
4.2 β, β' ve γ, γ' Statik Kritik Üslerin Hesabı.....	39
4.2.1 Kendiliğinden mıknatıslanma kritik üssü β, β'	39
4.2.2 Manyetik alınganlık kritik üssü γ, γ'	48
5. SONUÇLAR VE TARTIŞMA.....	57
KAYNAKLAR.....	61
ÖZGEÇMİŞ.....	64

**DÖRT BOYUTLU ISING MODELİN $(6)_4^1$ ÖRGÜSÜNDE
CREUTZ CELLULAR AUTOMATON İLE İNCELENMESİ
(Yüksek Lisans Tezi)**

Ganimet MÜLAZIMOĞLU

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

Ağustos 2003

ÖZET

Dört Boyutlu Ising model $(6)_4^1$ sonlu örgüsü için Creutz Cellular Automaton ile simüle edildi. Simülasyon 0.6×10^5 , 2.4×10^5 , 4.8×10^5 ve 9.6×10^5 Monte Carlo adımlarında gerçekleştirildi. Kendiliğinden mıknatıslanma (Düzen Parametresi), manyetik alınganlık ve özısının kritik sıcaklıkları tesbit edilerek statik kritik üsler bulundu. Bulunan kritik üsler farklı zaman adımları için karşılaştırıldı.

Bilim Kodu :205
Anahtar Kelimeler :Cellular Automaton
Sayfa Adedi :64
Tez Yöneticisi :Prof. Dr. Abdullah GÜNEN

**STUDY OF FOUR DIMENSIONAL ISING MODEL $(6)_4^4$ LATTICE
USING CREUTZ CELLULAR AUTOMATON**

(M.Sc.Thesis)

Ganimet MÜLAZIMOĞLU

**GAZİ UNIVERSITY
INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY**

August 2003

ABSTRACT

The four-dimensional Ising model was simulated for a $(6)_4^4$ finite lattice on the Creutz Cellular Automaton. Simulations were carried out for 0.6×10^5 , 2.4×10^5 , 4.8×10^5 and 9.6×10^5 Monte Carlo steps. After obtaining the critical temperature of the parameter, the magnetic susceptibility and specific heat, the static critical exponent were obtained and then compared with each other for different time steps.

Science Code : 205

Key Words : Cellular Automaton

Page Number: 64

Adviser : Prof. Dr. Abdullah GÜNEN

TEŞEKKÜR

Çalışmalarım boyunca değerli yardım ve katkılarıyla beni yönlendiren saygıdeğer hocam Prof. Dr. Abdullah GÜNEN'e, yine kıymetli tecrübelerinden faydalandığım hocam Dr. Ziya MERDAN'a, manevi destekleriyle beni hiçbir zaman yalnız bırakmayan aileme ve çok değerli arkadaşım Köksal KIZILIRMAK'a teşekkürü bir borç bilirim.



ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 5.1. Set 1 ve Set 2 ve Set3’de dört ayrı Monte Carlo adımı ö ısı (C)’nin sıcaklığa karşı aldığı değerler	57
Çizelge 5.2. Üç ayrı set ortalamasında dört ve $(6)_3^4$ örgüde yapılan çalışmalarda iki ayrı Monte Carlo adımı Özısı (C)’nin sıcaklığa karşı aldığı değerler.....	58
Çizelge 5.3. Set 1 ve Set 2 ve Set3’de dört ayrı Monte Carlo adımı manyetik alınganlığın (χ)’ın sıcaklığa karşı aldığı değerler.....	58
Çizelge 5.4. Üç ayrı set ortalamasında dört ve $(6)_3^4$ örgüde yapılan çalışmalarda iki ayrı Monte Carlo adımı manyetik alınganlığın (χ)’ın sıcaklığa karşı aldığı değerler.....	59
Çizelge 5.5. Set 1 ve Set 2 ve Set3’de dört ayrı Monte Carlo adımı sıcaklığa karşı kritik üsler.....	59
Çizelge 5.6. Üç ayrı set ortalamasında dört ve $(6)_3^4$ örgüde yapılan çalışmalarda İki ayrı Monte Carlo adımı sıcaklığa karşı kritik üsler.....	60

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 1.1. $H=0$ da kendiliğinden manyetizasyon $ M $ 'nin sıcaklıkla değişimi.....	10
Şekil 4.1.a. Kendiliğinden mıknatıslanmanın 0.6×10^5 Monte Carlo adımında sıcaklığa karşı grafiği.....	26
Şekil 4.1.b. Kendiliğinden mıknatıslanmanın 0.6×10^5 Monte Carlo adımında üç set ortalamasının sıcaklığa karşı grafiği.....	27
Şekil 4.2.a. Kendiliğinden mıknatıslanmanın 2.4×10^5 Monte Carlo adımında sıcaklığa karşı grafiği.....	27
Şekil 4.2.b. Kendiliğinden mıknatıslanmanın 2.4×10^5 Monte Carlo adımında üç set ortalamasının sıcaklığa karşı grafiği.....	28
Şekil 4.3.a. Kendiliğinden mıknatıslanmanın 4800 monte carlo adımında sıcaklığa karşı grafiği.....	28
Şekil 4.3.b. Kendiliğinden mıknatıslanmanın 4800 monte carlo adımında üç set ortalamasının sıcaklığa karşı grafiği.....	29
Şekil 4.4.a. Kendiliğinden mıknatıslanmanın 9.6×10^5 Monte Carlo adımında sıcaklığa karşı grafiği.....	29
Şekil 4.4.b. Kendiliğinden mıknatıslanmanın 9.6×10^5 Monte Carlo adımında üç set ortalamasının sıcaklığa karşı grafiği.....	30
Şekil 4.5.a. Manyetik alınganlığın 0.6×10^5 Monte Carlo adımında sıcaklığa karşı grafiği.....	31
Şekil 4.5.b. Manyetik alınganlığın 0.6×10^5 Monte Carlo adımında üç set ortalamasının sıcaklığa karşı grafiği.....	31
Şekil 4.6.a. Manyetik alınganlığın 2.4×10^5 Monte Carlo adımında sıcaklığa karşı grafiği.....	32
Şekil 4.6.b. Manyetik alınganlığın 2.4×10^5 Monte Carlo adımında üç set ortalamasının sıcaklığa karşı grafiği.....	32
Şekil 4.7.a. Manyetik alınganlığın 4.8×10^5 Monte Carlo adımında sıcaklığa karşı grafiği.....	33

Şekil 4.7.b. Manyetik alınganlığın 4.8×10^5 Monte Carlo adımımda üç set ortalamasının sıcaklığa karşı grafiği.....	33
Şekil 4.8.a. Manyetik alınganlığın 9.6×10^5 Monte Carlo adımımda sıcaklığa karşı grafiği.....	34
Şekil 4.8.b. Manyetik alınganlığın 9.6×10^5 Monte Carlo adımımda üç set ortalamasının sıcaklığa karşı grafiği.....	34
Şekil 4.9.a. Özısının 0.6×10^5 Monte Carlo adımımda sıcaklığa karşı grafiği.....	35
Şekil 4.9.b. Özısının 0.6×10^5 Monte Carlo adımımda üç set ortalamasının sıcaklığa karşı grafiği.....	36
Şekil 4.10.a. Özısının 2.4×10^5 Monte Carlo adımımda sıcaklığa karşı grafiği.....	36
Şekil 4.10.b. Özısının 2.4×10^5 Monte Carlo adımımda üç set ortalamasının sıcaklığa karşı grafiği.....	37
Şekil 4.11.a. Özısının 4.8×10^5 Monte Carlo adımımda sıcaklığa karşı grafiği.....	37
Şekil 4.11.b. Özısının 4.8×10^5 Monte Carlo adımımda üç set ortalamasının sıcaklığa karşı grafiği.....	38
Şekil 4.12.a. Özısının 9.6×10^5 Monte Carlo adımımda sıcaklığa karşı grafiği.....	38
Şekil 4.12.b. Özısının 9.6×10^5 Monte Carlo adımımda üç set ortalamasının sıcaklığakarşı grafiği.....	39
Şekil 4.13.a. Log M'nin Log ϵ' a karşı 0.6×10^5 Monte Carlo adımımda için grafiği.....	40
Şekil 4.13.b. Log M'nin Log ϵ' a karşı 0.6×10^5 Monte Carlo adımımda üç set ortalamasının grafiği.....	41
Şekil 4.14.a. Log M'nin Log ϵ' a karşı 2.4×10^5 Monte Carlo adımımda için grafiği.....	41
Şekil 4.14.b. Log M'nin Log ϵ' a karşı 2.4×10^5 Monte Carlo adımımda üç set ortalamasının grafiği.....	42
Şekil 4.15.a Log M'nin Log ϵ' a karşı 4.8×10^5 Monte Carlo adımımda için grafiği.....	42

Şekil 4.15.b. Log M'nin Log ϵ 'a karşı 4.8×10 ⁵ Monte Carlo adımımda üç set ortalamasının grafiği.....	43
Şekil 4.16.a. Log M'nin Log ϵ 'a karşı 9.6×10 ⁵ Monte Carlo adımımda için grafiği.....	43
Şekil 4.16.b. Log M'nin Log ϵ 'a karşı 9.6×10 ⁵ Monte Carlo adımımda üç set ortalamasının grafiği.....	44
Şekil 4.17.a. Log(M / log ^{1/3} ϵ)'nin Log ϵ 'a karşı 0.6×10 ⁵ Monte Carlo adımımda grafiği.....	44
Şekil 4.17.b. Log(M / log ^{1/3} ϵ)'nin Log ϵ 'a karşı 0.6×10 ⁵ Monte Carlo adımımda üç set ortalamasının grafiği.....	45
Şekil 4.18.a. Log(M / log ^{1/3} ϵ)'nin Log ϵ 'a karşı 2.4×10 ⁵ Monte Carlo adımımda grafiği.....	45
Şekil 4.18.b. Log(M / log ^{1/3} ϵ)'nin Log ϵ 'a karşı 2.4×10 ⁵ Monte Carlo adımımda üç set ortalamasının grafiği.....	46
Şekil 4.19.a. Log(M / log ^{1/3} ϵ)'nin Log ϵ 'a karşı 4.8×10 ⁵ Monte Carlo adımımda grafiği.....	46
Şekil 4.19.b. Log(M / log ^{1/3} ϵ)'nin Log ϵ ' a karşı 4.8×10 ⁵ Monte Carlo adımımda üç set ortalamasının grafiği.....	47
Şekil 4.20.a. Log(M / log ^{1/3} ϵ)'nin Log ϵ 'a karşı 9.6×10 ⁵ Monte Carlo adımımda grafiği.....	47
Şekil 4.20.b. Log(M / log ^{1/3} ϵ)'nin Log ϵ 'a karşı 9.6×10 ⁵ Monte Carlo adımımda üç set ortalamasının grafiği.....	48
Şekil 4.21.a. Log χ 'nin Log ϵ 'a karşı 0.6×10 ⁵ Monte Carlo adımımda grafiği.....	49
Şekil 4.21.b. Log χ 'nin Log ϵ 'a karşı 0.6×10 ⁵ Monte Carlo adımımda üç set ortalamasının grafiği.....	49
Şekil 4.22.a. Log χ 'nin Log ϵ 'a karşı 2.4×10 ⁵ Monte Carlo adımımda grafiği.....	50
Şekil 4.22.b. Log χ 'nin Log ϵ 'a karşı 2.4×10 ⁵ Monte Carlo adımımda üç set ortalamasının grafiği.....	50

Şekil 4.23.a. $\text{Log } \chi$ 'nin $\text{Log } \epsilon$ 'a karşı 4.8×10^5 Monte Carlo adımıında grafiği.....	51
Şekil 4.23.b. $\text{Log } \chi$ 'nin $\text{Log } \epsilon$ 'a karşı 4.8×10^5 Monte Carlo adımıında üç set ortalamasının grafiği.....	51
Şekil 4.24.a. $\text{Log } \chi$ 'nin $\text{Log } \epsilon$ 'a karşı 9.6×10^5 Monte Carlo adımıında grafiği.....	52
Şekil 4.24.b. $\text{Log } \chi$ 'nin $\text{Log } \epsilon$ 'a karşı 9.6×10^5 Monte Carlo adımıında üç set ortalamasının grafiği.....	52
Şekil 4.25.a. $\text{Log}(\chi / \log^{1/3} \epsilon)$ 'nin $\text{Log } \epsilon$ 'a karşı 0.6×10^5 Monte Carlo adımıında grafiği.....	53
Şekil 4.25.b. $\text{Log}(\chi / \log^{1/3} \epsilon)$ 'nin $\text{Log } \epsilon$ 'a karşı 0.6×10^5 Monte Carlo adımıında üç set ortalamasının grafiği.....	53
Şekil 4.26.a. $\text{Log}(\chi / \log^{1/3} \epsilon)$ 'nin $\text{Log } \epsilon$ 'a karşı 2.4×10^5 Monte Carlo adımıında grafiği.....	54
Şekil 4.26.b. $\text{Log}(\chi / \log^{1/3} \epsilon)$ 'nin $\text{Log } \epsilon$ 'a karşı 2.4×10^5 Monte Carlo adımıında üç set ortalamasının grafiği.....	54
Şekil 4.27.a. $\text{Log}(\chi / \log^{1/3} \epsilon)$ 'nin $\text{Log } \epsilon$ 'a karşı 4.8×10^5 Monte Carlo adımıında grafiği.....	55
Şekil 4.27.b. $\text{Log}(\chi / \log^{1/3} \epsilon)$ 'nin $\text{Log } \epsilon$ 'a karşı 4.8×10^5 Monte Carlo adımıında üç set ortalamasının grafiği.....	55
Şekil 4.28.a. $\text{Log}(\chi / \log^{1/3} \epsilon)$ 'nin $\text{Log } \epsilon$ 'a karşı 9.6×10^5 Monte Carlo adımıında grafiği.....	56
Şekil 4.28.b. $\text{Log}(\chi / \log^{1/3} \epsilon)$ 'nin $\text{Log } \epsilon$ 'a karşı 9.6×10^5 Monte Carlo adımıında üç set ortalamasının grafiği.....	56

1. GİRİŞ

Bir maddenin kararlı bir yapısının, sıcaklık değişimi sonucu belirli bir sıcaklıkta diğer bir yapıya ani dönüşümü faz geçişi olarak tanımlanır. Faz değiştirme olayları geçmişten günümüze kadar büyük önem arz etmektedir. Faz geçişine en iyi örnek günlük hayatımızda karşılaştığımız suyun faz değiştirmesidir. Ancak diğer maddelerinde faz değiştirmeleri oldukça önemlidir. Örneğin demir (Fe), kobalt (Co), nikel (Ni) gibi maddeler Curie sıcaklığı olarak bilinen kritik sıcaklığın (T_c) altında ferromanyetik bir özellik gösterirken kritik sıcaklığın üstünde paramanyetik özellik gösterirler. Curie noktası, kaynama veya donma noktası gibi kritik bir sıcaklıktır yani ferromanyetik durumundan paramanyetik durumuna olan ani geçiş sıcaklığıdır. Faz geçişleri yoğun madde fiziğinin temel araştırma alanlarından biridir. Sıvıdan gazı, normal iletkenlikten süper iletkenliğe, paramanyetiklikten ferromanyetikliğe geçişler faz geçişleri için en yaygın örneklerdendir (1).

Bu çalışmanın konusu olan manyetik faz geçişi maddenin mıknatıslanmasındaki değişmeye dayanmaktadır. Herhangi bir maddenin mıknatıslanması ölçülen manyetik dipol momentinin, maddenin hacmine oranı ile belirlenir. Dipol momentler elektronların hem yörünge hareketlerinden hem de spin denen iç özelliklerinden kaynaklanmaktadır. Mıknatıslanma tamamlanmamış atom tabakalarındaki elektronların spininden kaynaklanmaktadır. Elektronun spin hareketi etkin bir akım ilmeği ve dolayısı ile bir manyetik moment oluşturur. Bir elektronun spininden kaynaklanan iç manyetik momentinin değeri Bohr Magnetonu kadardır. Atomların elektronlarının yörüngesel hareketlerinin oluşturduğu yerel manyetik etki ya sıfır yada oldukça küçüktür. Maddenin manyetik (mıknatıslanma) özellikleri bir dış alana verdikleri tepki cinsinden anlatılabilir.

Maddeler genel anlamda ferromanyetik, paramanyetik ve diamanyetik olarak gruplandırılabilirler. Çok sayıda elektronu bulunan atomlarda veya iyonlarda, genellikle elektronlar, spinleri zıt yönecek şekilde çiftler oluştururlar. Bu da spin manyetik momentinin birbirlerini yok etmeleri demektir. Fakat tek sayıda elektronu

bulunan atomların en azından bir tane çiftlenmemiş elektronu ve buna karşılık gelen bir spin manyetik momenti olması gerekir. Ferromanyetizma son yörüngesinde elektron çiftlenimi olmayan atomlarda, tek kalmış elektronun spininden kaynaklanır. Ferromanyetik maddeler, zayıf bir dış manyetik alanda bile birbirine paralel olarak yönelmeye çalışan atomik manyetik dipol momentlere sahiptirler. Manyetik dipol momentler paralel hale getirildikten sonra, dış alan ortamdan kaldırılrsa bile madde mıknatıslanmış olarak kalacaktır. Bu sürekli yönelim komşu olan manyetik momentler arasındaki etkileşimden kaynaklanır. Ferromanyetik maddelerde ne kadar çok spin aynı yöne yönelirse spin sisteminin etkileşme enerjisi de o kadar düşük olacaktır. Ferromanyetizma aynı zamanda sıcaklığa bağlı bir özelliktir. Sıcaklık mutlak sifıra (0°K) ulaştığında spinlerin hepsi aynı yöndedir ve sistem en düşük enerji durumundadır. Bu sistem ferromanyetiktir. Sistemin T sıcaklığı yükselirken spinlerde rastgele yönelmeye başlar. Yani maddenin mıknatıslanması azalarak Curie sıcaklığı adı verilen T_c sıcaklığında sıfır olur. Curie sıcaklığının üstündeki sıcaklıklarda spinler rastgele yönelindiklerinden dolayı madde paramanyetik fazda bulunur. Bu durumda sıcaklıktan kaynaklanan hareketler, komşu atomlar arası etkileşimlerden ileri gelen kuvvetleri yenecek kadar büyür. Kritik sıcaklık dışardan uygulanan manyetik alanla değiştirilebilir. Dış alanın varlığı kritik sıcaklığın değerini büyütür. Yani madde daha yüksek sıcaklıkta faz değiştirir. 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 (2). 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 (3).

Fiziksel olayların incelenmesinde model kurulması, model gelişiminin sağlanması, sonuçların elde edilmesi ve bu sonuçların değerlendirilmesi teorik çalışmaların alt yapısını oluşturur. Teorik model sisteme uygulanır ve sistemin fiziksel özellikleri

hesaplanır. Fiziksel sistemlerin toplu davranışlarını modellemek için bir çok model tanımlanmıştır. En yaygın olanları Ising modeli, Örgü gazı modeli, Potts modeli, X-Y ve Heisenberg modeli, Gaussian ve Küresel model ve Percolation modeldir. Faz geçişi yapan sistemleri temsil eden model, spinler arası etkileşimleri içeren Ising modeldir. Bu model, W.Lenz tarafından basit bir ferromanyetik model olarak bulunmuştur. Bu model ferromanyetik maddelerin gösterdiği termodinamik davranışları inceler. En basit hali spin-1/2 Ising modelidir (4). Bu tez çalışmasında Ising model denilince spin-1/2 Ising modeli anlaşılmalıdır.

Spin-1/2 Ising modelinin bir boyutlu hali, E.Ising tarafından 1925 yılındaki çalışmasında çözülmüştür. Bu çalışmada sistemin her hangi bir pozitif T sıcaklık değerinde faz geçişi yapmadığı öngörülmüştür. Ancak daha sonra en basit yakın komşulu bir boyutlu Ising modelin $T=0^{\circ}\text{K}$ ve kritik nokta olarak düşünülen bir noktada faz geçişine sahip olduğu anlaşılmıştır.

Faz geçişi serbest enerji veya onun türevlerinin birinde singülerlik (ıraksama) oluştuğunda ortaya çıkar. Faz geçişi gösteren sistemler için geliştirilen modellerin tam çözümleri uzun ve zordur. Tam çözümler her durumda yapılamamıştır. Örneğin Ising modeli Onsager (5) tarafında sadece iki boyutlu uzayda dış manyetik alan yok iken tam olarak çözülebilmıştır. Tam çözümü yapılamayan problemlerin yaklaşımlarla yapılacak analizler sonucunda çözümü mümkündür. Bu tip çözümlerin doğruluğunu kanıtlamak, çalışmaların doğruluğunu desteklemek açısından simülasyon önemlidir. İstatistik sistemlerin sayısal simülasyonu, kritik olay ve faz geçişi çalışmalarında en temel araçlarından biridir. Bilgisayar simülasyonu ile teorileri test etmek mümkün olur. Simülasyon sonuçları, teorik sonuçların yanı sıra deneysel sonuçlar ile de test edilir. Yani bilgisayar simülasyon çalışmaları deneysel ve teorik çalışmalar arasında bir köprü oluşturmaktadır. Deneysel çalışmalar sırasında karşılaşılabilecek (basınç, sıcaklık ve yüksek hızlı parçacıkların kontrol zorluğu gibi) sorunlar bilgisayar simülasyonu ile ortadan kaldırılır.

