

166026

**SEKİZ BOYUTLU ISING MODELİN $(4)_4^8$ ÖRGÜSÜNDE
CREUTZ CELLULAR AUTOMATON İLE İNCELENMESİ**

Ayşe DURAN

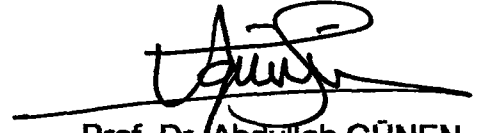
**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

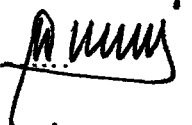
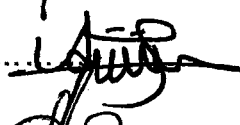
TEMMUZ 2005

ANKARA

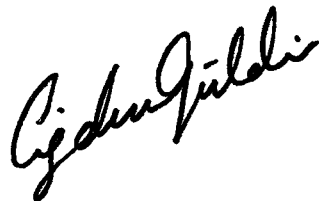
Ayşe DURAN tarafından hazırlanan SEKİZ BOYUTLU ISING MODELİN
(4)₄ ÖRGÜSÜNDE CREUTZ CELLULAR AUTOMATON İLE
İNCELENMESİ adlı tezin Yüksek Lisans tezi olarak uygun olduğunu
onaylarım.


Prof. Dr. Abdullah GÜNEN
Tez Yöneticisi

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

Başkan : Prof. Dr. D. Mehmet ZENGİN 
Üye : Prof. Dr. Abdullah GÜNEN 
Üye : Prof. Dr. Güneş TANIR 
Üye :
Üye :

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



**SEKİZ BOYUTLU ISING MODELİN $(4)_4^8$ ÖRGÜSÜNDE CREUTZ
CELLULAR AUTOMATON İLE İNCELENMESİ
(Yüksek Lisans Tezi)**

Ayşe DURAN

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
Temmuz 2005**

ÖZET

Bu çalışmada, sekiz boyutlu Ising model Creutz "cellular automaton" ile simüle edildi. Simülasyonlar doğrusal boyutu $L=4$ olan periyodik sınır şartlı L^8 basit hiperkübik örgülerde ve sonsuz örgü kritik sıcaklığı yakınında dört bitli demonlar kullanarak Creutz "cellular automaton"da incelendi. Özısı, düzen parametresi, manyetik alınganlığın hesaplanan değerleri cellular automatonun gelişimi boyunca zaman adımları sayısı (60 000, 120 000 ve 180 000) ve örgüler üzerindendir. Özısı ve manyetik alınganlık için kritik sıcaklık değerleri sırasıyla $T_c = 14,7904 \pm 0,0004$; $T_c = 14,7905 \pm 0,0009$; $T_c = 14,7904 \pm 0,0004$ ve $T_c = 14,8240 \pm 0,0028$; $T_c = 14,8252 \pm 0,0011$; $T_c = 14,8253 \pm 0,0005$ olarak elde edildi. Manyetik alınganlığına ait kritik sıcaklık değerleri kullanılarak, manyetik alınganlık ve düzen parametresi için kritik üsler hesaplandı. Bu değerler, renormalizasyon grup tahmini kritik üs değerleri ($\beta = \beta' = 0,5$; $\gamma = \gamma' = 1$) ve literatürdeki diğer teorik değerleri ($\beta = \beta' = 0,48$; $\gamma = \gamma' = 1,05$) ile uyumludur.

Bilim Kodu : 228

Anahtar Kelimeler : Ising Model, Creutz Cellular Automaton, Kritik Üs

Sayfa Adedi : 59

Tez Yöneticisi : Prof. Dr. Abdullah GÜNEN



**STUDY OF EIGHT-DIMENSIONAL ISING MODEL USING $(4)_4^8$ LATTICES
ON THE CREUTZ CELLULAR AUTOMATON**

(M. Sc. Thesis)

Ayşe DURAN

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

Temmuz 2005

ABSTRACT

In this work, the eight-dimensional Ising model is simulated on the Creutz cellular automaton. Simulations are carried out on the simple hypercubic lattices L^8 of linear dimension $L=4$ with periodic boundary conditions and using four binary bit demons near the critical temperature of the finite size lattice. The values of specific heat, order parameter and magnetic susceptibility computed are averages over the lattices and the number of time steps (60 000, 120 000, 180 000) during which the cellular automaton develops. The values of critical temperature for the specific heat and the magnetic susceptibility are $T_c = 14,7904 \pm 0,0004$; $T_c = 14,7905 \pm 0,0009$; $T_c = 14,7904 \pm 0,0004$ and $T_c = 14,8240 \pm 0,0028$; $T_c = 14,8252 \pm 0,0011$; $T_c = 14,8253 \pm 0,0005$, respectively. The values of critical exponent for the magnetic susceptibility and the order parameter are computed using the values of critical temperature for the magnetic susceptibility. These values are in agreement with the renormalization group prediction ($\beta = \beta' = 0,5$; $\gamma = \gamma' = 1$) and with other teoric values ($\beta = \beta' = 0,48$; $\gamma = \gamma' = 1,05$).