Bu amaçla kullanılan simülasyon metotlarından Monte Carlo (6,7,8) ve Molekül Dinamiği (9,10) ilk dikkati çeken yöntemlerdir. Monte Carlo şans karakterli olduğundan bu isimle anılır. Sistemlerin konfigürasyonlarını örneklemede rasgele sayıların kullanımı söz konusudur. Algoritma, herhangi bir konfigürasyona rastlama ihtimalini Boltzman dağılımına uyacak şekilde ayarlamaktadır. Sıcaklık giriş parametresi olarak kullanılmakta ve bilgisayar ısı deposu gibi davranmaktadır. Başlangıçta genel olarak spinlerin hepsi aynı yönlü alınır.

Monte Carlo yönteminin bir alternatifi Molekül Dinamiği olarak bilinir. Moleküler Dinamik Simülasyon (11), çok parçacıklı sistemlerin dinamik özelliklerini incelemeye kullanılır. Simülasyon, sistemi oluşturan parçacıkların, sabit toplam enerjide klasik hareket denklemlerini nümerik olarak çözmekten ibarettir. Zamana bağlı olarak atom veya moleküllerin konum, hız veya yönelimlerinin nasıl değiştiği bulunur. Klasik bir dinamik sistem, Hamilton hareket denklemlerinin sayısal integrasyonunu içermektedir. Molekül dinamiği özellikle katı ve sıvıların molekül yapıları, enerji ve hareketleri ile "bulk" (parçacık sayısının sonsuz olduğu durum) özelliklerinin ayrıntılı bir şekilde araştırılmasına imkan sağlamaktadır. Bu yöntemde rasgele sayı üretici kullanılmamaktadır. Sistemin istatistik yapısı faz uzayının karmaşıklığından meydana gelmektedir.

Çok önemli ve çok kullanılan algoritmalarından biride, Markov yöntemi olarak bilinir ve ilk olarak 1953 yılında Metropolis ve arkadaşları tarafından türetilmiştir (11,12). Metropolis ve arkadaşlarının algoritması ile Molekül Dinamiği arasında yer alan diğer bir simülasyon yönteminde 1983'de M. Creutz tarafından geliştirilmiştir (13). Bu yöntem gezgin demon modeli olarak bilinmektedir. 1986'da M. Creutz iki boyutlu uzayda Ising modelinin deterministik bir "cellular automaton(CA)" kuralı ile simülasyonu gerçekleştirmiştir (14). "Cellular automaton" ilk olarak Neuman ve Ulam tarafından biyolojik sistemlerin simülasyonu için kullanılmıştır (15,16). "Cellular automaton" 0 veya 1 değerleri alabilen bir hücre veya örgü noktaları satırından oluşur. Bu değerler sabit bir kurala göre kesikli zaman adımlarında yenilenir. "Cellular automaton" hücreleri herhangi bir boyutta düzenli bir örgü

üzerinde sıralanabilir. Bu model için ilk temel teoriler 1983 yılında Wolfram tarafından verilmiştir. Fizik, Kimya ve Biyoloji'deki dinamik sistemler için pek çok uygulamaları vardır.

Ising modelinin ve çeşitli fizik problemlerin bir CA olarak simülasyonu Vichniac tarafından önerilmiştir (9). Ising modelin simülasyonu için iki farklı CA algoritması vardır. Bunlardan ilki Vichniac, Pomeau ve Herrman tarafından sunulan Q2R algoritması (17,18), ikincisi ise Creutz tarafından ortaya atılan Creutz "cellular automaton" olarak bilinmektedir (14). Q2R algoritmasında simülasyon süresince iç enerjinin korunduğu konfigürasyonlar üretilmekte dolayısıyla özısı hesaplanamamaktadır. Bu sorun iç enerji dalgalanmalarının dikkate alındığı Creutz "cellular automaton" ile ortadan kalkmaktadır. İki boyutlu Ising modelinin tam çözümü uzay boyutunun kritik üsleri belirlemede önemli olduğunu göstermektedir. Bu sebeple üç veya daha yüksek boyutlu Ising modelin çözülmesi oldukça önemlidir. Ancak üç veya daha yüksek boyutlu Ising modelin analitik çözümü mümkün olmamıştır. Bu güne kadar boyut etkisi ve teorik sonuçların doğruluğunu araştırmak için $d=2,3,4,5,6,7$, ve 8 boyutlu Ising modelleri için simülasyonlar yapılmıştır. Ayrıca sonsuz örgüler için Ising modeli teorik olarak çözülebilmekte fakat sonlu örgüler için tam olarak çözülememektedir. Ising model için termodinamik niceliklerin sonlu örgülerdeki davranışları çeşitli Monte Carlo modelleri ile incelenmiş ve sonsuz örgü davranışları, sonlu örgü ölçekleme teorisi yardımıyla belirlenmiştir (19,20,21).

Bu çalışmada, dört boyutta Creutz "cellular automaton"un Ising modelle ilgili kendiliğinden mıknatıslanma, manyetik alınganlık ve özısı gibi termodinamik niceliklerin faz geçiş bölgesindeki süreksizliklerini tanımlayan β , β' , γ , γ' kritik üstlerini hesaplanmak hedeflenmiştir. Çalışmada, dört boyutlu dört bitli $L=6$ örgüsünde hesaplamalar 0.6×10^5 , 2.4×10^5 , 4.8×10^5 , 9.6×10^5 Monte Carlo adımı üzerinden yapılmış olup, sonuçlar Monte Carlo adımları arasında kıyaslanarak yorumlanmıştır. Hesaplamalarda her bir zaman adımında örgü hücrelerinin yarısına kural uygulanmış ve periyodik sınır şartı kullanılmıştır.

2. TEORİ

2.1. Evrensel Davranış

Oksijen , Azot gibi gazların sıvı ve buhar yoğunluklarının gerçek değişimleri evrensel bir davranış özelliği gösterir. Sıcaklık ve yoğunluk normalize edildiğinde farklı gazlar için data değerleri birlikte var olma eğrisi üzerine düşer. Birlikte var olma eğrisi parabolik özellik taşır. $T \rightarrow T_c$ olduğu zaman sıvı ve buhar yoğunlukları farkı $\rho_{sıvı} - \rho_{buhar} \propto |t|^\beta$ kritik üste bağlı olarak sıfıra gider. Burada t boyutsuz birimlerde sıcaklığın kritik değerden sapmasını ölçen indirgenmiş sıcaklık, β ise kritik üs olup sıvının cinsinden bağımsızdır. Evrensellik farklı sistemlerin aynı kritik üstlere sahip olması olarak adlandırılır. Ksenon (Xe) ve Kükürt Florür (SF_2) farklı kritik sıcaklıklara sahip oldukları halde kritik üs değerleri aynıdır (1). Yani aynı evrensellik sınıfındaki tüm sistemler aynı kritik üstlere sahiptir (30,31).

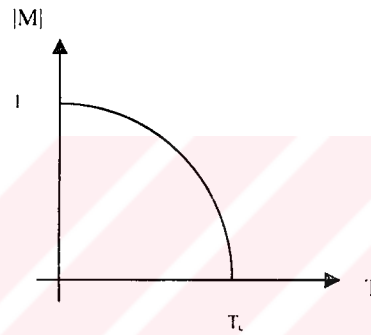
2.2. Düzen Parametresi

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

Klasik teori kritik üstler arasında n bağımlılığını açıklayamaz. n durumunun farkına göre kritik üsler arasında hafif farklar vardır. Buna göre düzen parametresinin tensörel karakteri ya da simetrisi oldukça önemlidir (23).

2.3. Ising Model

Ising model spinler arası etkileşimleri içeren ferromanyetik termodinamik niceliklerinin incelenmesini sağlayan bir modeldir. Bir ferromanyetik metal, dış manyetik alanın yokluğunda dahi kritik sıcaklık olarak bilinen Curie sıcaklığından düşük sıcaklıklarda, kendiliğinden mıknatıslanma oluşturacak şekilde düzenlenmiş spinlerin bir setidir. Kendiliğinden mıknatıslanma ferromanyetizmanın tanımlayıcı özelliğidir. Metalin sıcaklığı Curie sıcaklığının üstüne çıktığında manyetizasyon sıfır olmaktadır (şekil 2.1).



Şekil 2.1. $H=0$ da kendiliğinden manyetizasyon $|M|$ 'nin sıcaklıkla değişimi

Karakteristik özelliklerini belirli bir sıcaklıkta tamamen kaybeden sistemlerin “ikinci dereceden faz geçişi” yaptığı düşünülür. Faz geçişi öncesi sıfırdan farklı, sonrası sıfır olan niceliklere düzen parametresi denir. Bu modelde düzen parametresi manyetizasyondur. Kritik sıcaklığa her iki taraftan yaklaştırıldığında metalin özısı ve manyetik alınganlığı ıraksamaktadır. Curie-Weiss olarak bilinen Eş. 2.1 “ $T=T_c$ ’de manyetik alınganlık χ sonsuz olduğundan, dış manyetik alanın sıfır olması durumunda ($H=0$) manyetizasyonun (M) değeri bulunur” şeklinde yorumlanabilir.

$$\chi = \frac{M}{H} = \frac{C}{T - T_c} \quad [2.1]$$

Bu modelde incelenen sistem örgü konuları adı verilen N tane sabit noktadan oluşan, d boyutlu periyodik bir örgüdür. Genel Ising modelin düzenli bir örgünün köşelerinde bulunmaya zorlanmış spinlerden oluştuğu düşünülür. Örgünün geometrik

yapısı iki boyutta kare veya üçgen üç boyutta kübik veya hegzogonal, dört boyutta hiper kübiktir. Spinler $i=1,2,3,4,\dots,N$ indisi ile işaretlenir ve her bir örgü konumuna +1 veya -1 değerinden birisini alabilen N tane spin değişkeni takılmıştır. Sistemde tek değişken spindir ve S_i simgesi ile gösterilir. $S_i=+1$ ise i. örgü konumunun spin yukarı (eksene paralel) durumda olduğu, $S_i=-1$ ise i. örgü konumunun spin aşağı durumda olduğu anlaşılır. Verilen bir $\{S_i\}$ kümesi bütün sistemin konfigürasyonunu belirler. $\{S_i\}$ konfigürasyonuna sahip olan bir sistemin enerjisi aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır.

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

Burada I alt indisi Ising enerjisi, $\langle ij \rangle$ en yakın komşu spin çiftleri üzerinden toplamı göstermektedir. J_{ij} (en yakın komşu etkileşme sabiti) ve H dış manyetik alan, sabit olarak verilmektedir. Etkileşmenin izotropik olduğu durumda $J_{ij}=J$ alınmakta ve $J>0$ ise ferromanyetizma, $J<0$ ise antiferromanyetizma durumuna karşılık gelmektedir. Ising modelde bütün termodinamik fonksiyonlar E_I enerjili mümkün konfigürasyon üzerinden hesaplanmaktadır. $\{S_i\}$ spin kümesi mikrokantonik topluluk kavramına uymaktadır fakat analitik çalışmalarında kanonik topluluk kullanılmaktadır. E_I enerjili sistemin dağılım fonksiyonu aşağıdaki gibidir.

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

Z_I , kanonik topluluk için tanımlanan dağılım fonksiyonudur. Burada k Boltzmann sabitidir ve $k=\frac{1}{\beta T}$ eşitliğini sağlar. S_i spin değişkeni bağımsız olarak ± 1 değerini alabilir ve bu nedenle [2.3] eşitliği 2^N terimden oluşmaktadır. Termodinamik nicelikler genel olarak spin başına serbest enerjiden elde edilmektedir ve serbest enerji aşağıdaki gibi tanımlanabilir.

$$f(H,T) = -kTN^{-1} \log Z_I(H,T) \quad [2.4]$$

Serbest enerjiye bağılı olarak termodinamik nicelikler şu şekilde ifade edilmektedir.

$$U_1(H, T) = -kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{f}{kT} \right) \quad [2.5]$$

$$C(H, T) = \frac{\partial U_1}{\partial T} \quad [2.6]$$

$$M(H, T) = -\frac{\partial}{\partial H} \left(\frac{f}{T} \right) \quad [2.7]$$

$$\chi(H, T) = \frac{\partial M}{\partial H} \quad [2.8]$$

Burada U_1 iç enerji, C özısı, M mıknatıslanma ve χ ise manyetik alınganlıktır. Dış alan $H=0$ olduğunda mıknatıslanma düzen parametresi ismini alır. Ferromanyetik sistemlerde $M(0, T)$ sıfırdan farklıdır. Ising model faz geçişi yapabilen sistemleri temsil eden bir modeldir. Faz geçişi serbest enerji veya onun türevlerinde singülerlik (ıraksama) oluştuğunda ortaya çıkar. İkili alaşım, örgü gazı modelleri uygun parametrelerle Ising modele özdeş hale getirilebilir. Fiziksel sistemlerin yanı sıra bir çok alandaki problem Ising modele benzetilebilir. Bu nedenle Ising modelin çözümü oldukça önem kazanmaktadır.

2.3.1 Dört boyutlu Ising Model

Ising evrensellik sınıfı için üst kritik boyut dördtür ($d^*=4$). Dört boyutlu Ising modelinin kesin sonucu bilinmediğinden dolayı nümerik çalışmalar oldukça önemlidir. Monte Carlo simülasyonları dört boyutlu Ising modelinin kritik özelliklerini araştırmak için kullanılmaktadır. Renormalizasyon grup yaklaşımı, üst kritik boyutun altında kritik olayın anlaşılmasında oldukça başarılı olmuştur. Üst kritik boyutun üstü için ortalama alan teorisi geçerlidir. Renormalizasyon grup teorisine göre üst kritik boyutta ($d^*=4$) ortalama alan davranışına logaritmik

düzeltilmeler gereklidir. Kuvvet kanunu ıraksamaları için bu tahmin edilen logaritmik düzeltilmeler, dört boyutlu Ising modelinin ilk seri açılım sonuçlarında ortalama alan değerlerinden kritik üstlerin belirli sapmalarını izah etmek için kullanılmıştır. Bu Monte Carlo sonuçları ortalama alan teorisi için logaritmik düzeltilmeleri ve marjinal davranışın bazı kanıtlarını göstermektedir. Fakat modelin sonlu örgü ölçekleme analizinde sistematiklik yoktur ve sonlu sistemlerinin doğrudan Monte Carlo simülasyonlarıyla bu etkileri gözlemek ilginçlik arz etmektedir. Dört boyutlu Isig modeli gerçek manyetik sistemlere uygulanmamasına rağmen üst kritik boyutta logaritmik düzeltme olasılığının bir genel durum oluşturması beklenilmektedir. Üst kritik boyut üç olduğu zaman bu logaritmik düzeltilmeler gerçekte deneysel olarak gözlenebilir. Üstelik dört boyutlu Ising modelinin sonuçları sonlu örgü ölçekleme teorisi için ilginçlik göstermektedir (30).

2.4. Serbest Enerji, İç Enerji ve Özısı

Termodinamik limitte spin başına serbest enerji

$$F(H,T) = -kT \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \ln Z_1(H,T) \quad [2.9]$$

şeklinde ifade edilir. Fiziksel olarak büyük sistemlerin serbest enerjilerinin sistemin büyüklüğü ile orantılı olması beklenir. Örgünün eni, boyu ve yüksekliğinin aynı anda yada sırasıyla sonsuza gitmesi durumunda termodinamik limit aynı sonucu verir. Termodinamik nicelikler spin başına serbest enerjiden elde edilmektedir.

$X(s_i)$ sistemin S_i durumuna karşılık gelen toplam enerji veya mıknatıslanma gibi gözlenebilir bir özellik olmak üzere

$$\langle X \rangle = Z^{-1} \sum_s X(s) \exp[-E(s)/kT] \quad [2.10]$$

şeklinde tanımlanır (24).

İç enerji $U = \langle E \rangle$ şeklinde tanımlanabilir. Dolayısıyla eşitlik.2.10 'u kullanarak

$$U = Z^{-1} \sum_s E(s) \exp[-E(s)/kT] \quad [2.11]$$

ifadesi yazılabilir. Eşitlik [2.3] ve [2.11] 'i kullanarak

$$U = kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln Z \quad [2.12]$$

$$U = -kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{f}{kT} \right) \quad [2.13]$$

şeklinde iç enerji ifade edilir. Spin başına özısı ise

$$C(H, T) = \frac{\partial U_l}{\partial T} \quad [2.14]$$

olarak ifade edilir. Voronel 1963 yılında argonun (Ar) T_c yakınında sabit hacimde özısını ölçmüştür. Klasik teori özısının sadece kritik noktada süresiz sıçramaya sahip olduğunu tahmin eder. Örnek eşitlik [2.15] de $C_v(T)$ düz olarak artar fakat kritik sıcaklığın her iki yanında ani bir hızla artar.

$$C_v(TC^-) \neq C_v(TC^+) \quad [2.15]$$

Kritik sıcaklıkta C_v 'nin bir pike sahip olup olmadığı veya sonsuzda ıraksayıp ıraksamadığı oldukça önemlidir. Onsager özısını $C_v(T) = A \ln(t) + \text{sonlu belirsizlik}$ terimleri şeklinde tanımlar. $\alpha = 0$ (log) olması öz ısının singüler olmayan bir kısma sahip olmasındandır. Öz ısı $T < T_c$ için α' ve $T > T_c$ için α şeklinde iki üs ile tanımlanır. Teorik ve deneysel olarak $\alpha = \alpha'$ olduğu ispatlanmıştır.

2.4.Kendiliğinde Mıknatıslanma M, Manyetik Alınganlık χ ve Özısı C'nin Sıcaklık Bağımlılıkları

Kritik sıcaklık T_c civarında termodinamik niceliklerin davranışı aşağıda tanımlanan indirgenmiş sıcaklık ε' a bağlı olarak incelenmektedir.

$$\varepsilon = (T - T_c) / T_c \quad [2.16]$$

$\varepsilon \rightarrow 0$ limitinde, herhangi bir termodinamik nicelik sonlu olan düzenli bir kısım ve ıraksayan "singular" bir kısma ayrılabilir. "Singular" kısımların ε' ın bir kuvveti ile orantılı olarak değiştiği kabul edilmektedir. Bu kuvvetler genel olarak kesirlidir.

Termodinamik niceliklerden kendiliğinden mıknatıslanma (düzen parametresi) M, dış manyetik alanın olmadığı durumda, kritik sıcaklığın altında T'nin azalan bir fonksiyonudur ve T_c de sıfırdır. T'nin T_c 'ye çok yaklaştığı durumlar için iki boyutta M aşağıda verilen kuvvet kanununa uygun olarak değişmektedir.

$$M(0,T) \rightarrow \varepsilon^{\beta'} \quad \varepsilon \rightarrow 0^+ \quad [2.17]$$

$$M(0,T) \rightarrow (-\varepsilon)^{\beta} \quad \varepsilon \rightarrow 0^- \quad [2.18]$$

Burada β ve β' kendiliğinden mıknatıslanma kritik üsleri olarak adlandırılmakta ve değerleri iki boyutlu Ising model için $\beta = 0.125$, $\beta' = 0.875$ (5,25), üç boyutlu ve dört boyutlu Ising model için sırası ile $\beta = 0.30$, $\beta' = 0.63$ (20), $\beta = 0.50$, $\beta' = 0.35$ (21) olarak verilmektedir.

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

$$kT\chi(0,T) \rightarrow \varepsilon^{-\gamma} \quad \varepsilon \rightarrow 0^+ \quad [2.19]$$

$$kT\chi(0,T) \rightarrow (\varepsilon)^{-\gamma'} \quad \varepsilon \rightarrow 0^- \quad [2.20]$$

Burada γ ve γ' (her iki haldeki orantı katsayıları) birbirinden farklıdır. Manyetik alınganlık kritik üssü iki boyutlu Ising model için teorik olarak $\gamma = \gamma' = 1.75$ (5,25), üç boyutlu ve dört boyutlu Ising model için sırası ile $\gamma = \gamma' = 1.25$ (20), $\gamma = \gamma' = 1.02$ (21) değerleri ile verilmektedir.

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

$$C(0,T) \rightarrow \varepsilon^{-\alpha} + b^+ \quad \varepsilon \rightarrow 0^+ \quad [2.21]$$

$$C(0,T) \rightarrow (-\varepsilon)^{-\alpha'} + b^- \quad \varepsilon \rightarrow 0^- \quad [2.22]$$

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

3. ISING MOGELİN SİMÜLASYONU İÇİN ALGORİTMALAR

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

Monte Carlo ve Molekül Dinamiği ilk simülasyon çalışmaları olarak bilinir. Molekül Dinamiğinde ilk simülasyon teknikleri, tanımlanan bir sistem içinde hareket boyunca enerjinin sabit kalması düşünülerek ortaya çıkmıştır. Sabit toplam enerjide klasik hareket denklemlerini nümerik olarak çözmekten ibarettir. Mikrokanonik kümede parçacık sayısı (N), hacim (V) ve toplam enerji (E) sabit olarak alınır. Etkileşme potansiyellerinin bilinmesi parçacıklar üzerine etkiyen kuvvetlerin hesaplanmasını sağlar. Sonra mikrokanonik topluluk için bir Δt zaman adımında Newton hareket denklemleri çözülür. Kısa bir zaman sonrasında i. parçacığın X_i koordinatları ve V_i hızları aşağıdaki ifadelerle göre bulunabilir.

$$X_i(t + \Delta t) = X_i(t) + V_i(t) \Delta t \quad [3.1]$$

$$V_i(t + \Delta t) = V_i(t) + \frac{f_i(t)}{m_i} \Delta t \quad [3.2]$$

Bu sistemde sonuç alabilmek için sisteme uygun potansiyellerin seçilmesi ve hareket denklemlerini çözecek algoritmanın iyi kurulması gerekmektedir.

Molekül dinamiği için öyle bir hücre tanımlanmalıdır ki parçacık sayısı ve hücrenin hacmi korunuyor olsun. Böyle bir sistem için toplam kinetik enerji

$$E_k = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{m_i} \quad [3.3]$$

ve sistemin potansiyel enerjisi

$$U(r) = \sum_{i < j} U(r_{ij}) \quad [3.4]$$

Burada r_{ij} , i. ve j. parçacıklar arasındaki mesafeyi göstermektedir. Böyle bir sistemin Hamiltonyeni

$$H = \frac{1}{2} \sum_i \frac{p_i^2}{m_i} + \sum_{i < j} U(r_{ij}) \quad [3.5]$$

olur. Sistemin hareket denklemleri ise

$$m \frac{dr_i}{dt} = P_i \quad \text{ve} \quad \frac{dP_i}{dt} = \sum_{j=1} F(r_{ij}) \quad [3.6]$$

olur.

Molekül Dinamiği arasında yer alan simülasyon çalışmalarının temeli, ilk olarak 1953 yılında Metropolis ve arkadaşları tarafından ortaya konulan algoritmaya dayanmaktadır.

Bu çalışmalar zamanla geliştirilmiş ve bir çok yeni simülasyon metodu ile algoritma ortaya çıkmıştır.

**TC YÜKSEKÖĞRETİM KURULU
BİLİMSEL ARAŞTIRMA PROJELERİ KURULU**

3.1. Metropolis Algoritması

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

$$P(\alpha \rightarrow \alpha') = \begin{cases} A^{-1} & E_{\alpha'} < E_{\alpha} \\ A^{-1} e^{-\beta(E_{\alpha'}-E_{\alpha})} & E_{\alpha'} > E_{\alpha} \end{cases} \quad [3.7]$$

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

3.2. Swendsen-Wang Algoritması

Spin kümesi "cluster" algoritmalarından biri olan Swendsen-Wang algoritması 1987 yılında Swendsen ve Wang tarafından sunulmuştur. Spinlerin kendiliğinden ters çevrilmesi ve spin kümelerinin "cluster" şeklinin belirlenmesine sistemin kendisinin karar vermesi fikrine dayanan ilk başarılı çalışmadır (3,26). Bu Ising modeline de uygulanabilen bir algoritmadır. Öncelikle en yakın komşu l ve m hücresi seçilir. Bu l ve m hücreleri arasındaki katkıların çıkarıldığı eskisine eşit yeni bir hamiltonyen tanımlanır. Daha sonra s_i ve s_m spinlerinin aynı ya da zıt yönde olmalarına göre bu hamiltonyene uyan üleşim (partition) fonksiyonu hesaplanır. Swendsen ve Wang,

spin temsilinden bağ temsiline geçen ve tekrar geri dönen bir algoritma teklif etmişlerdir. Bu algoritma şöyledir.

- 1- Bir spin konumu alınır. Aynı yönde olanlar birleştirilerek bir bağlantılar ağı oluşturulur.
- 2- Bu bağlantılar $1 - e^{-4\beta J}$ ihtimali ile korunur veya $e^{-4\beta J}$ ihtimali ile silinir. Bu basamak büyük spin kümelerini iki ya da daha fazla küçük spin kümesine böler.
- 3- Temel birimler olarak yeni daha küçük spin kümelerinin yönelimleri ele alınır ve eşit olasılıkla rasgele olarak aşağı veya yukarı yönlendirilir.
- 4- Son olarak, yeniden yönlendirilmiş spin kümelerinden başlangıçtaki spin örgüsü yeniden oluşturulur.

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

3.3. Wolff Algoritması

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

- 1- Örgü üzerinde rasgele bir i hücresi seçilir.

- 2- Bütün komşu j hücreleri ziyaret edilir ve $P_{ekle}(S_i, S_j) = 1 - e^{-\min(0, 4\beta J S_i S_j)}$ ihtimaliyle j örgüsü i 'yi içeren spin kümesine eklenir. Ferromanyetik bir model için eğer spinler zıt yönde iseler P_{ekle} sıfır ve spinler aynı yönde iseler $1 - e^{-4\beta J}$ dir.
- 3- i 'li spin kümesi ile birleşen yeni hücrelerin her biri j indisine eşit alınarak ikinci basamak tekrarlanır.
- 4- Daha fazla yeni hücre ekleninceye kadar üçüncü basamak tekrarlanır.
- 5- Spin kümesindeki bütün hücelere ait spinler yön değiştirir ve işlem tamamlanır.

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

3.4. Creutz' un Gezgin “ Demon” Algoritması

1983 yılında M. Creutz tarafından geliştirilen simülasyon yöntemi Metropolis ve arkadaşlarının algoritması ile molekül dinamiği arasına girmiştir (13). Öncelikle “demon” (spine eşlenik momentum) denilen bir serbestlik derecesi tanımlanmaktadır. Bu yeni değişken molekül dinamiğindeki eşlenik momentumun benzeridir. Molekül dinamiğindeki eşlenik momentum kinetik enerjinin hesaplanmasında kullanılmasına benzer şekilde “demon”da kinetik enerji taşır. Sistemin toplam enerjisi korunacak şekilde gezgin “demon” rasgele olarak spinleri ziyaret eder. Demon bir hücreye ulaştığı zaman uygun bir spini ters çevirmek için girişimde bulunur. Eğer spinin enerjisi düşükse “demon” spine enerji aktarır ve spinin ters çevrilmesine yetecek

kadar enerji aktarılmışa spin ters çevrilir. Aksi takdirde başka uygun bir hücredeki spini ters çevirmek için hareket eder. Demon, enerjisini üstel olarak aktarır. Büyük sistemlerde demonun enerjisi toplam enerjinin sadece küçük bir kısmını gösterir. Demon'un spinleri rasgele ziyaret etmesinden dolayı bu algoritmaya Creutz'un gezgin "demon" algoritması denir. Bu algoritmada tek bir gezgin "demon" kullanılabileceği gibi birden fazla gezgin "demon" da kullanılabilir.

3.5. "Cellular Automaton" lar

1983 yılında ilk temel teorisi Wolfram tarafından verilen "Cellular automaton" lar ilk olarak Neuman ve Ulam tarafından "cellular space" adı ile biyolojik sistemlerin simülasyonu için önerilmiştir (14,15,27). Kinetik enerji terimi içeren dinamik Ising modeli ve diğer örgü spin sistemleri basit bir "cellular automaton" problemi olarak ele alınmaktadır. Daha genel olarak makroskobik seviyede her hücre birçok molekül ihtiva eden bir bölgeyi temsil edebilir ve onun değeri birkaç farklı mümkün fazlardan birini temsil edebilir. "CA" bu şekliyle doğrusal olmayan kimyasal sistemler için kesikli modeller olarak kullanılmıştır. "CA" larda uzay ve zaman kesikli değerlere sahiptir. Sonsuza kadar genişletilebilen düzenli hücreler örgüsünden oluşur. Örgünün her bir hücresinde kesikli değerler alabilen değişkenler yer almaktadır. Bir "CA" bu hücre değişkenlerinin değerleri ile belirlenmektedir. Genel olarak basit bir "cellular automaton" 0 veya 1 değerli hücre veya sitelerin bir satırından oluşur. Bu değerler kesikli her zaman adımı sırasında yenilenir. "Cellular automaton" un kesikli zaman adımlarındaki gelişimi sırasında bir hücre değişkeni bölgesel bir kurala uyarak bir önceki zaman adımında kendisi ve kendisine komşu hücrelerdeki değişkenlerin değerlerine bağlı olarak yeni değerini alır. Bir hücrenin komşusu ifadesi ile kendisi ve kendisine en yakın komşu hücreler kastedilmektedir. Hücrenin herhangi bir zaman adımındaki değişkenlerinin değerleri özdeş bir kural yardımıyla eş zamanlı olarak elde edilmektedir. Bir boyutlu "CA" larda bir hücrenin bir sonraki zaman adımında alacağı değeri belirleyen bölgesel kural, en yakın üç hücre değerinin fonksiyonu olarak tanımlanmaktadır. i . konumdaki bir hücrenin değeri a_i ile verilirse bu hücrenin yeni değerini veren kural

$$a'_{i'+1} = f(a'_{i-1}, a'_i, a'_{i+1}) \quad [3.8]$$

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

- i. Sistemin yapısına uygun düzenli bir örgü (örneğin iki boyutta kare, üçgen, üç boyutta küp, daha yüksek boyutlarda soyut küp) seçilir.
- ii. Örgüyü oluşturan hücrelerin sahip olabileceği hallere karşılık gelen değişken veya değişkenler belirlenir.
- iii. Hücrelerin birbiriyle etkileşme şeklini ve gelişimini sağlayan bir bölgesel kural tanımlanır.

Fiziksel sistemlerin yanı sıra biyoloji, kimya ve sosyal bilimlerdeki bir çok problem bir “cellular automato” olarak incelenebilmektedir. Biyolojide DNA’nın kopyasını yapan fonksiyonun bulunması, kalbin hızlı ya da yavaş çarpması, “filamentous” organizmalarının büyütülmesi “CA” ile modellenmiştir. Kimyada ise uzaysal difüzyon ile çiftlenmiş reaksiyonların bir ağını içeren lineer olmayan kimyasal sistemler “CA” olarak modellenmiştir (27).

3.5.1. Q2R “Cellular automaton”ı

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

alan dikkate alınmaz. İç enerji bütün simülasyon süresince sabit kaldığından özısı enerji dalgalanmaları kullanılarak hesaplanamamaktadır (10,16,17,18).

3.5.2. Creutz “Cellular Automaton”ı

1986 yılında M. Creutz tarafından geliştirilen simülasyon yöntemi Metropolis ve arkadaşlarının algoritması ile molekül dinamiği arasına girmiştir (9). Bu algoritma $2 \leq d \leq 8$ boyutlu uzaylardaki Ising modellerinin simülasyonlarında başarılı olmuştur (19,28). Bu tez çalışmasında Creutz “cellular automaton”ında dört boyutlu Ising modelin simülasyonu yapılmaktadır. Her bir hücreye altı ikili “bit” karşılık getirilmektedir. Hücre değişkenlerinin alacağı değerler o değişkenin bir önceki zaman adımındaki kendi değerleri ile en yakın komşu değerlerinden elde edilmektedir. Altı ikili “bit”ten ilki B_i Ising spinidir. 0 veya 1 değerini alabilir. $S_i = 2B_i - 1$ olmak üzere sistemin Ising spin enerjisi H_I aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır.

$$H_I = -J \sum_{ij} S_i S_j \quad [3.9]$$

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

Kalan 5 “bit”ten dördü “demon” veya spine eşlik eden momentuma karşılık gelmektedir. D_1, D_2, D_3 ve D_4 ile gösterilen bu bitler “0” veya “1” değerini alabilir. Buna göre (0,15) aralığındaki tamsayıları oluşturmaktadırlar. Yerleşik “demon”a ait kinetik enerji bu tamsayı değerlerinin dört katını almaktadır. Sistemin toplam enerjisi

$$H = H_K + H_I \quad [3.10]$$

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

$$\langle E_D \rangle = \sum_{n=0}^{15} 4n e^{-4n\beta} / \sum_{n=0}^{15} e^{-4n\beta} \quad [3.11]$$

Altıncı “bit” “cellular automaton” ın zamanla dama tahtası düzeninde gelişimini sağlamaktadır. Her bir zaman adımında dama tahtasının siyah hücrelerine kural uygulanıp rengi beyaza çevrilir. Beyaz hücrelerin ise kural uygulanmaksızın sadece rengi siyaha çevrilir. Bir hücrenin yenilenmesi için spini ters çevrilir. Sistemin iç enerji değişimi hesaplanır. Toplam enerji H korunmak üzere, eğer sistemin iç enerjisindeki değişim bu hücreye ait momentum değişkenine verilebilecek veya ondan alınabilecek kadarsa, o zaman bu spinin yönünde değişiklik yapılır. Aksi halde spinin yönü ve momentumu değiştirilmez. Başlangıçta bütün spinler aşağı veya yukarı yönde alınırlar. İlk kinetik enerji örgüye rasgele verilir. Toplam enerjide sınırlama devam ettiği müddetçe rasgele hareket, konfigürasyon uzayı boyunca devam eder. Demon enerjisinin hesabı yapılırken bit sayısı göz önünde bulundurulur. Çünkü demon enerjisinin alacağı enerji değerleri bit sayısına bağlı olarak değişmektedir. İki bitten oluşan demon (0’dan 3’e kadar) dört enerji seviyesine, üç bitten oluşan demon (0’dan 7’e kadar) sekiz enerji seviyesine, dört bitten oluşan demon (0’dan 15’e kadar) on altı enerji seviyesine sahiptir. Demon enerjisi bu tam sayı değerlerinin dört katıdır. İki, üç ve dört boyutlu uzayda bir spin ters çevrildiğinde Ising enerjisinde meydana gelen değişim (ΔH_I), iki boyutlu uzayda 8,4,0,-4,-8 değerlerini, üç boyutlu uzayda 12,8,4,0,-4,-8,-12 değerlerini, dört boyutlu uzayda 16,12,8,4,0,-4,-8,-12,-16 değerlerini almaktadır.

3.5.3. Creutz cellular automatonda termodinamik niceliklerin hesabı

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

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

$$P(E_i) \rightarrow \exp(-4\beta E_i) \quad [3.12]$$

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

$$\langle E_D \rangle = \sum_{n=0}^{15} 4ne^{-4n\beta} / \sum_{n=0}^{15} e^{-4n\beta} \quad [3.13]$$

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

$$M = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i \quad [3.14]$$

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

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

$$H_i = -\frac{1}{2N} \sum_{j'} S_i S_{j'} \quad [3.15]$$

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} = L^3 \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{kT} \quad [3.16]$$

Bu çalışmada dış manyetik alanın sıfır olduğu durum göz önüne alınmaktadır. Bu yüzden [3.16].eşitliği, manyetik alınganlık için dış manyetik alanın varlığında elde edilen ifadenin $H \rightarrow 0$ limitine karşılık gelmektedir.

Özısı (C), aşağıda verilen ifade yardımıyla hesaplanır.

$$\frac{C}{k} = \frac{\partial H_i}{\partial T} = L^4 \frac{\langle H_i^2 \rangle - \langle H_i \rangle^2}{(kT)^2} \quad [3.17]$$

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



4.BULGULAR

Bu çalışmada $L=6$ sonlu hiper kübik örgüde dört "bit" için başlangıç konfigürasyonu rastgele seçilmiş üç ayrı sayı üretici kullanarak 600, 2400, 4800 ve 9600 zaman adımında kritik sıcaklık civarında öz ısı (C), manyetik vektör (manyetizasyon) (M) ve manyetik alınganlık (χ) değerleri verilmiştir. T -C, T- χ , T -M grafikleri çizilerek $T_c^c(L)$, $T_c^X(L)$ değerleri verilmiştir. Statik kritik üsler, genel olarak ilgili termodinamik kritik sıcaklık ve civarında sonlu örgülerde yapılan ölçümlerden, sonlu örgü ölçekleme teorisi yardımı ile hesaplanabilir (17,20,21). Bunun yanı sıra aşağıdaki ifade kullanılarak sonsuz örgü kritik üsleri ($q(\infty)$) elde edilebilir. Ancak bu çalışma tek bir $L=6$ sonlu örgü için yapıldığından sonsuz kritik üsleri elde edilmemiştir.

$$q(L)=q(\infty)+a/L \quad [4.1]$$

Bu ifadede $q(L)$ sonlu örgü için termodinamik niceliğin kritik üssü olup, $\log Q(L,T)$ 'nin $\log \epsilon$ 'na karşılık değişiminin eğiminden elde edilmektedir. a bir sabittir, $T(L)$ ilgili niceliğin doğrusal boyutu L olan sonlu örgü kritik sıcaklıktır.

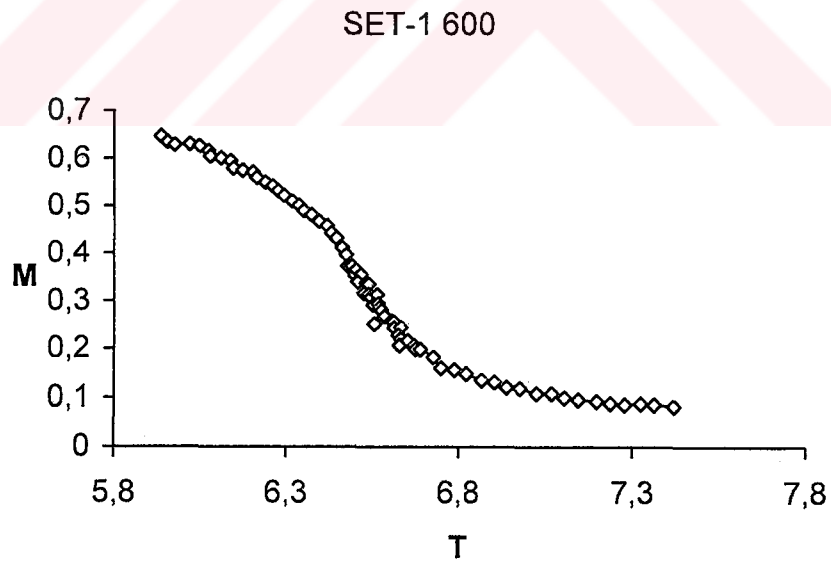
Bu çalışmada dört boyutlu Creutz algoritması için termodinamik niceliklerin sıcaklıkla değişim eğrilerini oluşturmak amacı ile farklı sıcaklıklar karşılık gelen başlangıç konfigürasyonları, örgünün bütün değişkenleri aynı yönlü seçilerek yapılmıştır.

4.1. Termodinamik Niceliklerin Sıcaklıkla Değişimleri

4.1.1 Kendiliğinden Mıknatıslanma M

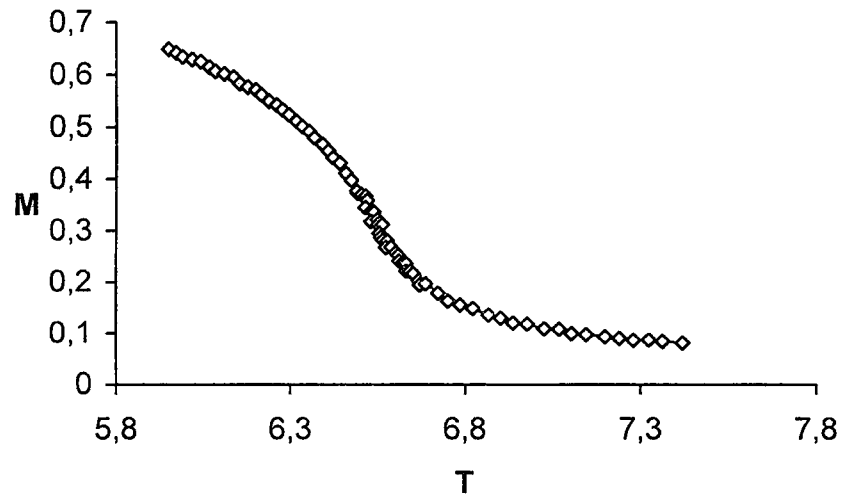
Sonlu örgü için kendiliğinden mıknatıslanma (M)'nin $L=6$ örgüsünde sıcaklığa karşı grafikleri, set 1 ve üç ayrı setin ortalamalarının kritik sıcaklık civarındaki 0.6×10^5 Monte Carlo adımında Şekil 4.1.a, b de, 2.4×10^5 Monte Carlo adımında Şekil 4.2.a,b de, 4.8×10^5 Monte Carlo adımında Şekil 4.3.a,b de ve 9.6×10^5 Monte Carlo adımında Şekil 4.4.a,b de verilmiştir.

Sonsuz bir sistem için kendiliğinden mıknatıslanmanın kritik sıcaklık ve daha büyük sıcaklıklarda sıfır olması şartı aşağıda sıcaklıkla değişimlerin verildiği grafiklerde görülmektedir.



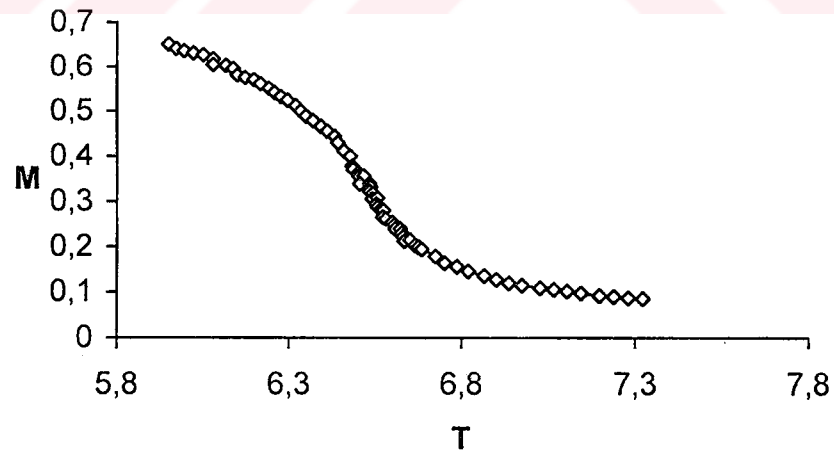
Şekil 4.1.a. Kendiliğinden mıknatıslanmanın 0.6×10^5 Monte Carlo adımında sıcaklığa karşı grafiği.