Bilim Kodu : 228

Anahtar Kelimeler : Ising Model, Creutz Cellular Automaton, Critical Exponents

Sayfa Adedi : 59

Tez Yöneticisi : Prof. Dr. Abdullah GÜNEN



TEŞEKKÜR

Çalışmalarım boyunca değerli yardım ve katkılarıyla beni yönlendiren, yüreklendiren, kıymetli tecrübelerinden yararlandığım Hocam Prof. Dr. Abdullah GÜNEN'e, yardımlarını hiçbir zaman esirgemeyen hocam Yrd. Doç. Dr. Ziya MERDAN'a, bilgi ve deneyimlerini paylaşmaktan çekinmeyen arkadaşlarım Aycan ÖZKAN ve Sezgin AYDIN'a, aileme ve eşime teşekkür ederim.



İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET	iii
ABSTRACT	v
TEŞEKKÜR.....	vii
İÇİNDEKİLER.....	viii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ	x
ŞEKİLLERİN LİSTESİ	xi
1. GİRİŞ	1
2. TEORİ	6
2.1 Örgü Geometrileri.....	6
2.2 Spin $\frac{1}{2}$ Ising Model.....	18
2.3 Ising Modelde Termodinamik Nicelikler.....	19
2.3.1 Serbest enerji ve özısı	19
2.3.2 Düzen parametresi ve manyetik alınganlık.....	20
2.4 Statik Kritik Olay ve Statik Kritik Üsler	23
2.4.1. Kendiliğinden mıknatıslanma (manyetizasyon) M , manyetik alınganlık χ ve özısı c 'nin sıcaklığa bağımlılığı	23
3. MODEL	26
3.1 Creutz Cellular Automaton Modeli ve Algoritması	26
3.2 Sekiz Boyutlu Ising Model için Creutz Cellular Atomaton Modeli.....	28
3.2.1 Sekiz boyutlu Ising modelin Creutz cellular automaton'da demon enerjisi ve kinetik enerji hesabı	30
3.3. Creutz Cellular Atomaton Ising Modelde Termodinamik Niceliklerin Hesabı.....	34

	Sayfa
4. SONUÇLAR	35
4.1. Termodinamik Niceliklerin Sıcaklıkla Değişimi	35
4.1.1. Özısının sıcaklıkla değişimi	35
4.1.2. Düzen parametresinin sıcaklıkla değişimi	38
4.1.3. Manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişimi	41
4.2. β , β' , γ , γ' Statik Kritik Üslerin Hesabı	44
4.2.1. Düzen parametresi kritik üsleri β , β'	44
4.2.2. Manyetik alınganlık kritik üsleri γ , γ'	49
5. TARTIŞMA	54
KAYNAKLAR	56
ÖZGEÇMİŞ	59

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 2.1. d -boyutlu hiperküplerde bulunan daha küçük boyutlu hiperküp sayısının formül ile gösterimi	11
Çizelge 2.2. d -boyutlu hiperküplerde bulunan k -boyutlu hiperküplerin sayısı	11
Çizelge 2.3. Örgü çeşitlerinin uzay boyutu ve koordinat sayısı	16
Çizelge 3.1. Dört bitli demonların alabileceği tamsayı değerleri, E_D ve E_K değerleri.....	31
Çizelge 4.1. $L=4$ örgüsü için zaman adımındaki artışa bağlı olarak $T_C^c(L)$ özısı kritik sıcaklığının değişimi.....	38
Çizelge 4.2. $L=4$ örgüsü için zaman adımındaki artışa bağlı olarak $T_C^z(L)$ manyetik alınganlık kritik sıcaklığının değişimi	44
Çizelge 4.3. 60 000, 120 000 ve 180 000 zaman adımlarında $T < T_C$ için kendiliğinden mıknatıslanma kritik üsleri	48
Çizelge 4.4. 60 000, 120 000 ve 180 000 zaman adımlarında $T < T_C$ için manyetik alınganlık kritik üsleri.....	53