3 SET ORT 600

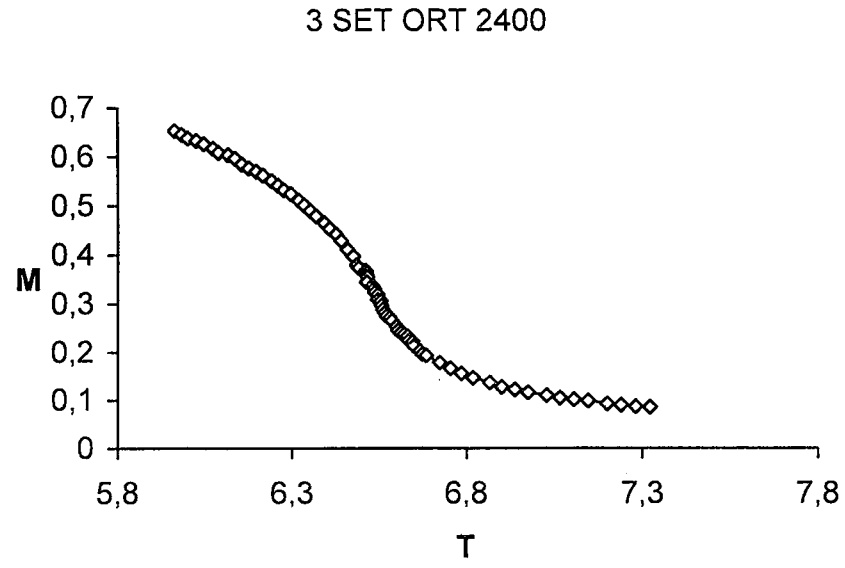


Şekil 4.1.b. Kendiliğinden mıknatıslanmanın 0.6×10^5 Monte Carlo adımımda üç set ortalamasının sıcaklığa karşı grafiği.

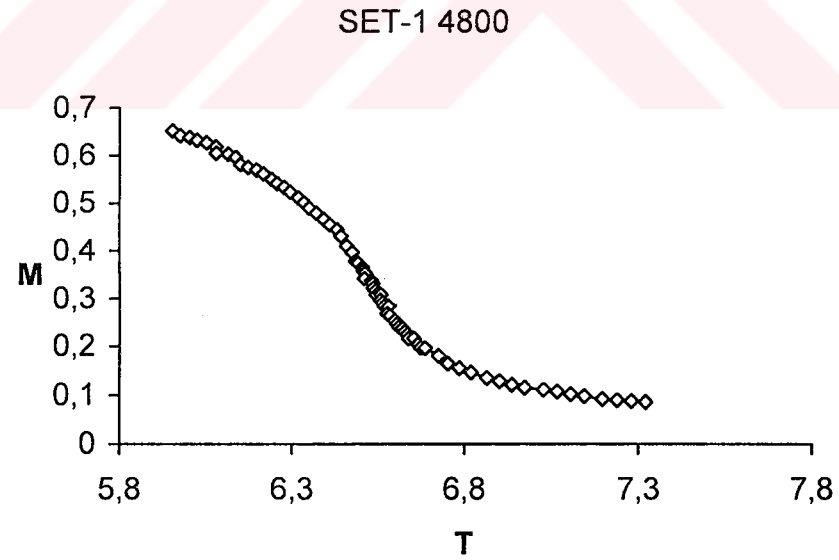
SET-1 2400



Şekil 4.2.a. Kendiliğinden mıknatıslanmanın 2.4×10^5 Monte Carlo adımımda sıcaklığa karşı grafiği.

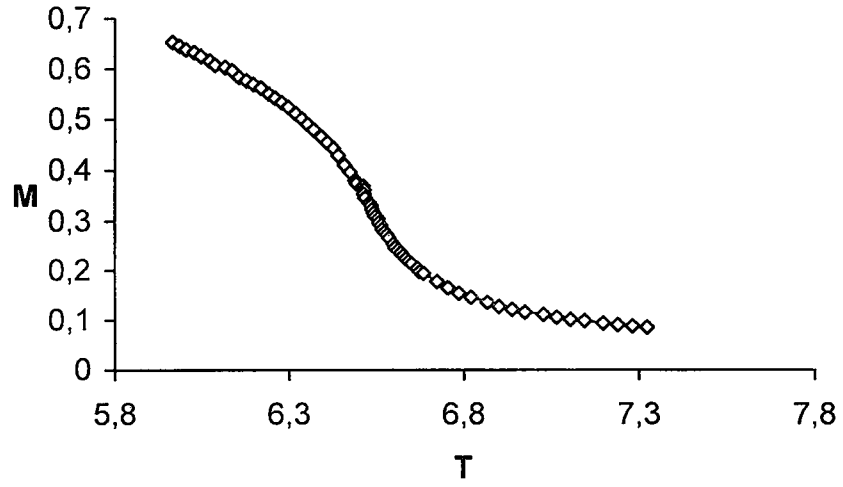


Şekil 4.2.b. Kendiliğinden mıknatıslanmanın 2.4×10^5 Monte Carlo adımımda üç set ortalamasının sıcaklığa karşı grafiği.



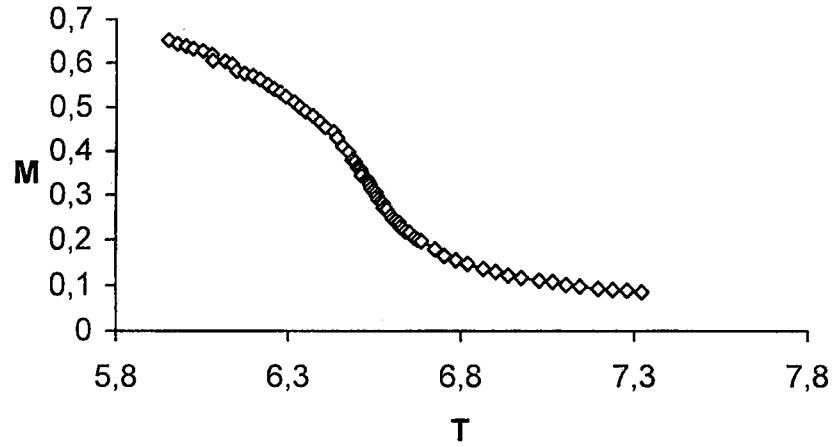
Şekil 4.3.a. Kendiliğinden mıknatıslanmanın 4.8×10^5 Monte Carlo adımımda sıcaklığa karşı grafiği.

3 SET ORT 4800

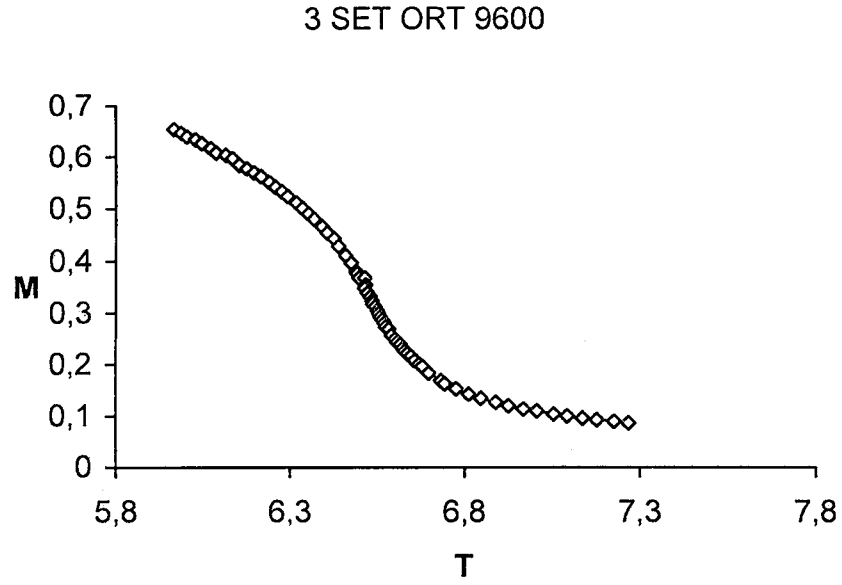


Şekil 4.3.b. Kendiliğinden mıknatıslanmanın 4.8×10^5 Monte Carlo adımında üç set ortalamasının sıcaklığa karşı grafiği.

SET-1 9600



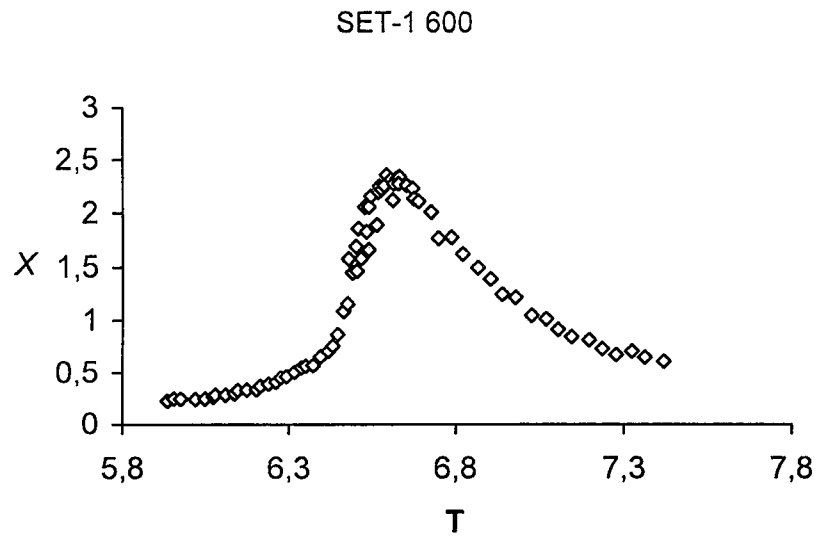
Şekil 4.4.a. Kendiliğinden mıknatıslanmanın 9.6×10^5 Monte Carlo adımında sıcaklığa karşı grafiği.



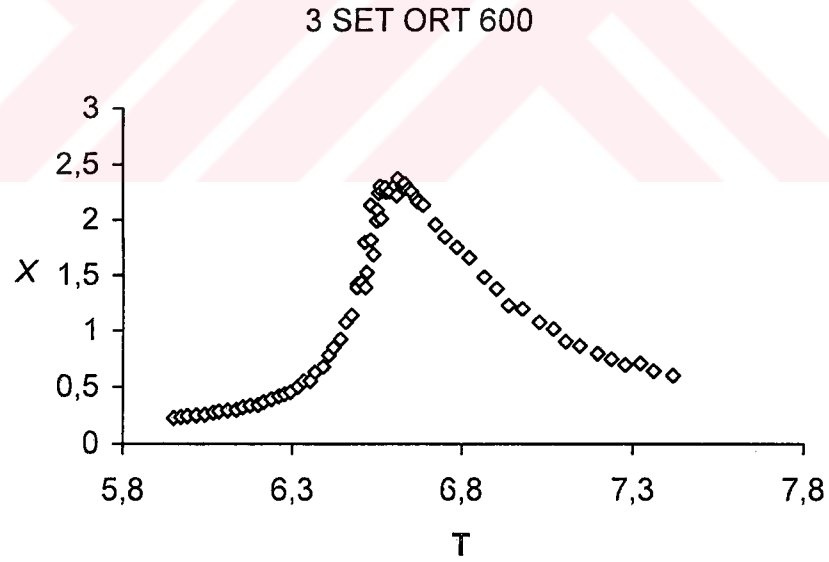
Şekil 4.4.b. Kendiliğinden mıknatıslanmanın 9.6×10^5 Monte Carlo adımında üç set ortalamasının sıcaklığa karşı grafiği.

4.1.2 Manyetik alınganlık χ

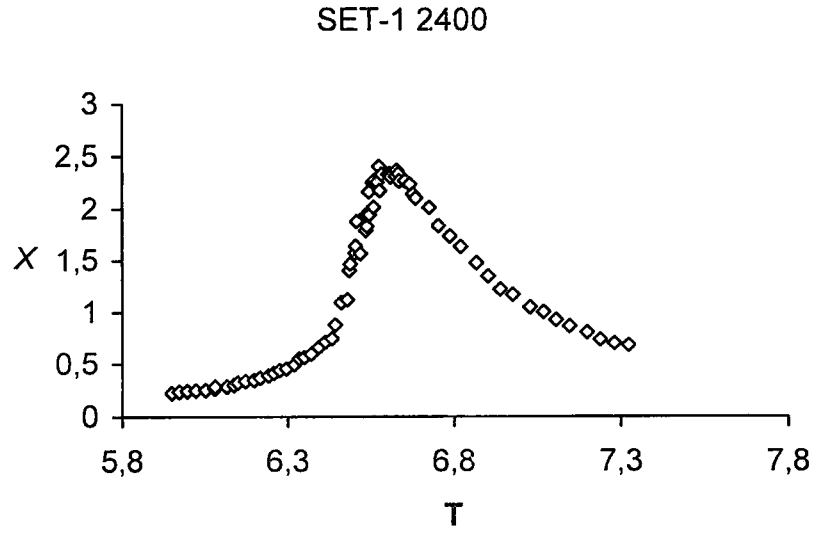
Sonlu örgü $L=6$ için kendiliğinden mıknatıslanmanın dalgalanmalarından hesaplanan manyetik alınganlığın sıcaklığa karşı değişimleri kritik sıcaklık civarındaki 0.6×10^5 Monte Carlo adımında Şekil 4.5.a, b de, 2.4×10^5 Monte Carlo adımında Şekil 4.6.a,b de, 4.8×10^5 Monte Carlo adımında Şekil 4.7.a,b de ve 9.6×10^5 Monte Carlo adımında Şekil 4.8.a,b de verilmiştir. Manyetik alınganlığın maksimum kritik sıcaklığı T_c^Z dir.



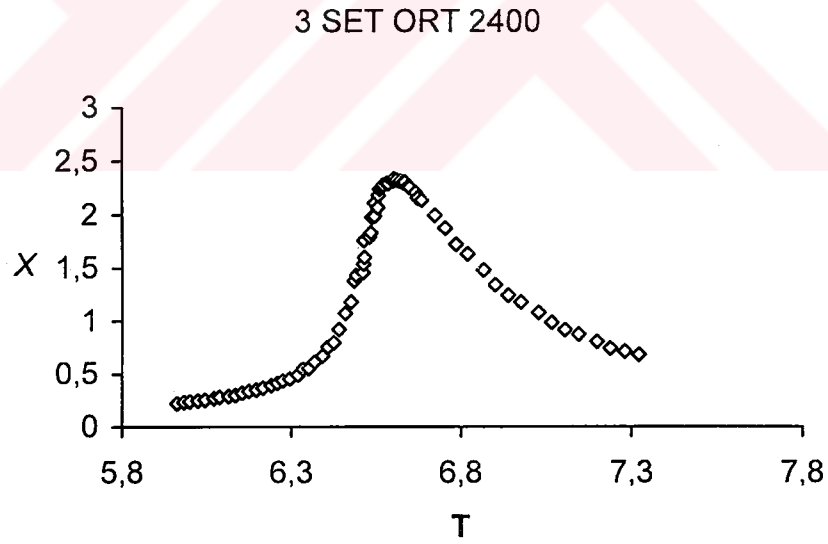
Şekil 4.5.a. Manyetik alınganlığın $0,6 \times 10^5$ Monte Carlo adımında sıcaklığa karşı grafiği.



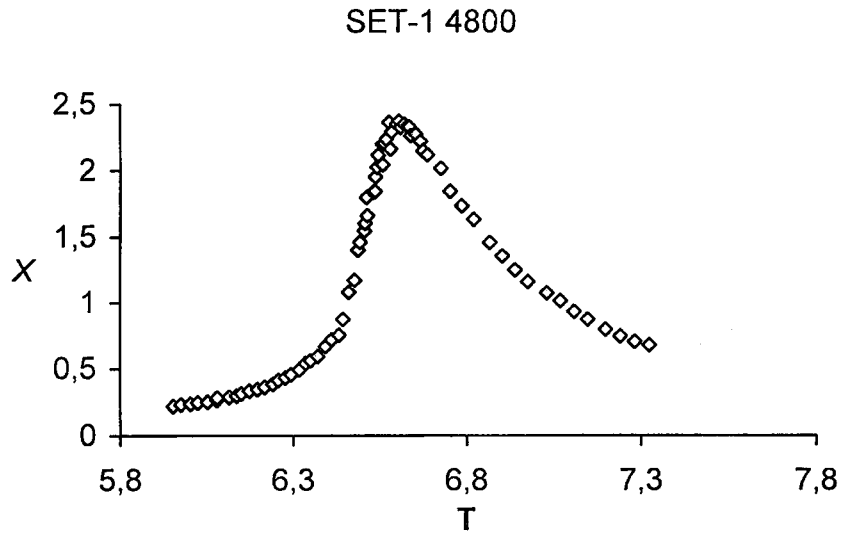
Şekil 4.5.b. Manyetik alınganlığın $0,6 \times 10^5$ Monte Carlo adımında üç set ortalamasının sıcaklığa karşı grafiği.



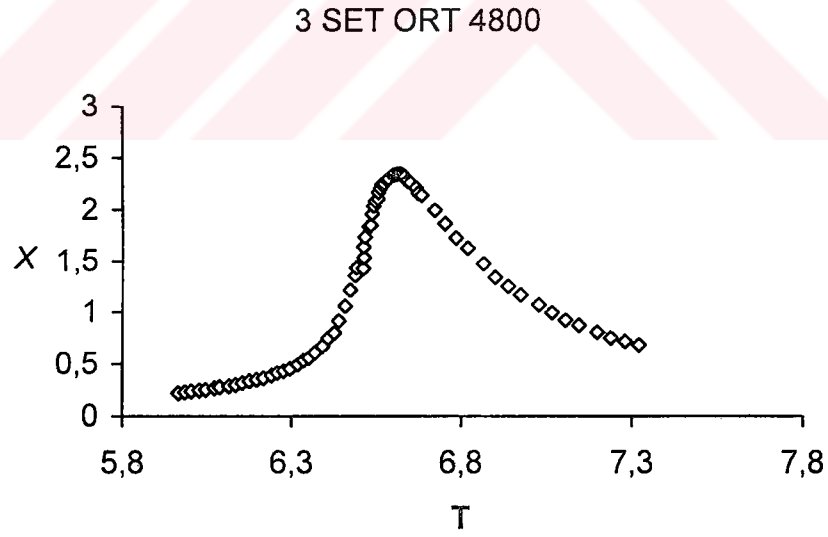
Şekil 4.6.a. Manyetik alınganlığın 2.4×10^5 Monte Carlo adımında sıcaklığa karşı grafiği.



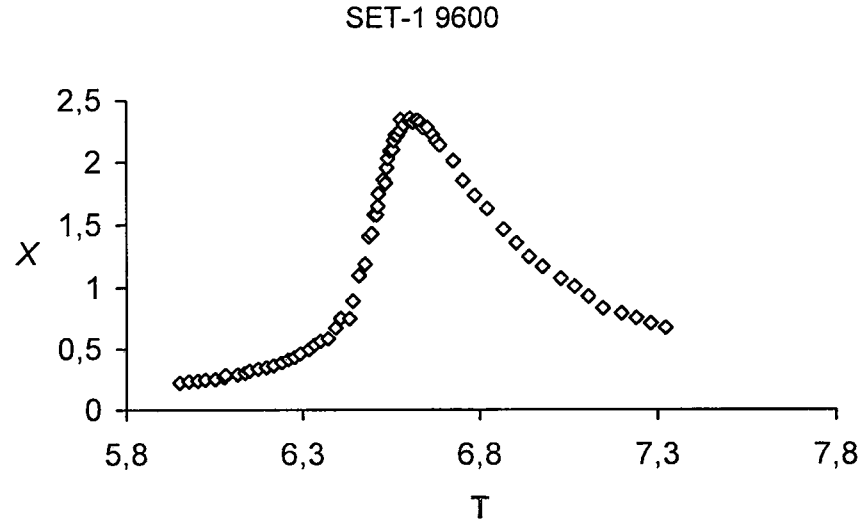
Şekil 4.6.b. Manyetik alınganlığın 2.4×10^5 Monte Carlo adımında üç set ortalamasının sıcaklığa karşı grafiği.



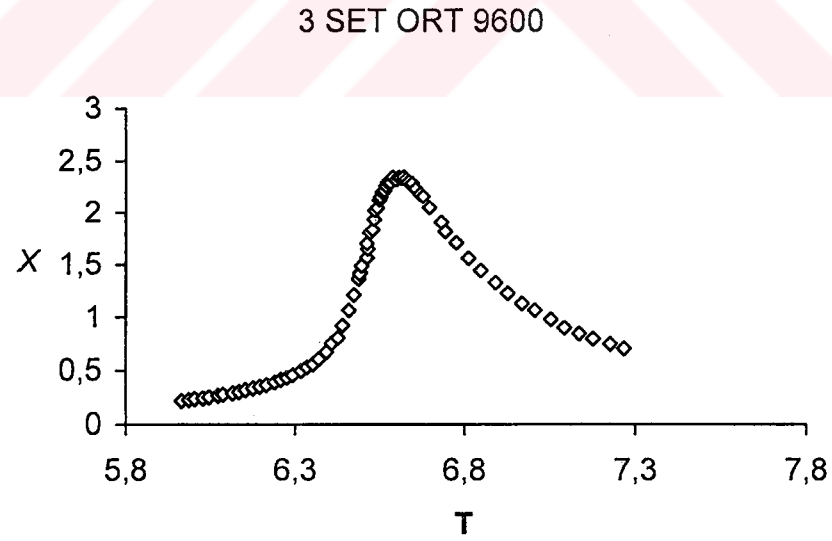
Şekil 4.7.a. Manyetik alınganlığın 4.8×10^5 Monte Carlo adımında sıcaklığa karşı grafiği.



Şekil 4.7.b. Manyetik alınganlığın 4.8×10^5 Monte Carlo adımında üç set ortalamasının sıcaklığa karşı grafiği.



Şekil 4.8.a. Manyetik alınganlığın 9.6×10^5 Monte Carlo adımında sıcaklığa karşı grafiği.

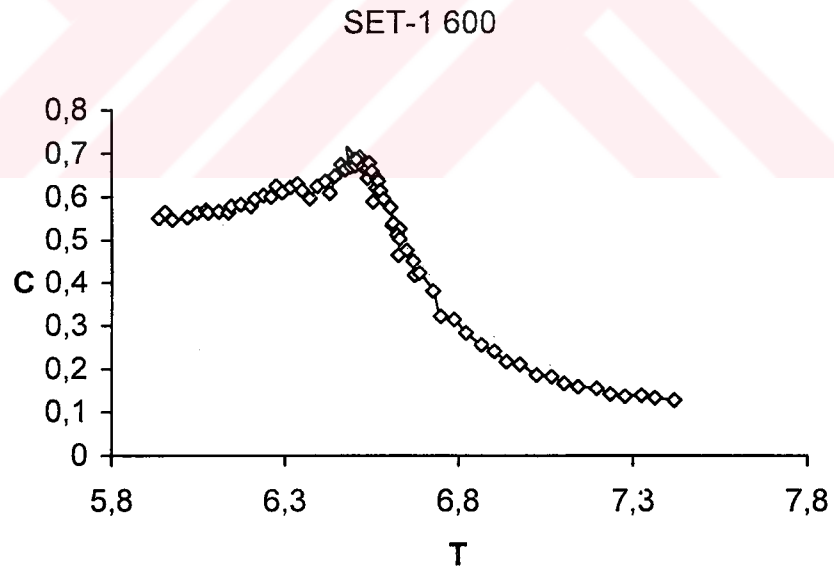


Şekil 4.8.b. Manyetik alınganlığın 9.6×10^5 Monte Carlo adımında üç set ortalamasının sıcaklığa karşı grafiği.

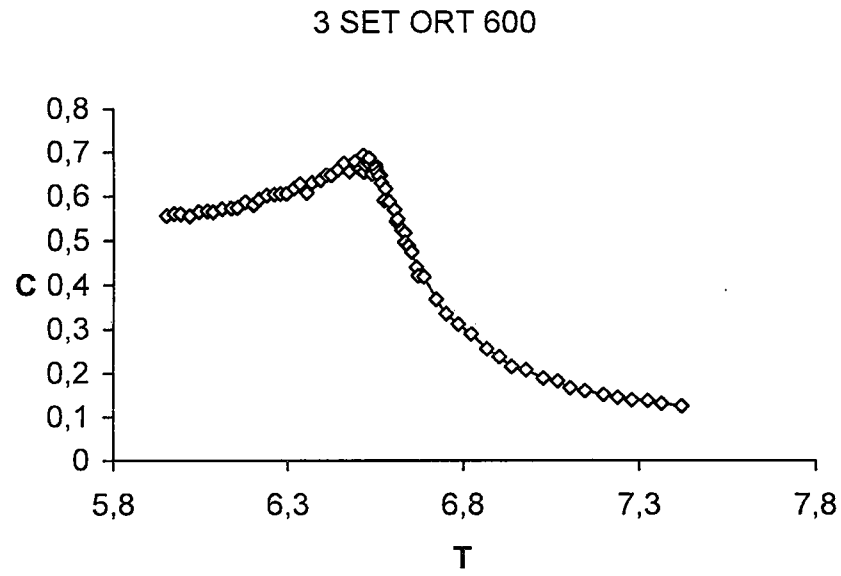
4.1.3 Özısı C

Özısı (C)'nin $L=6$ örgüsünde sıcaklığa karşı grafikleri set-1 ve üç ayrı setin ortalamalarının kritik sıcaklık civarında 0.6×10^5 Monte Carlo adımında Şekil 4.9.a, b de, 2.4×10^5 Monte Carlo adımında Şekil 4.10.a,b de, 4.8×10^5 Monte Carlo adımında Şekil 4.11.a,b de ve 9.6×10^5 Monte Carlo adımında Şekil 4.12.a,b de verilmiştir.

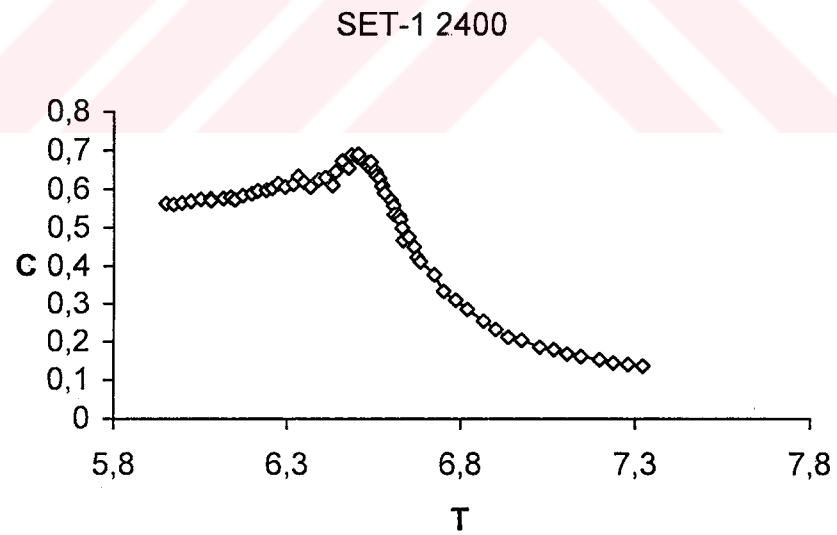
İç enerji dalgalanmalarından hesaplanan özısı değerleri belirli sıcaklıklara karşı her set için farklı bir maksimum değer vermektedir. Zaman adımı arttıkça öz ısı hesaplamasının daha sağlıklı olduğu görülmektedir.



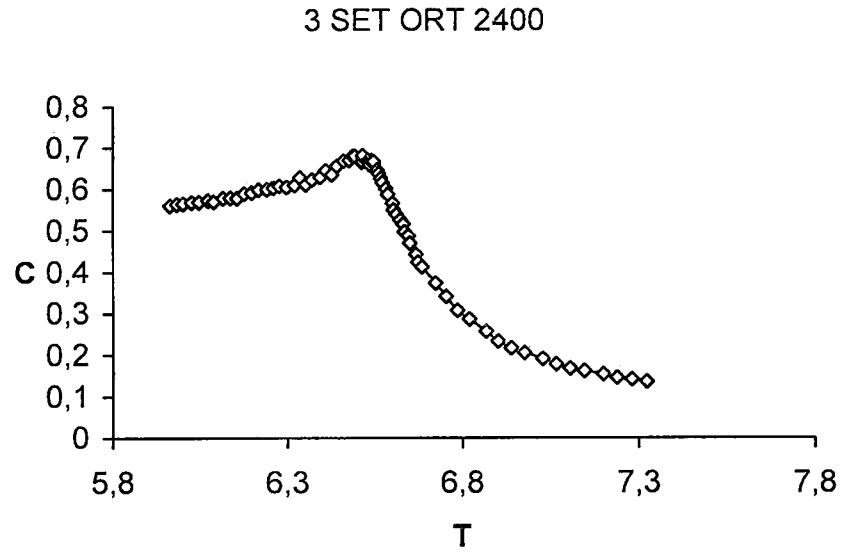
Şekil 4.9.a. Özısının 0.6×10^5 Monte Carlo adımında sıcaklığa karşı grafiği.



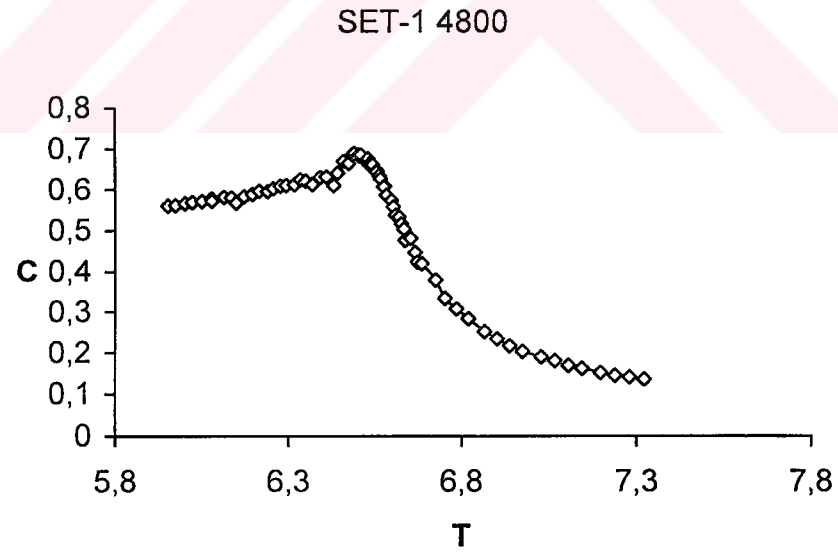
Şekil 4.9.b. Özısının 0.6×10^5 Monte Carlo adımında üç set ortalamasının sıcaklığa karşı grafiği.



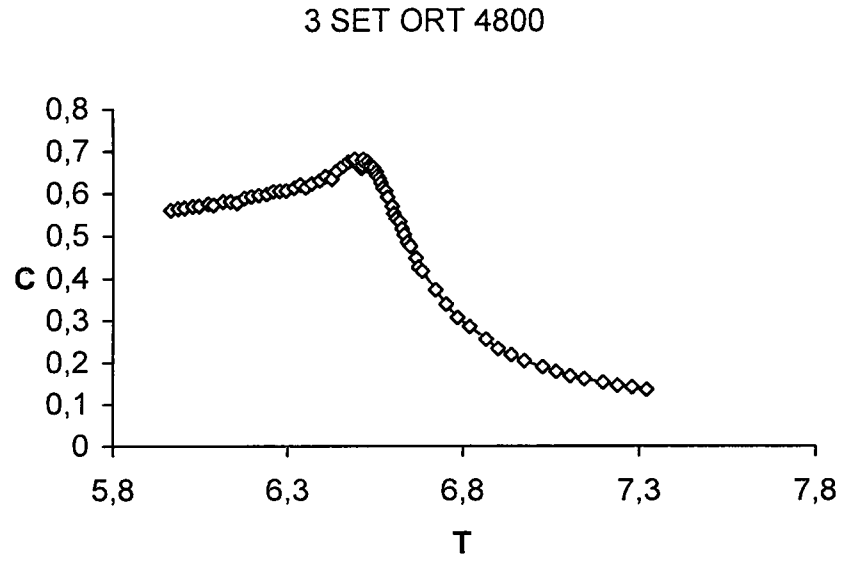
Şekil 4.10.a. Özısının 2.4×10^5 Monte Carlo adımında sıcaklığa karşı grafiği.



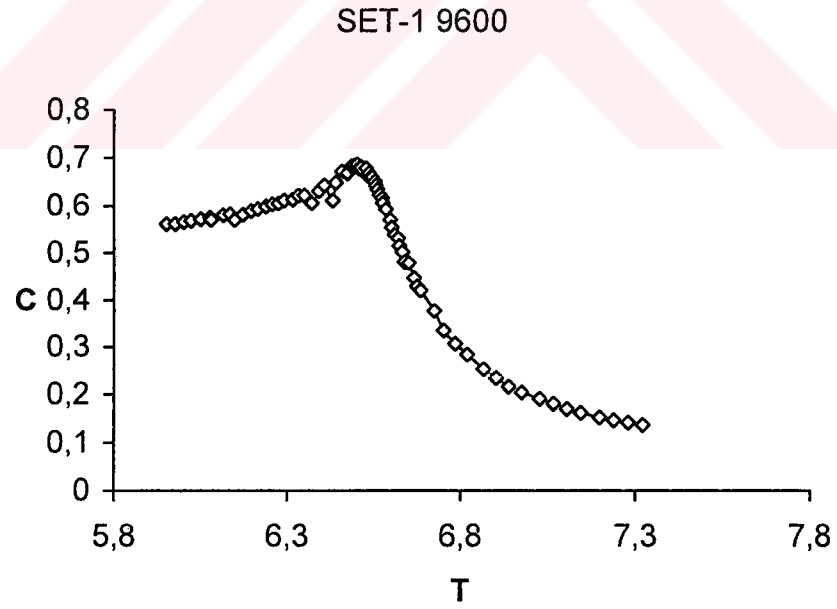
Şekil 4.10.b. Özısının 2.4×10^5 Monte Carlo adımında üç set ortalamasının sıcaklığa karşı grafiği.



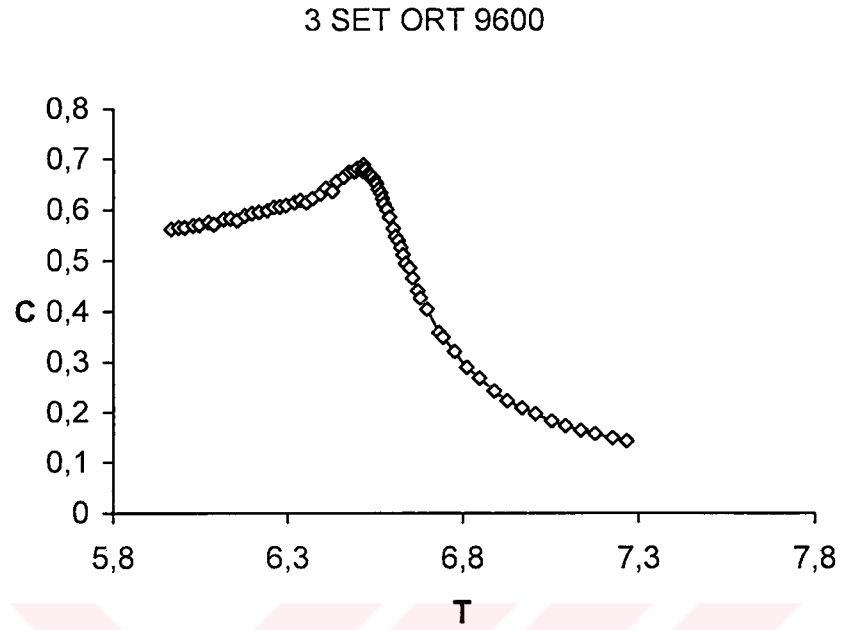
Şekil 4.11.a. Özısının 4.8×10^5 Monte Carlo adımında sıcaklığa karşı grafiği.



Şekil 4.11.b. Özısının 4.8×10^5 Monte Carlo adımında üç set ortalamasının sıcaklığa karşı grafiği.



Şekil 4.12.a. Özısının 9.6×10^5 Monte Carlo adımında sıcaklığa karşı grafiği.



Şekil 4.12.b. Özısının 9.6×10^5 Monte Carlo adımında üç set ortalamasının sıcaklığa karşı grafiği.

4.2. Statik Kritik Üsler Olan β , β' , γ , γ' Hesabı

4.2.1. Kendiliğinden mıknatıslanma kritik üssü β ve β'

Bu çalışmada kendiliğinden mıknatıslanma β ve β' ($T < T_c$) kritik üsleri, renormalizasyon grup teorisine (29) göre sonsuz örgünün düzen parametresinin sıcaklığa bağlı ifadesini veren [4.2] ve [4.3] eşitlikleri ile hesaplanmıştır.

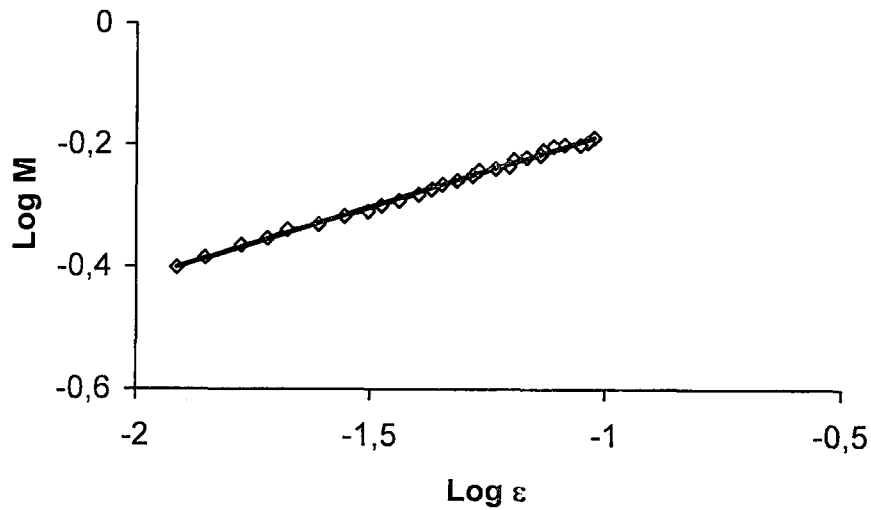
$$M \propto \varepsilon^{\beta'} \quad T < T_c \quad [4.2]$$

$$M \propto \varepsilon^{\beta} \log^{1/3} \varepsilon \quad T < T_c \quad [4.3]$$

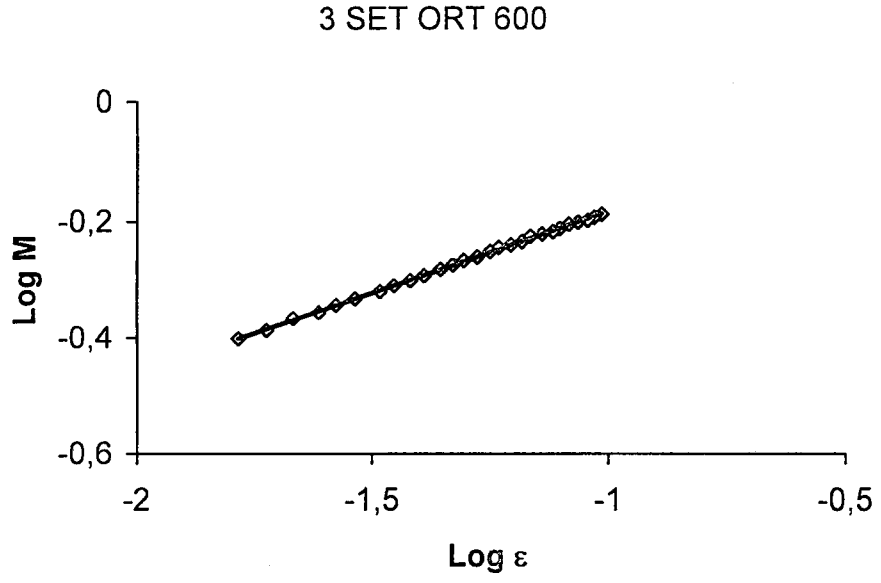
Burada ε indirgenmiş sıcaklık olup $\varepsilon = \frac{T - T_c}{T_c}$ dir ve $0,001 < \varepsilon < 0,1$ aralığındadır

(28). Kendiliğinden mıknatıslanma kritik üssü β ve β' $0,6 \times 10^5$, $2,4 \times 10^5$, $4,8 \times 10^5$ ve $9,6 \times 10^5$ adımlarında üç farklı sette bulunmuştur. Ancak bu çalışmada $0,6 \times 10^5$, $2,4 \times 10^5$, $4,8 \times 10^5$ ve $9,6 \times 10^5$ adımlarındaki bir setin sonuçları ile üç setin ortalamalarından elde edilen verilerin grafikleri yer almıştır. Log M'nin Log ε' a göre grafikleri $0,6 \times 10^5$ Monte Carlo adımı Şekil 4.13.a, b de, $2,4 \times 10^5$ Monte Carlo adımı Şekil 4.14.a,b de, $4,8 \times 10^5$ Monte Carlo adımı Şekil 4.15.a,b de ve $9,6 \times 10^5$ Monte Carlo adımı Şekil 4.16.a,b de verilmiştir. Bu grafiklerin eğimlerinden β' kritik üsleri hesaplanmıştır. Log(M / log^{1/3} ε)'nin Log ε' a göre grafikleri $0,6 \times 10^5$ Monte Carlo adımı Şekil 4.17.a, b de, $2,4 \times 10^5$ Monte Carlo adımı Şekil 4.18.a,b de, $4,8 \times 10^5$ Monte Carlo adımı Şekil 4.19.a,b de ve $9,6 \times 10^5$ Monte Carlo adımı Şekil 4.20.a,b de verilmiştir. Bulunan kritik üs değerleri tablo 5.3 de verilmiştir.