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.1. $d=1,2,3,4,5,6,7,8$ boyutlu hiperküplerin oluşturulması	6
Şekil 2.1."Devam" $d=1,2,3,4,5,6,7,8$ boyutlu hiperküplerin oluşturulması	7
Şekil 2.1."Devam" $d=1,2,3,4,5,6,7,8$ boyutlu hiperküplerin oluşturulması	8
Şekil 2.1."Devam" $d=1,2,3,4,5,6,7,8$ boyutlu hiperküplerin oluşturulması	9
Şekil 2.1."Devam" $d=1,2,3,4,5,6,7,8$ boyutlu hiperküplerin oluşturulması ..	10
Şekil 2.2. 1-boyutlu hiperkübik örgü (doğrusal örgü)	12
Şekil 2.3. 2-boyutlu hiperkübik örgü (kare örgü)	12
Şekil 2.4. 3-boyutlu hiperkübik örgü (kübik örgü)	12
Şekil 2.5. Dört boyutlu bir hiperküp (4d)	13
Şekil 2.6. 5-boyutlu bir hiperküp (5d)	13
Şekil 2.7. 6-boyutlu bir hiperküp (6d)	13
Şekil 2.8. 7-boyutlu bir hiperküp (7d)	14
Şekil 2.9. 8-boyutlu bir hiperküp (8d)	14
Şekil 2.10. Bal peteği "honeycomb" örgüsü	14
Şekil 2.11. Üçgen "triangular" örgü	15
Şekil 2.12. $d=0, 1, 2, 3, 4$ için köşelerine digitler takılarak isimlendirilmiş hiperküplerin bir tür gösterimi	17
Şekil 2.13. (a) Sonsuz örgüler için özısının T_c civarındaki davranışı	20
Şekil 2.13. (b) Sonlu örgüler için özısının T_c civarındaki davranışı	20
Şekil 2.14. Düzen parametresinin sıcaklıkla değişimi	21
Şekil 2.15. (a) Sonsuz örgüler için manyetik alınganlığın T_c civarındaki davranışı	22

Şekil	Sayfa
Şekil 2.15. (b) Sonlu örgüler için manyetik alınganlığın T_c civarındaki davranışı	22
Şekil 3.1. Sekiz boyutlu hiperkübik örgüde spinlerin ters çevrilmesi durumunda, ΔH_I , Ising enerjisindeki değişimler	32
Şekil 3.1. "Devam" Sekiz boyutlu hiperkübik örgüde spinlerin ters çevrilmesi durumunda, ΔH_I , Ising enerjisindeki değişimler	33
Şekil 4.1.(a) 60 000 zaman adımında özısının sıcaklıkla değişimi	36
Şekil 4.1.(b) 120 000 zaman adımında özısının sıcaklıkla değişimi	36
Şekil 4.1.(c) 180 000 zaman adımında özısının sıcaklıkla değişimi	37
Şekil 4.1.(d) 60 000, 120 000 ve 180 000 zaman adımlarında özısının sıcaklıkla değişimi	37
Şekil 4.2.(a) 60 000 zaman adımında düzen parametresinin sıcaklıkla değişimi	39
Şekil 4.2.(b) 120 000 zaman adımında düzen parametresinin sıcaklıkla değişimi	39
Şekil 4.2.(c) 180 000 zaman adımında düzen parametresinin sıcaklıkla değişimi	40
Şekil 4.2.(d) 60 000, 120 000 ve 180 000 zaman adımlarında düzen parametresinin sıcaklıkla değişimi	40
Şekil 4.3.(a) 60 000 zaman adımında manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişimi	42
Şekil 4.3.(b) 120 000 zaman adımında manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişimi	42
Şekil 4.3.(c) 180 000 zaman adımında manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişimi	43
Şekil 4.3.(d) 60 000, 120 000 ve 180 000 zaman adımlarında manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişimi	43

Şekil	Sayfa
Şekil 4.4.(a) $T < T_c$ için, 60 000 zaman adımı için $\text{Log}M - \text{Log}\epsilon$ 'a göre değişimi.....	45
Şekil 4.4.(b) $T < T_c$ için, 60 000 zaman adımı için $\text{Log}(M/ \text{Log}^{1/3}\epsilon) - \text{Log}\epsilon$ 'a göre değişimi.....	46
Şekil 4.5.(a) $T < T_c$ için, 120 000 zaman adımı için $\text{Log}M - \text{Log}\epsilon$ 'a göre değişimi.....	46
Şekil 4.5.(b) $T < T_c$ için, 120 000 zaman adımı için $\text{Log}(M/ \text{Log}^{1/3}\epsilon) - \text{Log}\epsilon$ 'a göre değişimi.....	47
Şekil 4.6.(a) $T < T_c$ için, 180 000 zaman adımı için $\text{Log}M - \text{Log}\epsilon$ 'a göre değişimi.....	47
Şekil 4.6.(b) $T < T_c$ için, 180 000 zaman adımı için $\text{Log}(M/ \text{Log}^{1/3}\epsilon) - \text{Log}\epsilon$ 'a göre değişimi.....	48
Şekil 4.7.(a) $T < T_c$ için, 60 000 zaman adımı için $\text{Log}\chi - \text{Log}\epsilon$ 'a göre değişimi.....	50
Şekil 4.7.(b) $T < T_c$ için, 60 000 zaman adımı için $\text{Log}(\chi/ \text{Log}^{1/3}\epsilon) - \text{Log}\epsilon$ 'a göre değişimi.....	50
Şekil 4.8.(a) $T < T_c$ için, 120 000 zaman adımı için $\text{Log}\chi - \text{Log}\epsilon$ 'a göre değişimi.....	51
Şekil 4.8.(b) $T < T_c$ için, 120 000 zaman adımı için $\text{Log}(\chi/ \text{Log}^{1/3}\epsilon) - \text{Log}\epsilon$ 'a göre değişimi.....	51
Şekil 4.9.(a) $T < T_c$ için, 180 000 zaman adımı için $\text{Log}\chi - \text{Log}\epsilon$ 'a göre değişimi.....	52
Şekil 4.9.(b) $T < T_c$ için, 180 000 zaman adımı için $\text{Log}(\chi/ \text{Log}^{1/3}\epsilon) - \text{Log}\epsilon$ 'a göre değişimi.....	52