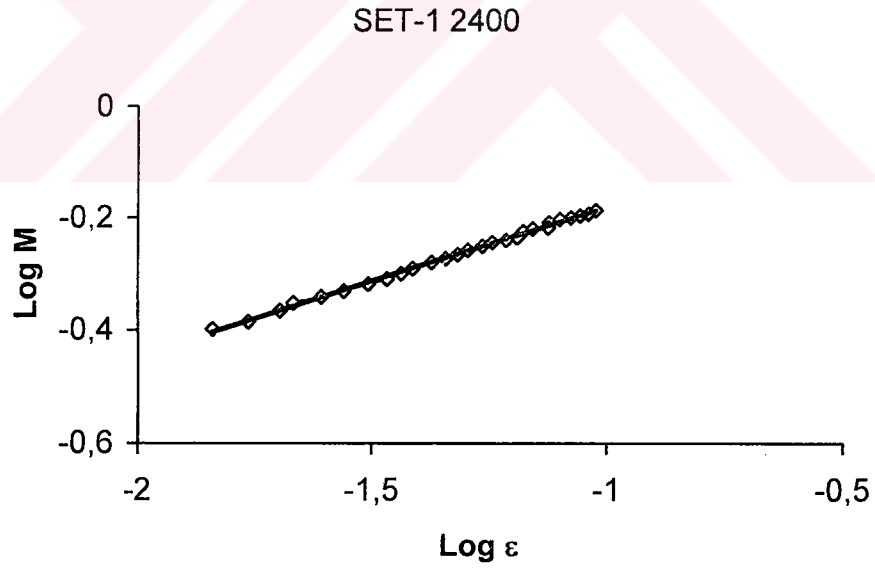
SET-1 600



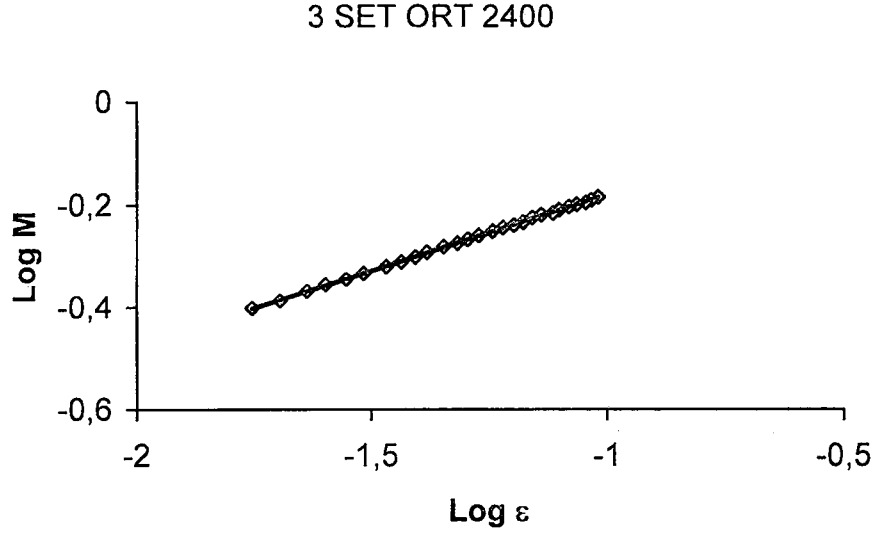
Şekil 4.13.a. Log M'nin Log ε' 'a karşı $0,6 \times 10^5$ Monte Carlo adımı grafiği. Grafiğin eğimi $\beta' = 0,2379$ vermektedir.



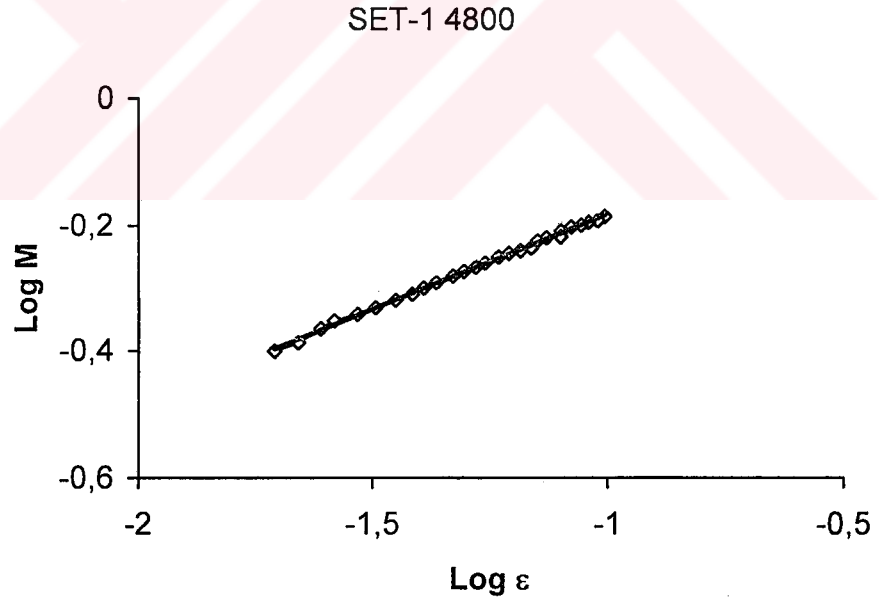
Şekil 4.13.b. Log M'nin Log ε 'a karşı $0,6 \times 10^5$ Monte Carlo adımıyla üç set ortalamasının grafiği. Grafiğin eğimi $\beta' = 0,2792$ vermektedir.



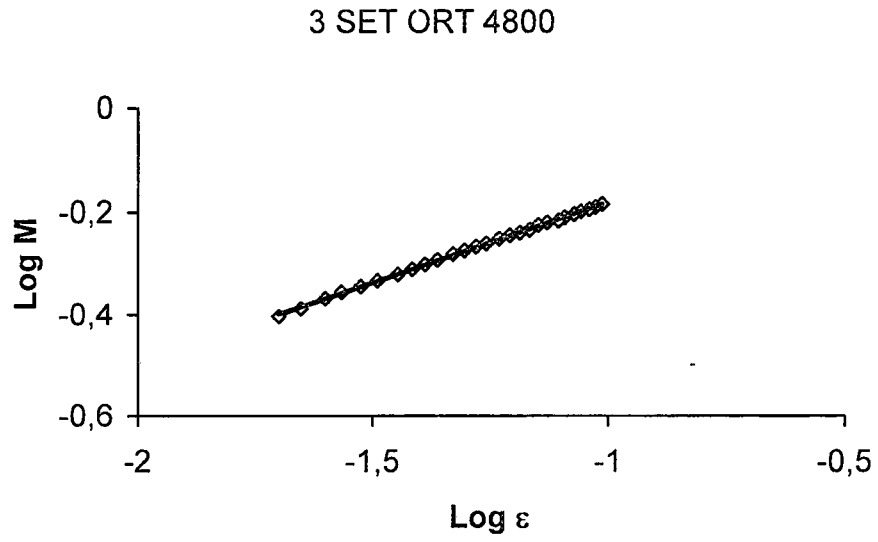
Şekil 4.14.a. Log M'nin Log ε 'a karşı $2,4 \times 10^5$ Monte Carlo adımıyla grafiği. Grafiğin eğimi $\beta' = 0,2658$ vermektedir.



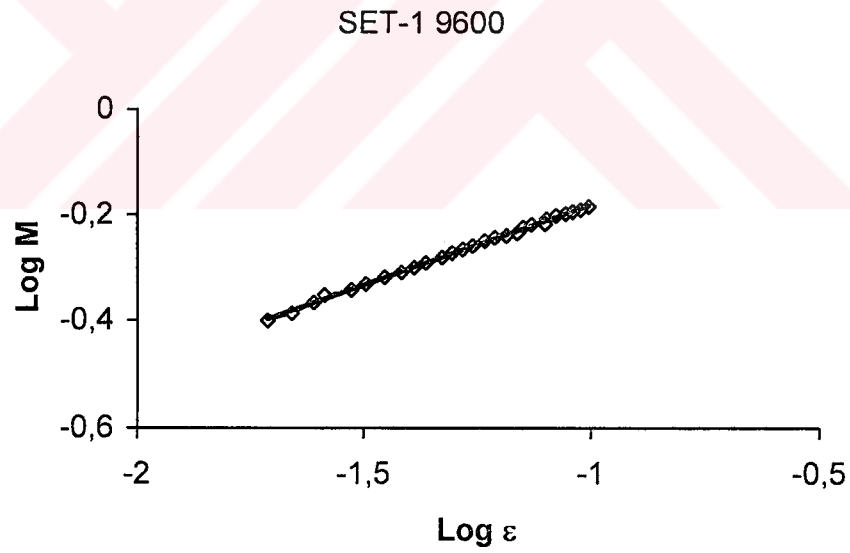
Şekil 4.14.b. Log M'nin Log ε 'a karşı 2.4×10^5 Monte Carlo adımımda üç set ortalamasının grafiği. Grafiğin eğimi $\beta' = 0,2944$ vermektedir.



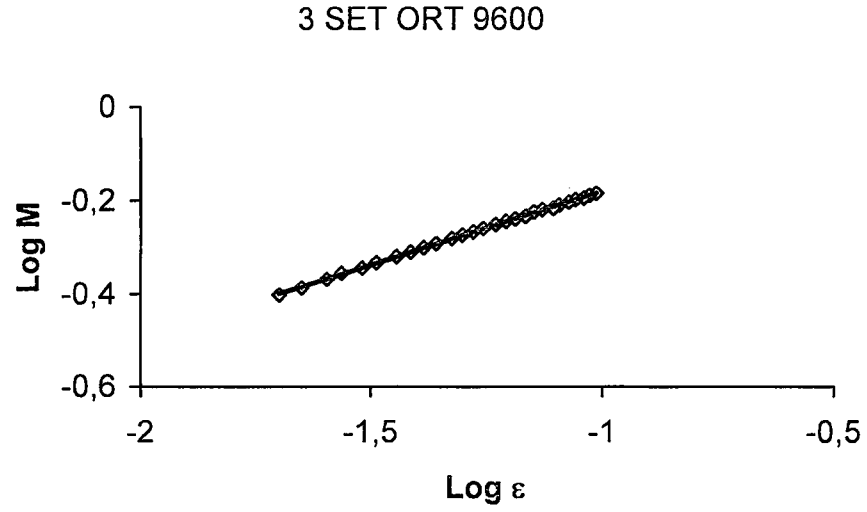
Şekil 4.15.a. Log M'nin Log ε 'a karşı 4.8×10^5 Monte Carlo adımımda grafiği. Grafiğin eğimi $\beta' = 0,3032$ vermektedir.



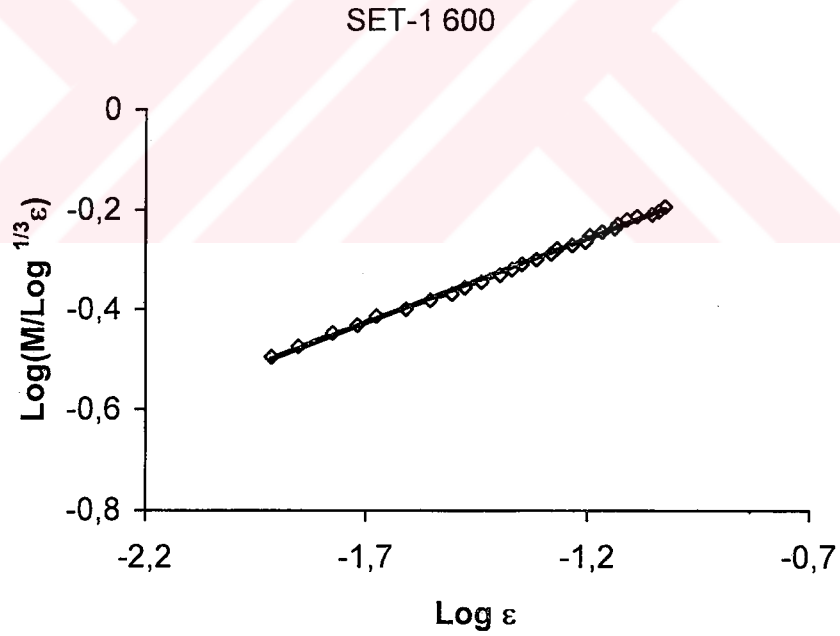
Şekil 4.15.b. Log M'nin Log ε ' a karşı 4800 monte carlo adımında üç set ortalamasının grafiği. Grafiğin eğimi $\beta' = 0,3121$ vermektedir.



Şekil 4.16.a. Log M'nin Log ε 'a karşı 9.6×10^5 Monte Carlo adımında grafiği. Grafiğin eğimi $\beta' = 0,3037$ vermektedir.

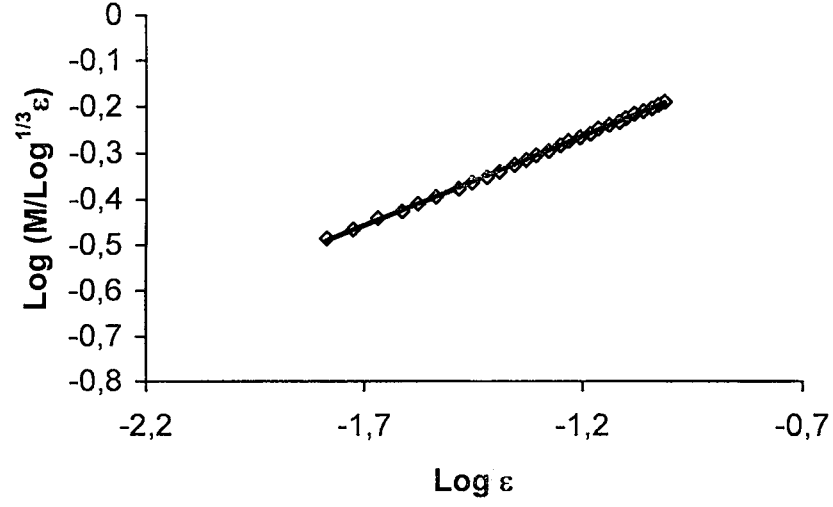


Şekil 4.16.b. Log M'nin Log ε 'a karşı 9.6×10^5 Monte Carlo adımıyla üç set ortalamasının grafiği. Grafiğin eğimi $\beta' = 0,3135$ vermektedir.



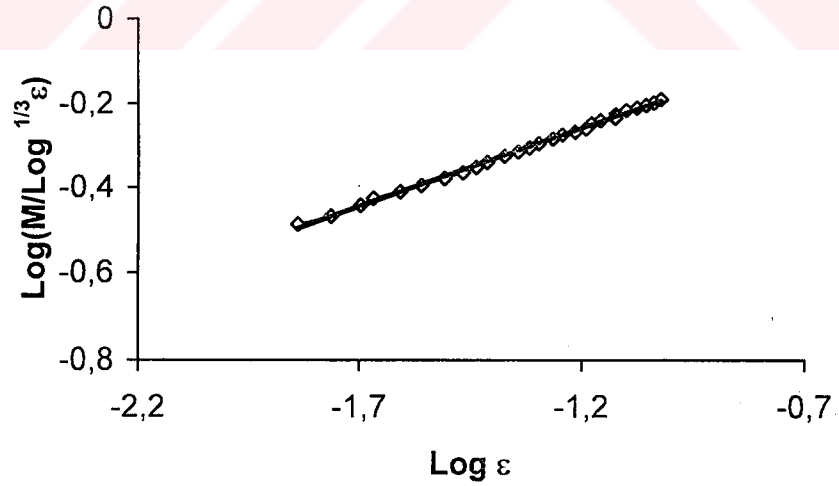
Şekil 4.17.a. $\text{Log}(M / \log^{1/3} \varepsilon)$ 'nin Log ε 'a karşı 0.6×10^5 Monte Carlo adımıyla grafiği. Grafiğin eğimi $\beta = 0,3406$ vermektedir.

3 SET ORT 600



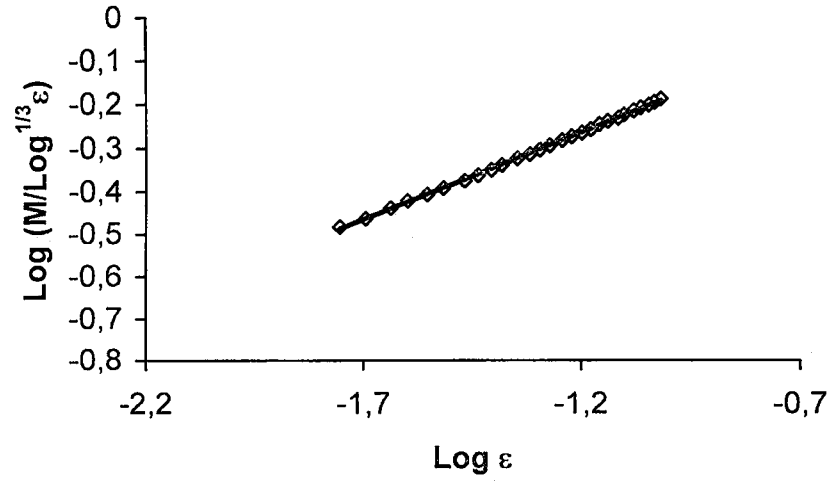
Şekil 4.17.b. $\text{Log}(M / \log^{1/3} \epsilon)$ 'nin $\text{Log } \epsilon$ 'a karşı $0,6 \times 10^5$ Monte Carlo adımında üç set ortalamasının grafiği. Grafiğin eğimi $\beta = 0,3865$ vermektedir.

SET-1 2400



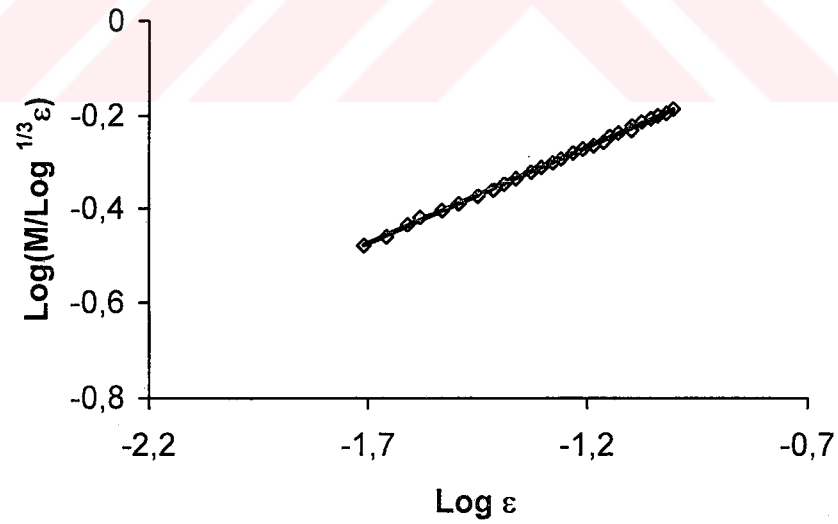
Şekil 4.18.a. $\text{Log}(M / \log^{1/3} \epsilon)$ 'nin $\text{Log } \epsilon$ 'a karşı $2,4 \times 10^5$ Monte Carlo adımında grafiği. Grafiğin eğimi $\beta = 0,3711$ vermektedir.

3 SET ORT 2400



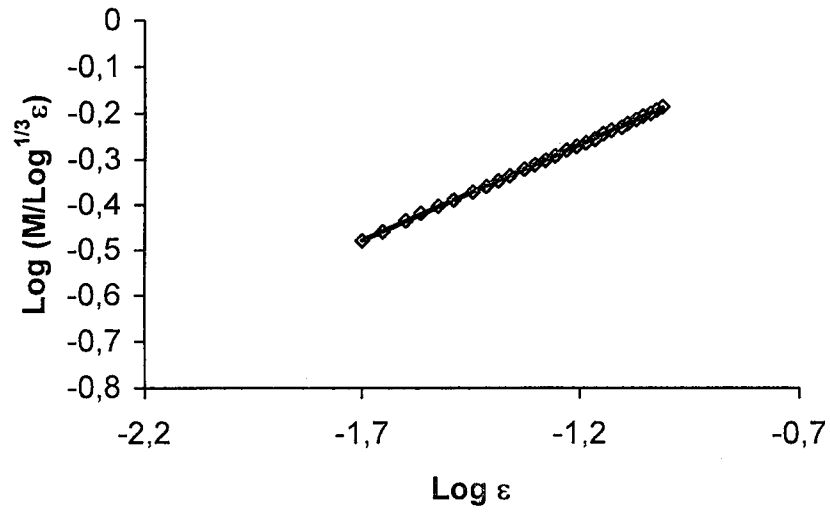
Şekil 4.18.b. $\text{Log}(M / \log^{1/3} \epsilon)$ 'nin $\text{Log} \epsilon$ 'a karşı 2.4×10^5 Monte Carlo adımıyla üç set ortalamasının grafiği. Grafiğin eğimi $\beta = 0.4026$ vermektedir.

SET-1 4800



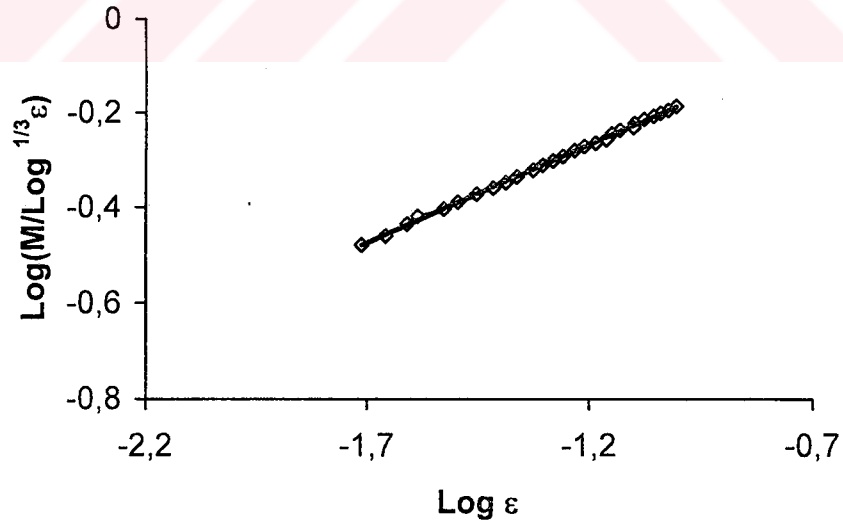
Şekil 4.19.a. $\text{Log}(M / \log^{1/3} \epsilon)$ 'nin $\text{Log} \epsilon$ 'a karşı 4.8×10^5 Monte Carlo adımıyla grafiği. Grafiğin eğimi $\beta = 0.4131$ vermektedir.