1. GİRİŞ

Manyetik alanların temel kaynakları, atomların manyetik dipol momentleridir. Atomik dipol momentler, hem elektronların yörüngesel hareketlerinden hem de elektronların "spin" denen iç özelliklerinden kaynaklanabilir. Maddenin manyetik durumu, mıknatıslanma vektörü (M) ile tanımlanır. Mıknatıslanma vektörünün büyüklüğü, maddenin birim hacimdeki net manyetik momentine eşittir. Bir maddedeki toplam manyetik alan, hem uygulanan (dış) alana ve hem de maddenin mıknatıslanmasına bağlıdır.

Maddelerin manyetik özellikleri, bir dış manyetik alana gösterdikleri tepkiye göre tanımlanabilir. Maddeler ferromanyetik, paramanyetik ve diamanyetik olarak üç grupta incelenebilirler. Ferromanyetik ve paramanyetik maddelerin atomları sürekli manyetik dipole sahiptirler. Diamanyetik maddeler ise, hiç manyetik dipol momenti olmayan atomlardan oluşurlar (1).

Atomik dipoller, dışarıdan bir manyetik alanla yönlendirilirler. Ferromanyetikler, manyetizasyonu sürdürmek için bir dış manyetik alana gerek duymazlar. Ferromanyetizma (paramanyetizma gibi), tek kalmış elektronun spin manyetik dipolünden kaynaklanır. Ferromanyetizmayı paramanyetizmadan ayıran en önemli özellik, komşu dipoller arasındaki etkileşmedir. Ferromanyetizmada bir dipol komşusuyla "aynı yönlü" olmaya çalışır. Madde içindeki ısısal değişim hareketi bu aynı yönlü olma düzenini bozmak ister, fakat sıcaklık fazla yüksek değilse dipolleri kımıdatamaz. Bu nedenle, yüksek sıcaklıklarda ferromanyetik düzen belirli bir sıcaklıkta aniden bozulur. Curie noktası denilen bu değerin altında madde ferromanyetik, üstünde ise paramanyetik olur. Curie noktası, kaynama ve donma noktası gibi, kritik bir sıcaklıktır. İstatistik mekanikte, bir maddenin durumunda belirli bir sıcaklıkta olan bu ani değişikliklere faz geçişleri denir (2).

Faz geçişleri, bir termodinamik değişkenin (sıcaklık gibi) küçük bir değişimi ile

bir ya da daha fazla fiziksel özelliğindeki, özellikle özısısındaki, ani değişikliklerdir. Bazı termodinamik değişkenler için, bir sistemin serbest enerjisi süreksizlik gösterdiğinde faz geçişleri meydana gelmektedir. Bu süreksizlik, genellikle bir sistemdeki parçacıkların pek çoğunun etkileşmesinden kaynaklanmakta ve çok küçük sistemlerde bu durum gözlenmemektedir. Faz geçişleri, birinci dereceden faz geçişleri ve sürekli faz geçişleri olarak ikiye ayrılır. Birinci dereceden faz geçişleri, termodinamik değişkenli serbest enerjinin birinci türevinde bir süreksizlik sergilemektedir. Sürekli faz geçişleri, ikinci dereceden faz geçişleri olarak da adlandırılmaktadır. Bu faz geçişleri, serbest enerjinin ikinci türevinde bir süreksizliğe sahiptir. İkinci dereceden faz geçişlerinin örnekleri, ferromanyetik geçiş, süper akışkanlık geçişi ve Bose-Einstein yoğunlaşmasıdır.

İstatistik mekanikte bu faz geçişleri spin modelleri adı altında incelenmektedir. Spin modelleri, bütün faz geçişlerinde ortak özelliklerin bulunmasında önemli bir rol oynamaktadır. Bu nedenle fizik, kimya, biyoloji, ekonomi, işletme,... gibi pek çok alanda kullanılmaktadır. Özellikle fizikte manyetik sistemlerin modellenmesinde büyük rol oynamaktadır. Hem teorik hem de deneysel verilerden elde edilen fiziksel nicelikler karşılaştırılarak istatistik mekanikteki kavramlar pekiştirilmekte ve bu niceliklerin ortak özelliklerinin evrenselliği ortaya konmaktadır.

Bu çalışmada, spin modellerinden spin $\frac{1}{2}$ Ising modeli ele alınmaktadır. Ising model, spin modelleri içinde faz geçişlerini incelemek için kullanılan en basit ve en iyi bilinen modeldir ve böylelikle ferromanyetizmanın anlaşılması için iyi bir model oluşturmaktadır. Bir spin modeli olan Ising model, 1925 yılında E. Ising tarafından bir boyutlu örgüler için çözülmüştür (3). Periyodik sınır şartları altında sonsuz kare örgü için Ising modelin tam çözümü Onsager (4) tarafından gerçekleştirilmiştir. Daha sonra bu model ile, boyutun faz geçişleri üzerindeki etkilerini incelenmek için uzay boyutu (d) ve örgü boyutu (L) artırılarak pek çok çalışma yapılmıştır (5,6,7). Yüksek boyutlarda Ising modeli

incelemenin bir nedeni, sonlu örgü ölçeklemenin örgü geometrisine bağlı olması sebebiyle $d > 4$ için hiper ölçekleme bağıntılarının bozulmasıdır. Başka bir nedeni de; seçilen hesaplama yöntemine göre, örneğin Transfer matrisleri, örgüye yerleştirilecek spin sayının belli bir sayıyı geçmemesi gerektiğidir. Sonlu örgüler için Ising modelin analitik çözümü olmadığı için simülasyon tekniklerine başvurulmaktadır.

Faz geçişinin ve kritik olayların anlaşılmasında bilgisayar simülasyon sonuçları büyük bir rol oynamaktadır. Simülasyon, gerçek bir sistemin modelini tasarlama süreci ve sistemin işlemesi için sistemin davranışını anlamak veya değişik görüşleri değerlendirmek için bu model üzerinde denemeler yapmaktır. Serbestlik derecesi büyük olan karmaşık sistemlerin laboratuvar ortamında incelenmesi, hem teknik açıdan hem de ekonomik açıdan gerçekleştirilmesi çok zor olduğundan simülasyon yöntemi, deneysel çalışmaların bilgisayar ortamında yapılabilmesini mümkün kılmaktadır. Sistemin termodinamik özelliklerinin anlaşılmasını da sağlamaktadır. Tam çözüm yapılamasa da yaklaşık çözümler yapılabilir. Bu yaklaşık çözümlerin doğruluğunu denemek ve desteklemek açısından simülasyon önemlidir. Yani simülasyon sonuçları ile, teorik sonuçların yanında gerçek deney sonuçları karşılaştırılabilir (8,9).

20. yüzyılın ortalarında manyetik materyalleri modellemek, bu modellerin davranışı ile ilgili inceleme yapmak ve reel sistem gözlemleriyle bilgisayar sonuçlarını kıyaslamak mümkün oldu. Son yıllarda, Ising model kullanılarak kritik sıcaklıktaki manyetik materyallerin pek çok sayısal çalışmaları bulunmaktadır. Bu çalışmalar sık sık "Monte Carlo tahmini" (9,10,11,12), "Moleküler Dinamik yöntem" (13,14) ile gerçekleştirilmektedir.

Monte Carlo tahmininde sistemi tanımlayan konfigürasyonlar rastgele sayı üretici kullanılarak üretilmektedir. Hesaplamaların sonuçları büyük ölçüde kullanılan rastgele sayı üreticinin kalitesine bağlıdır. Algoritma, herhangi bir

konfigürasyona rastlama ihtimaliyeti Boltzmann dağılımına uyacak şekilde ayarlanmaktadır. Sıcaklık programda bir giriş parametresi olarak kullanılmakta ve bilgisayar belirli bir sıcaklıktaki ısı deposu gibi davranmaktadır. Diğer taraftan, moleküler dinamik hesaplamalarda sistemin deterministik gelişimi uygun mikroskobik bir hamiltoniyen yardımıyla gerçekleştirilmektedir. Bu tür algoritmalarda sıcaklık, bir giriş parametresi olarak kullanılmamakta ve onun değeri farklı serbestlik dereceleri arasında enerjinin eş bölüşümü olarak hesaplanmaktadır. Monte Carlo tahmini ile Moleküler Dinamik yöntem arasında yer alan deterministik bir algoritma 1983 yılında Creutz tarafından oluşturulmuştur. Bu algoritma Ising modelin deterministik bir "cellular automaton" kuralı ile simülasyonunu mümkün kılmaktadır (15,16).