3 SET ORT 4800



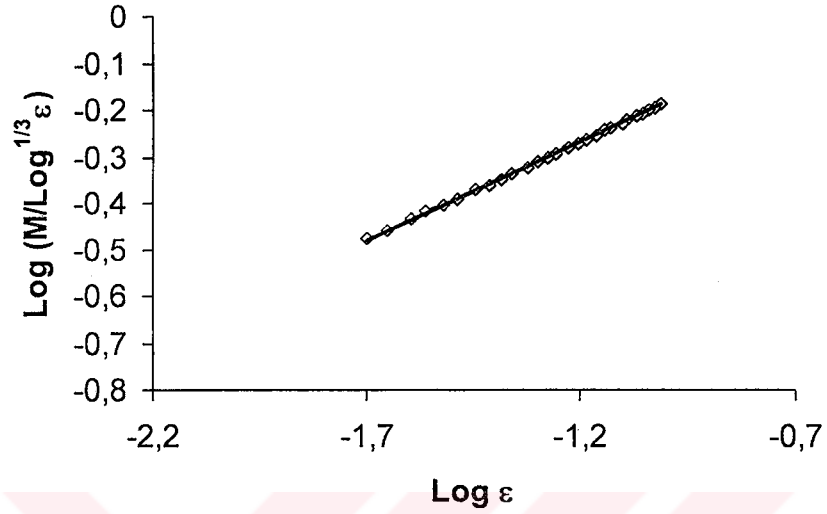
Şekil 4.19.b. $\text{Log}(M / \log^{1/3} \epsilon)$ 'nin $\text{Log } \epsilon$ ' a karşı $4,8 \times 10^5$ Monte Carlo adımıyla üç set ortalamasının grafiği. Grafiğin eğimi $\beta = 0,4222$ vermektedir.

SET-1 9600



Şekil 4.20.a. $\text{Log}(M / \log^{1/3} \epsilon)$ 'nin $\text{Log } \epsilon$ 'a karşı $9,6 \times 10^5$ Monte Carlo adımıyla adımlarda grafiği. Grafiğin eğimi $\beta = 0,4135$ vermektedir.

3 SET ORT 9600



Şekil 4.20.b. $\text{Log}(M / \log^{1/3} \epsilon)$ 'nin $\text{Log } \epsilon$ 'a karşı 9.6×10^5 Monte Carlo adımıyla üç set ortalamasının grafiği. Grafiğin eğimi $\beta = 0,4238$ vermektedir.

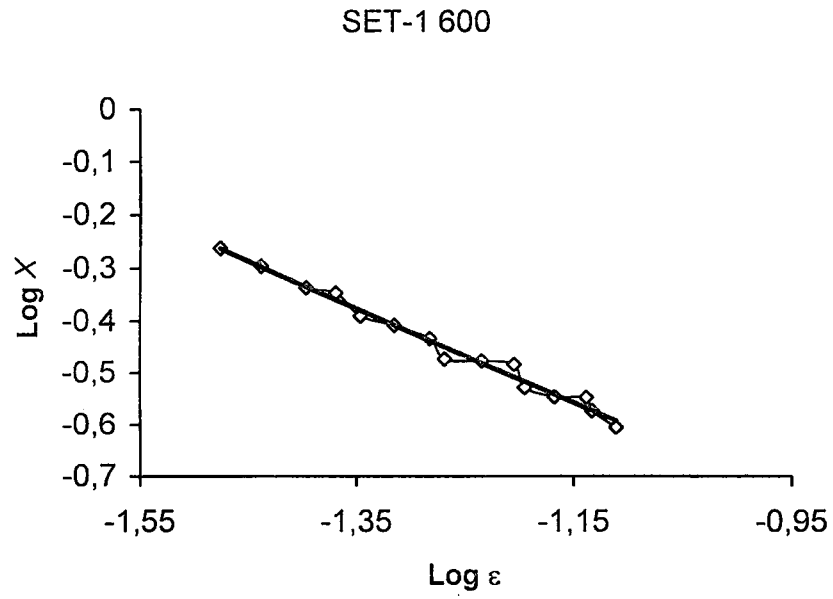
4.4.2. Manyetik alınganlık kritik üssü γ ve γ'

Manyetik alınganlık kritik üsleri γ ve γ' aşağıdaki bağıntılardan elde edilmiştir.

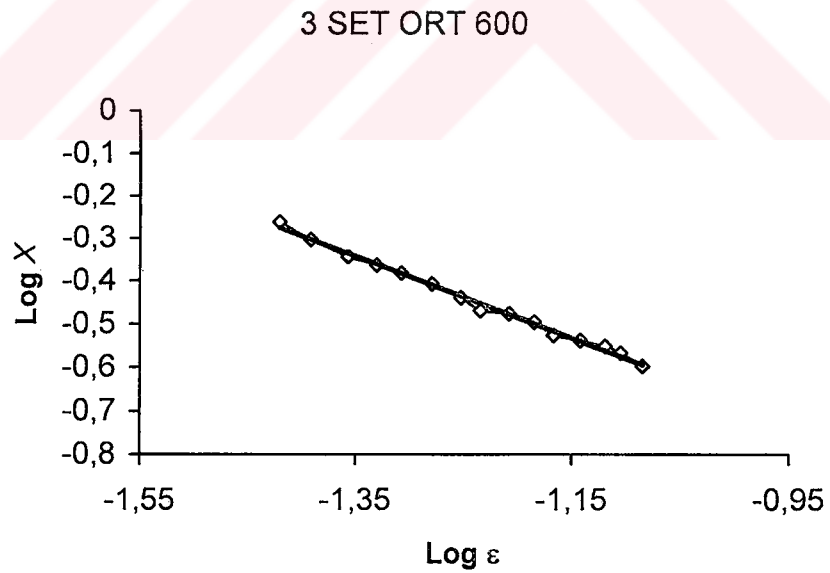
$$\chi \propto \epsilon^{\gamma'} \quad T < T_c \quad [4.4]$$

$$\chi \propto \epsilon^{\gamma} \log^{1/3} \epsilon \quad T < T_c \quad [4.4]$$

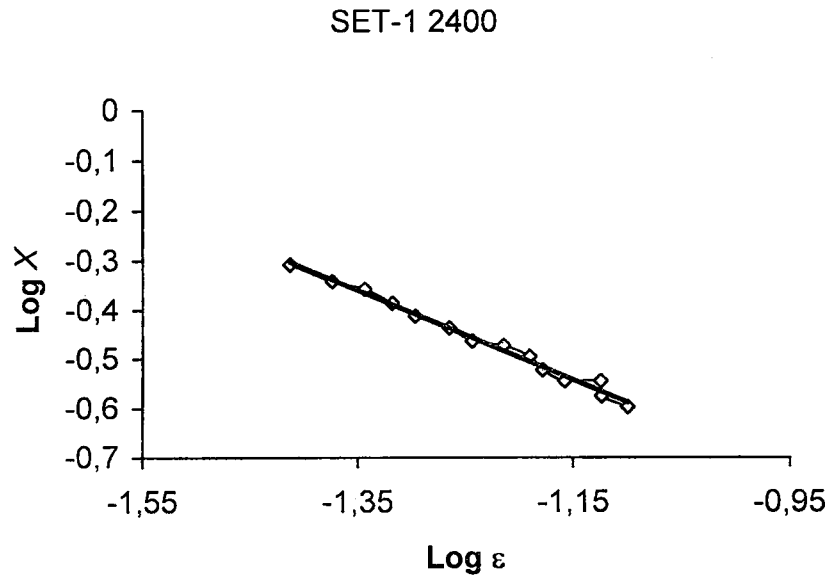
Manyetik alınganlık kritik üssü γ ve γ' 0.6×10^5 Monte Carlo adımıyla Şekil 4.21.a, b de, 2.4×10^5 Monte Carlo adımıyla Şekil 4.22.a,b de, 4.8×10^5 Monte Carlo adımıyla Şekil 4.23.a,b de ve 9.6×10^5 Monte Carlo adımıyla Şekil 4.24.a,b de verilmiştir. Bu grafiklerin eğimlerinden kritik üsler γ ve γ' hesaplanmıştır.



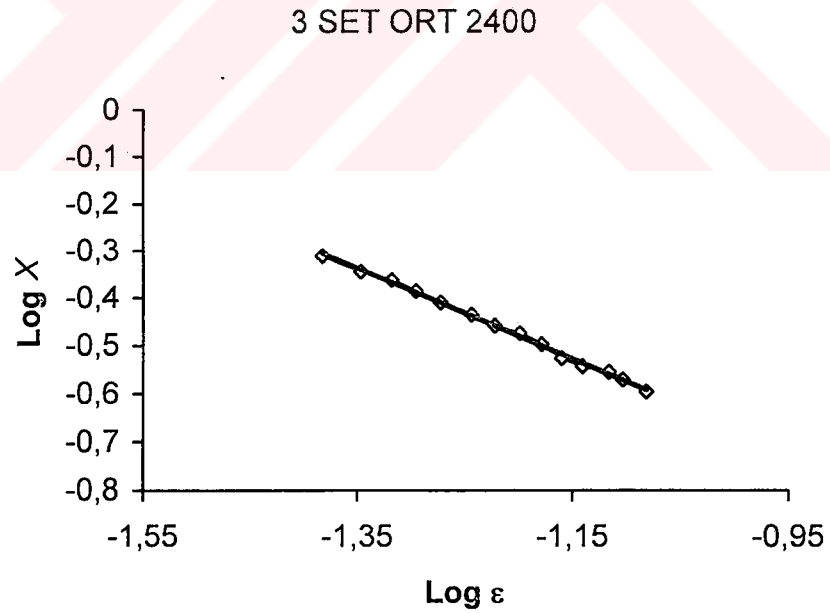
Şekil 4.21.a. Log χ 'nin Log ε 'a karşı $0,6 \times 10^5$ Monte Carlo adımında grafiği. Grafiğin eğimi $\gamma' = 0,9045$ vermektedir.



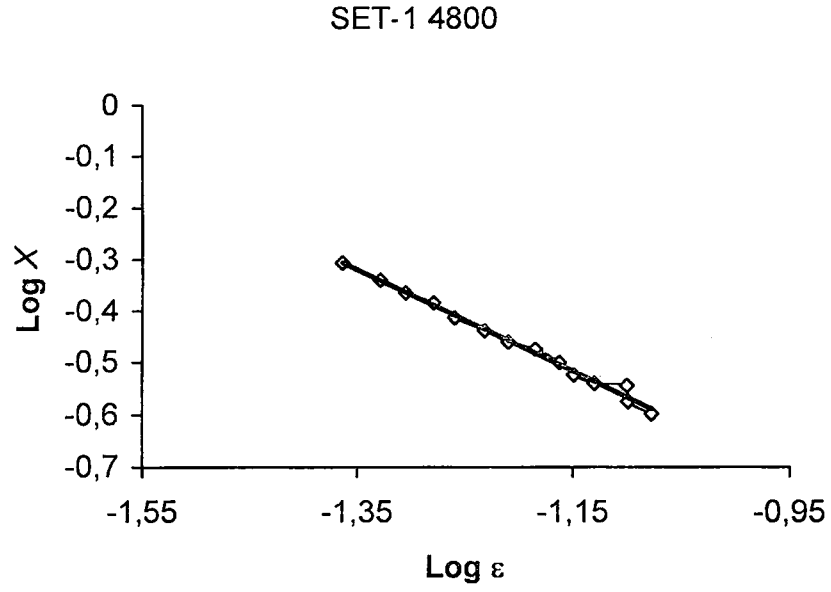
Şekil 4.21.b. Log χ 'nin Log ε 'a karşı $0,6 \times 10^5$ Monte Carlo adımında üç set ortalamasının grafiği. Grafiğin eğimi $\gamma' = 0,9515$ vermektedir.



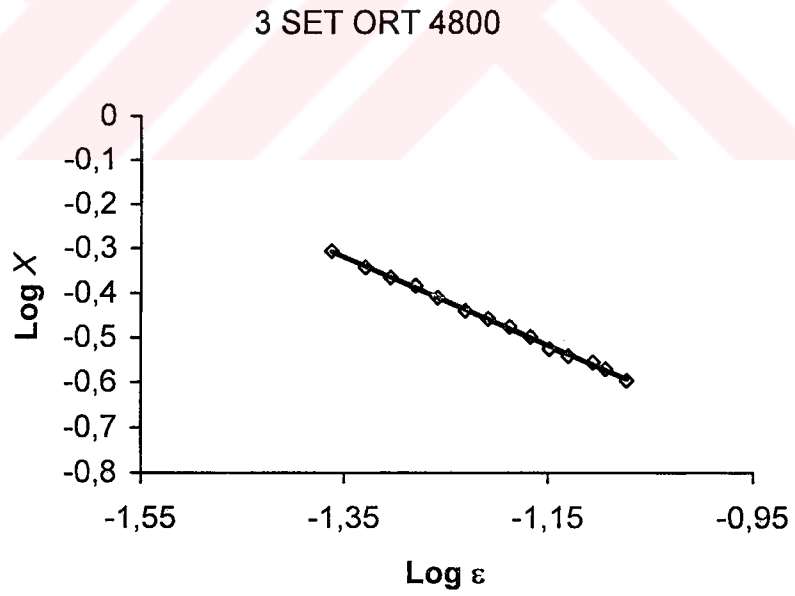
Şekil 4.22.a. Log χ 'nin Log ε 'a karşı 2.4×10^5 Monte Carlo adımıyla grafiği. Grafiğin eğimi $\gamma' = 0.913$ vermektedir.



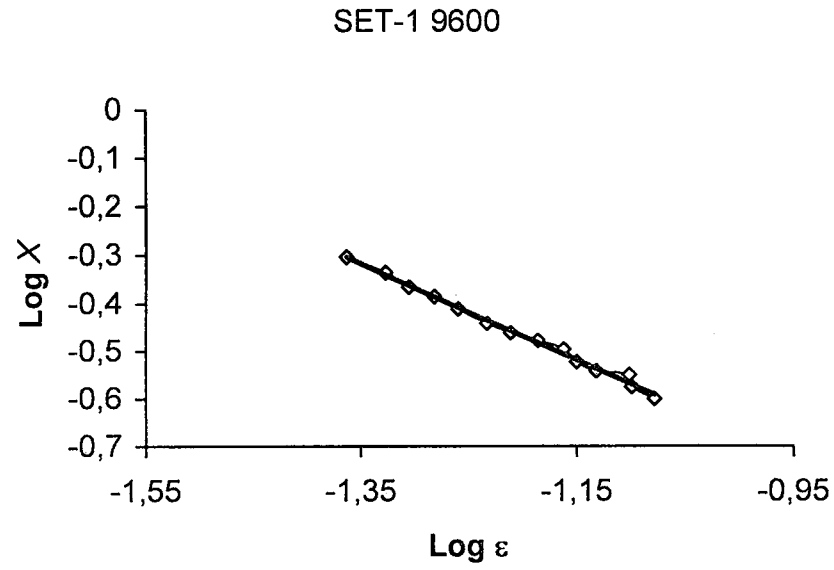
Şekil 4.22.b. Log χ 'nin Log ε 'a karşı 2.4×10^5 Monte Carlo adımıyla üç set ortalamasının grafiği. Grafiğin eğimi $\gamma' = 0.9535$ vermektedir.



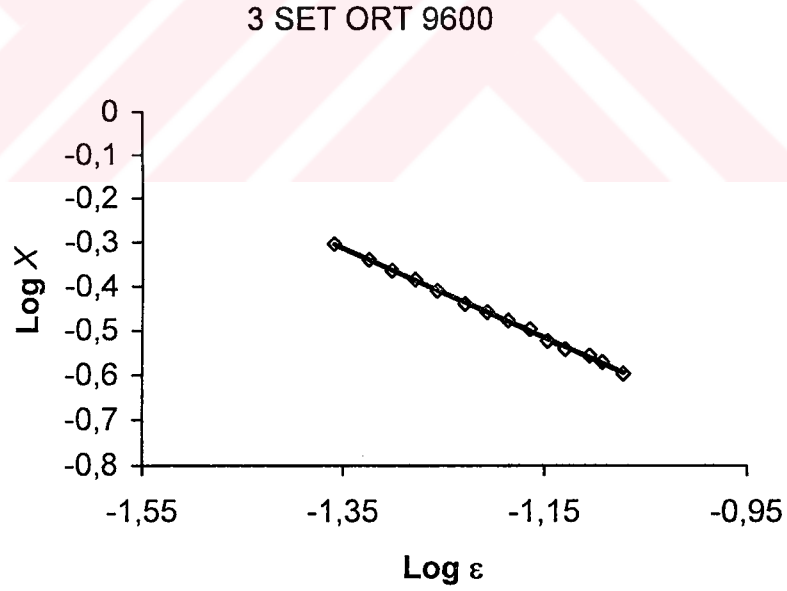
Şekil 4.23.a. Log χ 'nin Log ε 'a 4.8×10^5 Monte Carlo adımıyla grafiği. Grafiğin eğimi $\gamma = 0,9926$ vermektedir.



Şekil 4.23.b. Log χ 'nin Log ε 'a karşı 4.8×10^5 Monte Carlo adımıyla üç set ortalamasının grafiği. Grafiğin eğimi $\gamma' = 0,99$ vermektedir.

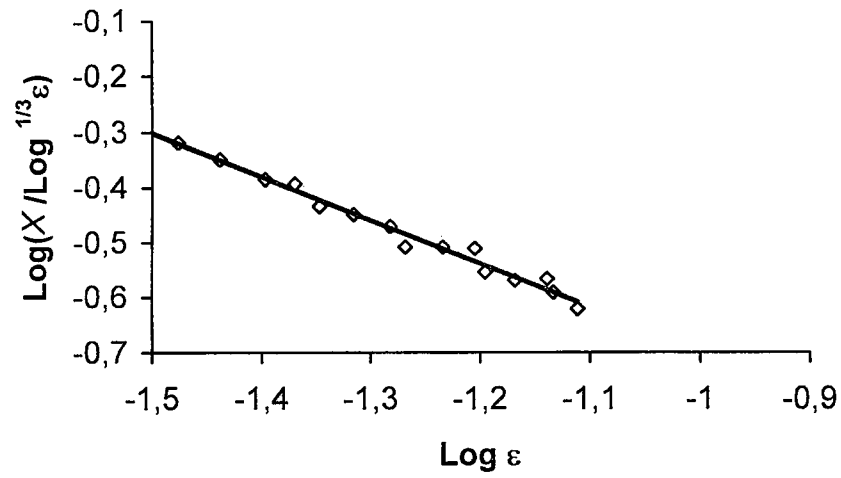


Şekil 4.24.a. İndirgenmiş sıcaklık $\text{Log } \chi$ 'nin $\text{Log } \varepsilon$ 'a karşı $9,6 \times 10^5$ Monte Carlo adımı grafiği. Grafiğin eğimi $\gamma' = 1,0093$ vermektedir.



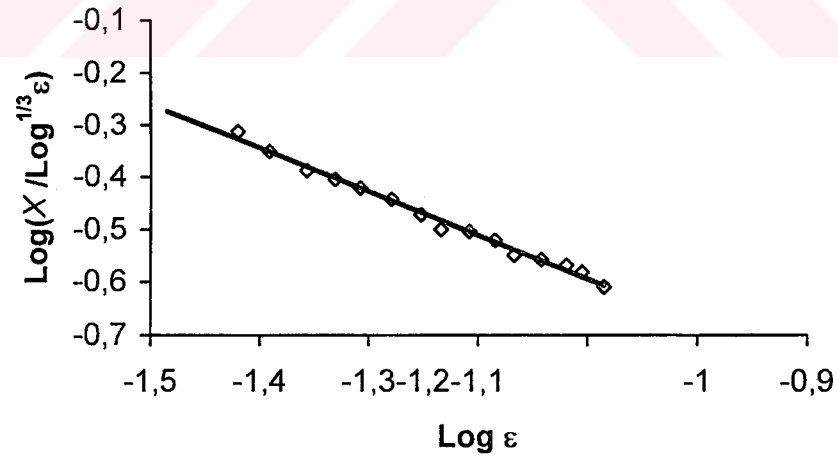
Şekil 4.24.b. $\text{Log } \chi$ 'nin $\text{Log } \varepsilon$ 'a karşı $9,6 \times 10^5$ Monte Carlo adımı üç set ortalamasının grafiği. Grafiğin eğimi $\gamma' = 1,0102$ vermektedir.

SET-1 600



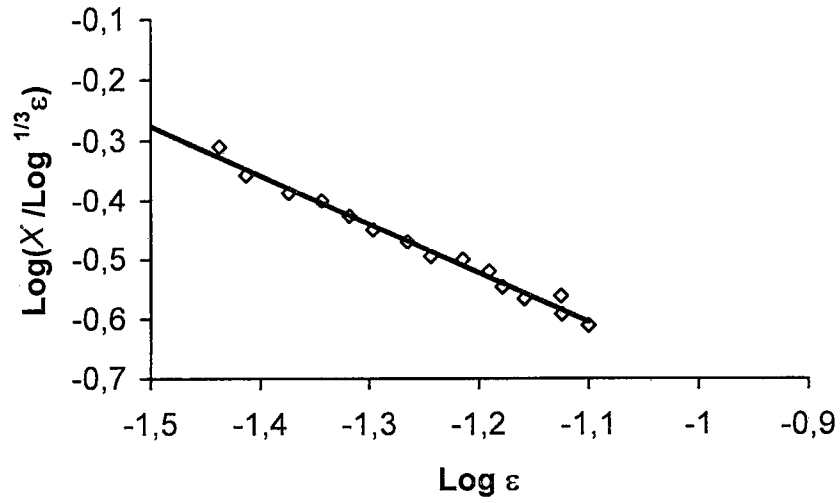
Şekil 4.25.a. $\text{Log}(\chi / \log^{1/3} \epsilon)$ 'nin $\text{Log } \epsilon$ 'a karşı $0,6 \times 10^5$ Monte Carlo adımıyla grafiği. Grafiğin eğimi $\gamma = 0,7914$ vermektedir.