Cellular Automaton'da uzay ve zaman kesikli değerlere sahiptir ve sonsuza kadar genişletilebilen düzenli bir hücre örgüsünden meydana gelir. Bölgesel iç etkileşmeye sahip çok sayıda farklı elemanlar içeren fiziksel sistemler sık sık "cellular automaton" olarak modellenmiştir. En belirgin durumlarda "cellular automaton" örgüsü konum uzayındadır. Mikroskobik seviyede her bir konum kristal örgüdeki kuantize ölçülebilirliğe (spin bileşeni gibi) veya atom tiplerine karşılık gelen noktaları temsil edebilir. Bu yüzden dinamik Ising model ve diğer örgü spin sistemleri basit bir "cellular automaton" dır. Ising modelin ve çeşitli fiziksel problemlerin bir "cellular automaton" olarak simülasyonu Vichniac tarafından önerilmiş ve iki boyutlu kare örgüler için komşuluktaki hücrelerin sayısına, konumuna bağlı olarak bir çok "cellular automaton" kuralı isimlendirilmiştir. Vichniac'ın Ising model için önerdiği kural Pomeau ve Herrmann tarafından Q2R Ising model olarak geliştirilmiştir. Q2R Ising modelde spin-spin etkileşme enerjisi (Ising enerji veya iç enerji) sistemin toplam enerjisine karşılık gelmektedir. Q2R algoritması ile toplam enerjinin korunduğu mikrokanoik bir küme oluşmakta, yani simülasyon süresince herhangi bir spin değişiminde iç enerjinin korunduğu konfigürasyonlar üretilmektedir. İç enerji bütün simülasyon süresince sabit

kaldığından özısı, iç enerjinin dalgalanmaları kullanılarak hesaplanamamaktadır. Bu kısıtlama iç enerji ve spine eşlenik momentuma karşılık gelen kinetik enerjinin toplamının korunduğu Creutz “cellular automaton” Ising model ile ortadan kalkmaktadır. Creutz algoritmasında herhangi bir spin değişimi sonucunda Ising enerji ve kinetik enerji birlikte değişmekte, ancak toplam enerji sabit kalmaktadır. Bunun sonucu olarak, Creutz algoritması kullanılarak üretilen konfigürasyonlardan, iç enerjiye bağlı termodinamik nicelikleri hesaplayabilmek mümkün olabilmektedir. Diğer taraftan bu algoritma yaygın Monte Carlo metodlarından on kat daha hızlı çalışmakta ve yüksek kalitede rastgele sayı üreticine ihtiyaç duymamaktadır (16,17,18,19,20,21).

Bu çalışmada; sekiz boyutlu Ising model, doğrusal boyutu $L=4$ olan periyodik sınır şartlı basit hiperkübik (L^8) örgüde ve T_c kritik sıcaklığı yakınında dört bitli demonlar kullanılarak Creutz “cellular automaton”da simülasyonu yapılmıştır. 60 000, 120 000 ve 180 000 zaman adım sayısının değişimine bağlı olarak; kritik sıcaklığın, termodinamik niceliklerin ve buna bağlı olarak statik kritik üslerin nasıl değiştiği incelenmektedir.

2. Bölümde; örgü geometrileri, spin $\frac{1}{2}$ Ising model, termodinamik nicelikler ve statik kritik üsler incelenmektedir.

3. bölümde; Creutz “cellular automaton” modeli ve algoritması, sekiz boyutlu Ising model için Creutz “cellular automaton” modeli ve demon enerjisi ile kinetik enerji hesabı yer almaktadır.

4. bölümde; 60 000, 120 000 ve 180 000 zaman adımlarında, simülasyondan elde edilen termodinamik nicelikler ve kritik üsler değerlendirilmektedir.

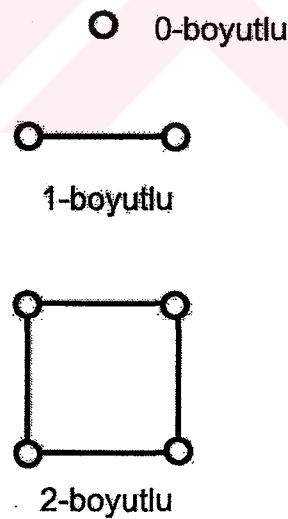
5. bölümde ise, yapılan çalışmanın sonuçları yorumlanmaktadır.

2. TEORİ

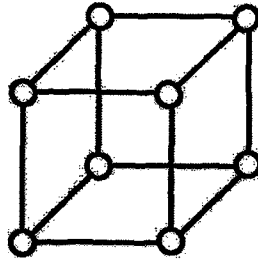
2.1. Örgü Geometrileri

Bu çalışmada $d=8$ boyutlu hiperkübik örgüler kullanılmaktadır. Hiperkübik örgüleri modellerde kullanabilmek için örgü geometrilerini anlamak önemlidir. Hiperkübik örgü geometrisini tanımak için, hiperküp geometrilerini iyi anlamak gerekir.

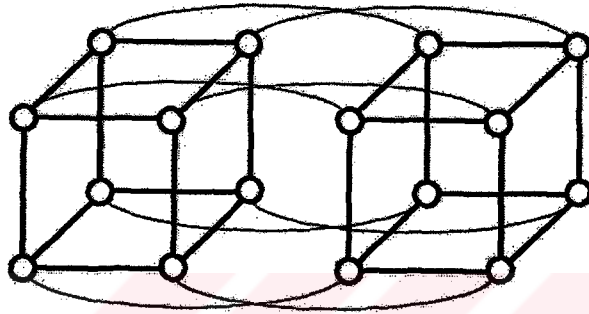
Basit küpler üç boyuta sahiptir, hiperküpler ise bir küpteki boyut sayısı artırılarak oluşturulabilir. 0-boyutlu hiperküp, *nokta*; 1-boyutlu hiperküp, *doğru*; 2-boyutlu hiperküp, *kare*; 3-boyutlu hiperküp, *küp*; 4-boyutlu hiperküp, *tesseract* ve diğer hiperküpler de kendi boyut isimleriyle adlandırılmaktadırlar. $d=1,2,3,4,5,6,7,8$ boyutlu hiperküplerin oluşturulma şekilleri Şekil 2.1'de verilmektedir.



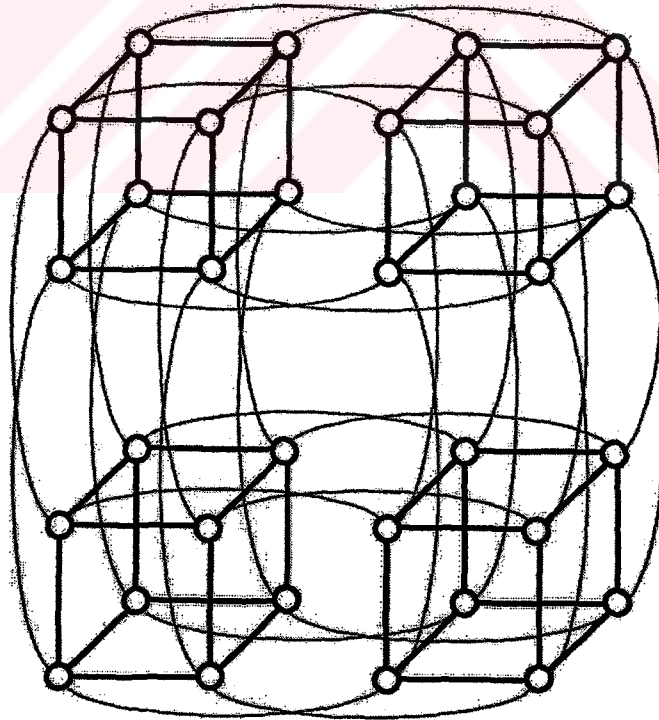
Şekil 2.1. $d=1,2,3,4,5,6,7,8$ boyutlu hiperküplerin oluşturulması