3 SET ORT 600



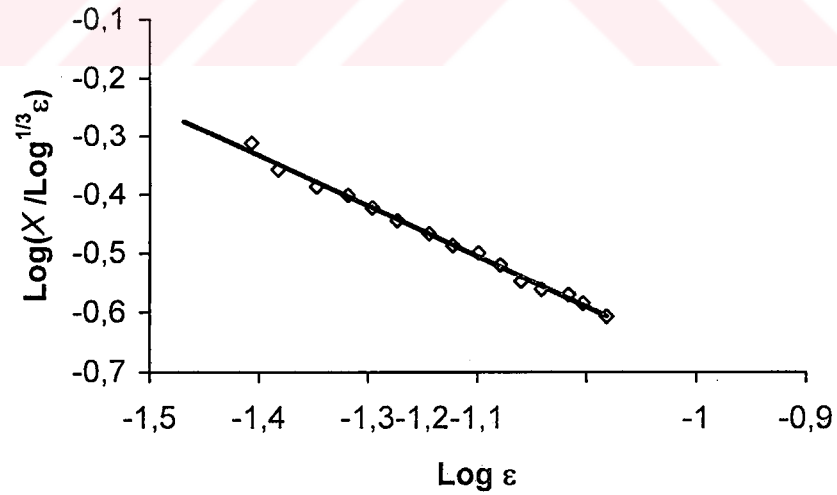
Şekil 4.25.b. $\text{Log}(\chi / \log^{1/3} \epsilon)$ 'nin $\text{Log } \epsilon$ 'a karşı $0,6 \times 10^5$ Monte Carlo adımıyla üç set ortalamasının grafiği. Grafiğin eğimi $\gamma = 0,8352$ vermektedir.

SET-1 2400



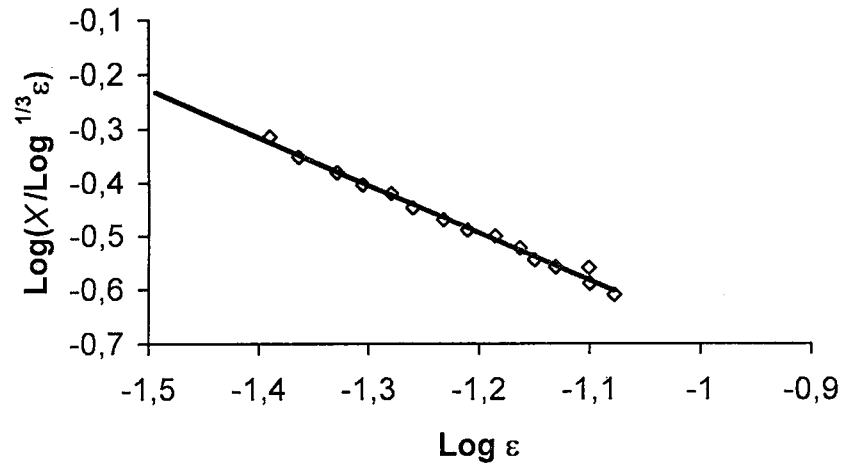
Şekil 4.26.a. $\text{Log}(\chi / \log^{1/3} \varepsilon)$ 'nin $\text{Log } \varepsilon$ 'a karşı 2.4×10^5 Monte Carlo adımıyla grafiği. Grafiğin eğimi $\gamma = 0,8233$ vermektedir.

3 SET ORT 2400



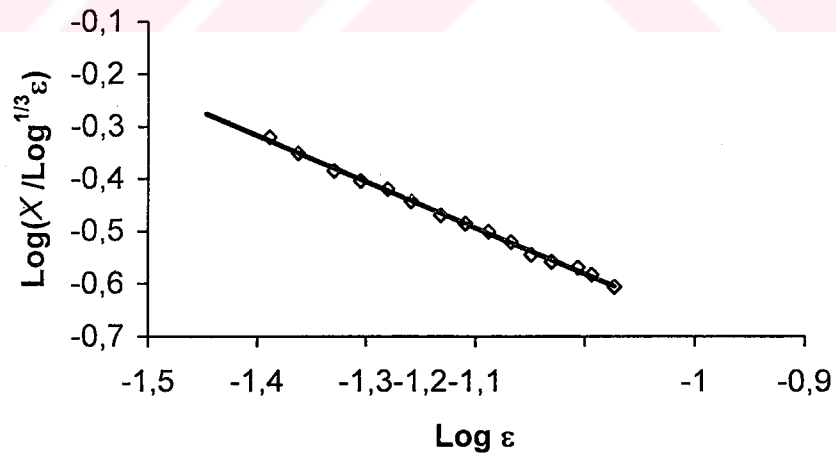
Şekil 4.26.b. $\text{Log}(\chi / \log^{1/3} \varepsilon)$ 'nin $\text{Log } \varepsilon$ 'a karşı 2.4×10^5 Monte Carlo adımıyla üç set ortalamasının grafiği. Grafiğin eğimi $\gamma = 0,8601$ vermektedir.

SET-1 4800



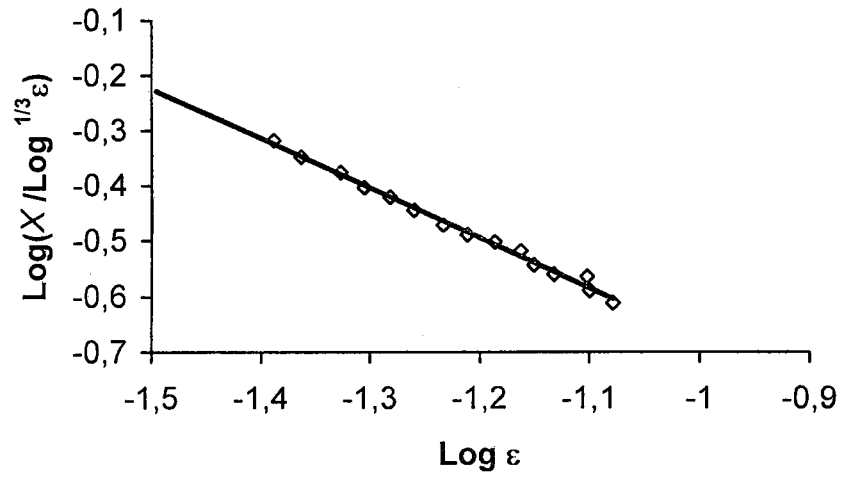
Şekil 4.27.a. $\text{Log}(\chi / \log^{1/3} \epsilon)$ 'nin $\text{Log} \epsilon$ 'a karşı 4.8×10^5 Monte Carlo adımıyla grafiği. Grafiğin eğimi $\gamma = 0.8896$ vermektedir.

3 SET ORT 4800



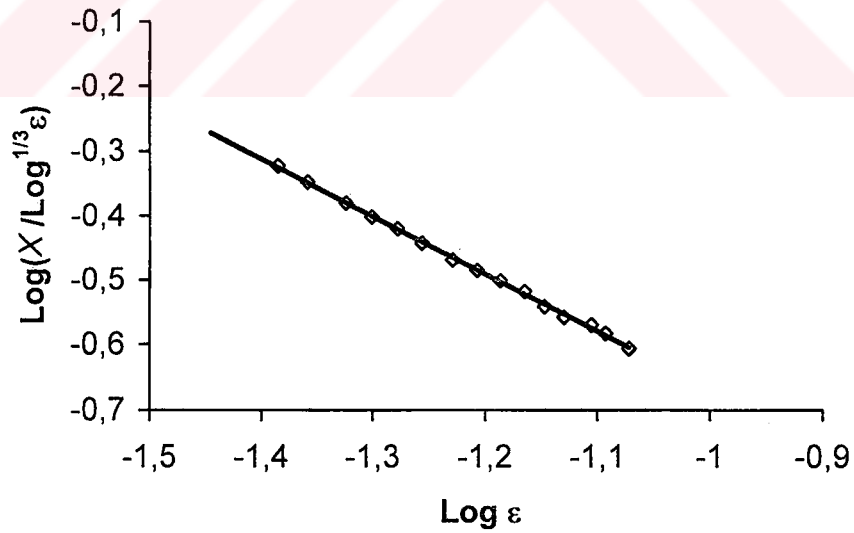
Şekil 4.27.b. $\text{Log}(\chi / \log^{1/3} \epsilon)$ 'nin $\text{Log} \epsilon$ 'a karşı 4.8×10^5 Monte Carlo adımıyla üç set ortalamasının grafiği. Grafiğin eğimi $\gamma = 0,8819$ vermektedir.

SET-1 9600



Şekil 4.28.a. $\text{Log}(\chi / \log^{1/3} \varepsilon)$ 'nin $\text{Log } \varepsilon$ ' a karşı 9.6×10^5 Monte Carlo adımıyla grafiği. Grafiğin eğimi $\gamma = 0,9005$ vermektedir.

3 SET ORT 9600



Şekil 4.28.b. $\text{Log}(\chi / \log^{1/3} \varepsilon)$ 'nin $\text{Log } \varepsilon$ ' a karşı 9.6×10^5 Monte Carlo adımıyla üç set ortalamasının grafiği. Grafiğin eğimi $\gamma = 0,8944$ vermektedir.

5.SONUÇLAR ve TARTIŞMA

Özısının (C) ve manyetik alınganlığın (χ), üç ayrı set ve üç setin ortalaması 0.6×10^5 , 2.4×10^5 , 4.8×10^5 , 9.6×10^5 Monte Carlo zaman adımıdaki özısının bulunan maksimum değerleri ve buna karşılık gelen kritik sıcaklıkları Tablo 5.1 de, manyetik alınganlığın χ 'nin maksimumu ve kritik sıcaklık değerleri ise Çizelge 5.2 de verilmiştir.

Bulunan sonuçlar daha önce $L=6$ örgüsünde 9.6×10^5 zaman adımı için bulunan $T=6.519$, $T=6.570$ (21) ve $T=6.515$, $T=6.618$ (22) ,değerleri ile uyum içinde olduğu görülmektedir. Aynı şekilde Çizelge 5.3 de verilen termodinamik niceliklerin özelliklerini belirleyen kritik üs değerleri incelendiğinde daha önce $L=6$ örgüsü için 9.6×10^5 zaman adımıda bulunan kritik üs değerleri $\beta = 0.41$, $\beta' = 0.31$ ve $\gamma = 0.87$, $\gamma' = 0.98$ (21) ile uyumludur.

Çizelge 5.1 Set 1 ve Set 2 ve Set3'de dört ayrı Monte Carlo adımıda özısı (C)'nin sıcaklığa karşı aldığı değerler

Monte Carlo Adımı	Set 1		Set 2		Set 3	
	T_c^c	C	T_c^c	C	T_c^c	C
0.6×10^5	6,478	0,715	6,521	0,710	6,525	0,692
2.4×10^5	6,506	0,690	6,535	0,687	6,492	0,692
4.8×10^5	6,491	0,689	6,519	0,686	6,519	0,686
9.6×10^5	6,502	0,686	6,513	0,682	6,507	0,684

Çizelge 5.2 Üç ayrı set ortalamasında dört ve $(6)_3^4$ örgüde yapılan çalışmalarda iki ayrı Monte Carlo adımımda Özısı (C)'nin sıcaklığa karşı aldığı değerler.
* (32), **(22)

Monte Carlo Adımı	Üç Set Ortalaması		$(6)_3^4$ örgüde yapılan çalışma	
	T_c^C	C	T_c^C	C
0.6×10^5	6,514	0,692	-	-
2.4×10^5	6,514	0,681	-	-
4.8×10^5	6,516	0,681	6,521*	0,594*
9.6×10^5	6,516	0,688	6,515**	-

Çizelge 5.3 Set 1 ve Set 2 ve Set3'de dört ayrı Monte Carlo adımımda Manyetik alınganlığın (χ)'in sıcaklığa karşı aldığı değerler

Monte Carlo Adımı	Set 1		Set 2		Set 3	
	T_c^χ	χ	T_c^χ	χ	T_c^χ	χ
0.6×10^5	6,555	2,474	6,605	2,563	6,596	2,435
2.4×10^5	6,573	2,399	6,609	2,395	6,596	2,435
4.8×10^5	6,604	2,370	6,601	2,382	6,601	2,382
9.6×10^5	6,603	2,353	6,612	2,354	6,605	2,353

Çizelge 5.4 Üç ayrı set ortalamasında dört ve $(6)_3^4$ örgüde yapılan çalışmalarda iki ayrı Monte Carlo adımıyla manyetik alınganlığın (χ)'ın sıcaklığa karşı aldığı değerler. * (32), **(22)

Monte Carlo Adımı	Üç Set Ortalaması		$(6)_3^4$ örgüde yapılan çalışma	
	T_c^χ	χ	T_c^χ	χ
0.6×10^5	6,614	2,368	-	-
2.4×10^5	6,602	2,334	-	-
4.8×10^5	6,620	2,347	6,604*	2,220*
9.6×10^5	6,622	2,342	6,618**	-

Çizelge 5.5 Set 1 ve Set 2 ve Set3'de dört ayrı Monte Carlo adımıyla sıcaklığa karşı kritik üsler

Kritik Üsler	Set 1				Set 2				Set 3			
	0.6×10^5	2.4×10^5	4.8×10^5	9.6×10^5	0.6×10^5	2.4×10^5	4.8×10^5	9.6×10^5	0.6×10^5	2.4×10^5	4.8×10^5	9.6×10^5
β'	0.237	0.265	0.303	0.303	0.305	0.319	0.32	0.32	0.303	0.301	0.30	0.31
β	0.340	0.371	0.413	0.413	0.414	0.430	0.43	0.43	0.413	0.410	0.41	0.42
γ'	0.904	0.913	0.992	1.00	0.975	0.997	1.01	1.02	0.970	0.947	0.96	0.99
γ	0.791	0.823	0.889	0.9	0.857	0.900	0.89	0.89	0.852	0.855	0.86	0.88

Çizelge 5.6 Üç ayrı set ortalamasında dört ve $(6)_3^4$ örgüde yapılan çalışmalarda iki ayrı Monte Carlo adımıda sıcaklığa karşı kritik üsler. * (32), ** (22)

Kritik Üsler	Üç Set Ortalaması				$(6)_3^4$ örgüde yapılan çalışma			
	0.6×10^5	2.4×10^5	4.8×10^5	9.6×10^5	0.6×10^5	2.4×10^5	4.8×10^5	9.6×10^5
β'	0.279	0,294	0,312	0,313	-	-	0,309*	0,31**
β	0.386	0,402	0,422	0,423	-	-	0,432*	0,41**
γ'	0,951	0,953	0,99	1,01	-	-	0,976*	0,98**
γ	0.835	0,860	0,881	0,894	-	-	0,862*	0,87**

Bu sonuçlar gösteriyor ki küçük örgüler için belirli bir adımdan sonra (4.8×10^5 Monte Carlo adımı), zaman adımının arttırılması sonuçlar üzerinde kayda değer bir etki yapmamaktadır. Ancak simülasyon sayısının arttırılması ile daha sağlıklı sonuçların elde edilebilmesi de bir gerçektir. Zaman adım ve simülasyon sayılarının arttırılması $L > 6$ örgülerinde daha net bir şekilde kendini gösterebileceği düşünülmektedir. Bu çalışmada renormalizasyon grup teorisine dayanarak hesaplanan dinamik kritik üstler daha önceki çalışmaların sonuçları ile ($\beta = 0.50$, $\beta' = 0.35$, $\gamma = \gamma' = 1.02$) (20, 21) uyum içinde olduğu görülmektedir.

KAYNAKLAR

1. Yeomans J.M., "Statistical Mechanics of Phase Transitions", *Clarendon Press*, Oxford, 16-36 (1992)
2. Serway A.R., "Physics for Scientists Engineers & with Modern Physics", *Sanders College Publishing*, 852-860 (1992)
3. Binney J. J., Dawrick, N. J., Fisher, A. J., and Newman, M.E.J., "The Theory of Critical Phenomena", *Clarendon Press*, Oxford, 26-27 (1992)
4. Huang K., "Statistical Mechanics", 2nd ed., John Wiley and Sons, *Newyork*, 1-52 (1987)
5. Onsager L., Crystal Statistics. I.A. "Two Dimensional Model With On Order Disorder Transition", *Phys. Rev.*, 65: 117-149 (1944)
6. Pearson P.B., Richardson J.L., and Toussaint D., "A Fast Processor For Monte Carlo Simulation", *J. Comput. Phys.*, 51: 241-246 (1983)
7. Frenkel D., "Molecular Dynamics Simulation Of Statistical Mechanical System", Proceedings of The International School of Physics, Ed: G. Ciccotti and W. G. Hoover, *Nort Holland*, 151-180 (1986)
8. Spohn H., "*Molecular Dynamics Simulation of Statistical Mechanical Systems*", Proceedings of The International School of Physics, Ed: G. Ciccotti and W. G. Hoover, *Nort Holland*, 304-352 (1986)
9. Creutz M., "Deterministic Ising Dynamics", *Ann Phys.*, 62:167-169 (1986)
10. Hermann H. J., "Fast Algorithm for The Simulation of Ising Model" *J. Stat. Phys.*, 45:145-151 (1986)
11. Binney J. J., Dowrick, N. J., Fisher, A. J., and Newman, M. E. J., "The Theory of Critical Phenomena", *Clarendon Press*, Oxford, 7-13 (1992)
12. Metropolis N., Rosenbluth A.W., Rosenbluth M.N., Teller E., "Equation of State Calculations by Fast Computing Machines", *J. Chem. Phys.*, 21: 1087-1092 (1953)
13. Creutz M., "Microcanonical Monte Carlo Simulation", *Phys. Rev. Lett.*, 50:1411-1414 (1983)

14. Wolfram S., "Theory And Applications of Cellular Automaton", *World Scientific*, Singapore 265-278 (1986)
15. Wolfram S., "Universality and Complexity in Cellular Automata", *Physica D*, 10: 1-35 (1984)
16. Vichniac G., "Simulating Physics with Cellular Automata", *Physica D*, 10: 96-116 (1984)
17. Pomeau Y., "Invariant in Cellular Automata", *J. Phys. A*, 17: 415-418 (1984)
18. Zabolitzky J.G., Hermann H.J., "Multitasking Case Study on the Cray-2: The Q2R Cellular Automaton", *J. Comput. Phys.*, 76: 426-428 (1988)
19. Kutlu B., Aktekin N., "Critical Slowing Down in Ising Model for Creutz Algorithm", *Physica A*, 208: 423-432 (1994)
20. Aktekin N., "Simulation of the Two-Dimensional Ising Model on the Creutz Cellular Automaton" *Physica A*, 219: 436-446 (1995)
21. Aktekin N., "Simulation of the Four Dimensional Ising Model on the Cellular Automaton" *Physica A*, 232: 397-407 (1996)
22. Aktekin N., Günen A., Sağlam Z., "A Finite-Size Scaling of the Four-Dimensional Ising Model on the Creutz Cellular Automaton", *J. Modern Phys. C*, 10: 875-881 (1999)
23. Hohne F.J.W., "Lecture Notes in Physics", Critical Phenomena, *Springer-Verlag*, 86-99 (1983)
24. Baxter R.B., "Exactly Solved Modern Statistical Mechanics", *Oxford Uni. Press*, Oxford, 7-52 (1989)
25. Kutlu B., "İki Boyutlu Ising Modelin Creutz Cellular Automaton ile İncelenmesi" ., Doktora Tezi, *Gazi Ünv. Fen Bilimleri Enstitüsü*, Ankara 1-12 (1995)
26. Dres C., "Microcanonical Simulations with a Large Number of Demons" *J. Phys. A*, 28: 7051-764 (1995)
27. Wolfram S., "Statistical mechanics of cellular automata", *Rev. Mod. Phys.*, 55: 601-644 (1983)

28. Aktekin N., “Dinamical Critical exponent of the three-dimensional Ising model on the Creutz Cellular Automaton”, *3rd Gen. Conf. Of the Balk. Phys. Un.*, Romania(Cluj-Napoca)
29. Ficher M.E., Racs Z., “Scalling Theory of Nonlinear Critical Relaxation”, *Phys. Rev. B*, 13: 5039-5041 (1976)
30. Merdan Z., “Altı Boyutlu Ising Modelin Creutz Cellular Automaton ile İncelenmesi” ., Doktora. Tezi, *Gazi Ünv. Fen Bilimleri Enstitüsü*, Ankara, 49-51 (2003)
31. Kalay M., “Beş Boyutlu Ising Modelin “Creutz Cellular Automaton”ında İncelenmesi”, Doktora. Tezi, *Gazi Ünv. Fen Bilimleri Enstitüsü*, Ankara, 64-101 (2001)
32. Tor H. İ., “Dört Boyutlu Ising Modelin $(6)_3^4$ Örgüsünde Creutz Cellular Automaton İle İncelenmesi”, Yüksek Lisans Tezi, *Gazi Ünv. Fen Bilimleri Enstitüsü*, Ankara, 1-24 (2002)

ÖZGEÇMİŞ

1979' da Şabanözü'de doğdu. İlk, orta ve lise öğrenimini Ankara'da tamamladı. 1996 yılında Gazi Üniversitesi Gazi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik bölümünde başladığı lisans öğrenimini 2000 yılında tamamladı. Aynı yıl Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında yüksek lisans programına başladı. 2002 yılında Gazi Üniversitesi Kırşehir Fen Edebiyat Fakültesi Fizik bölümünde Araştırma Görevlisi olarak çalışmaya başladı. Halen Gazi Üniversitesi Kırşehir Fen Edebiyat Fakültesi Fizik bölümünde Araştırma Görevlisi olarak çalışmaktadır.