3-boyutlu

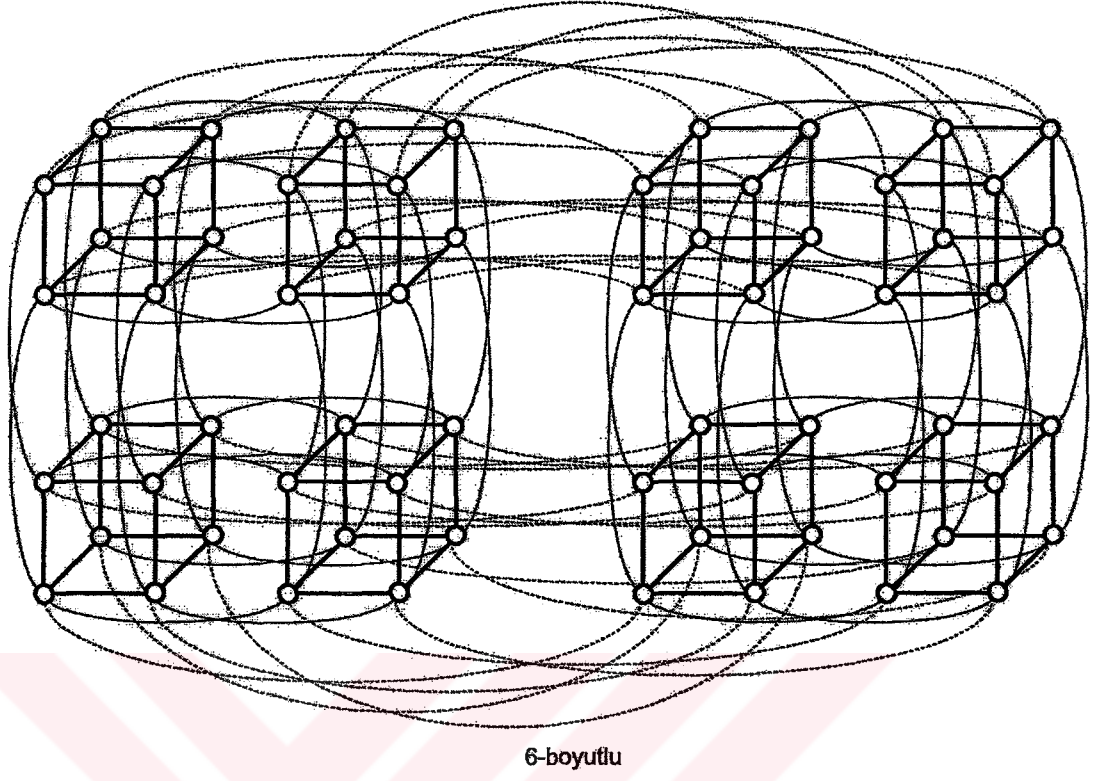


4-boyutlu

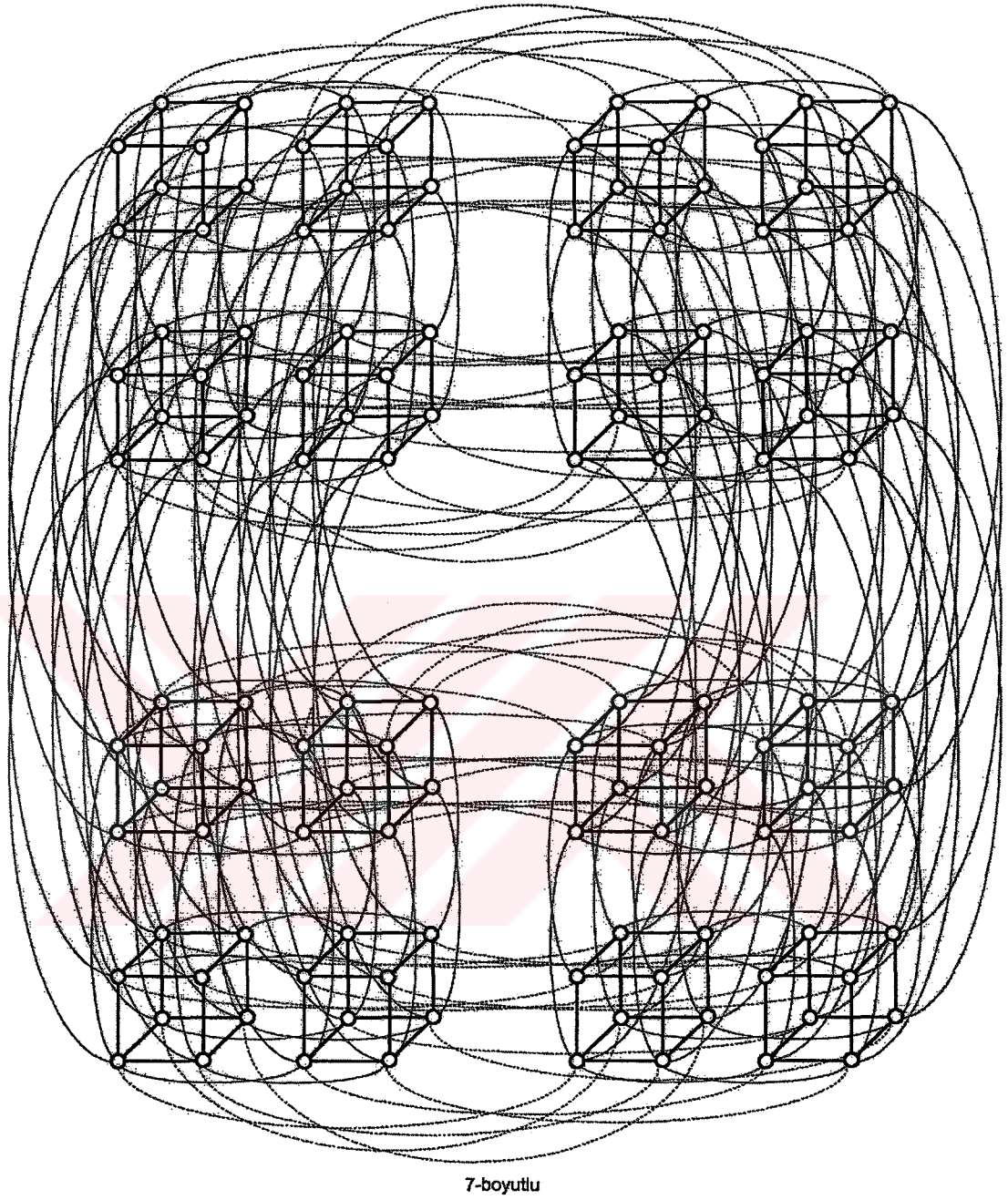


5-boyutlu

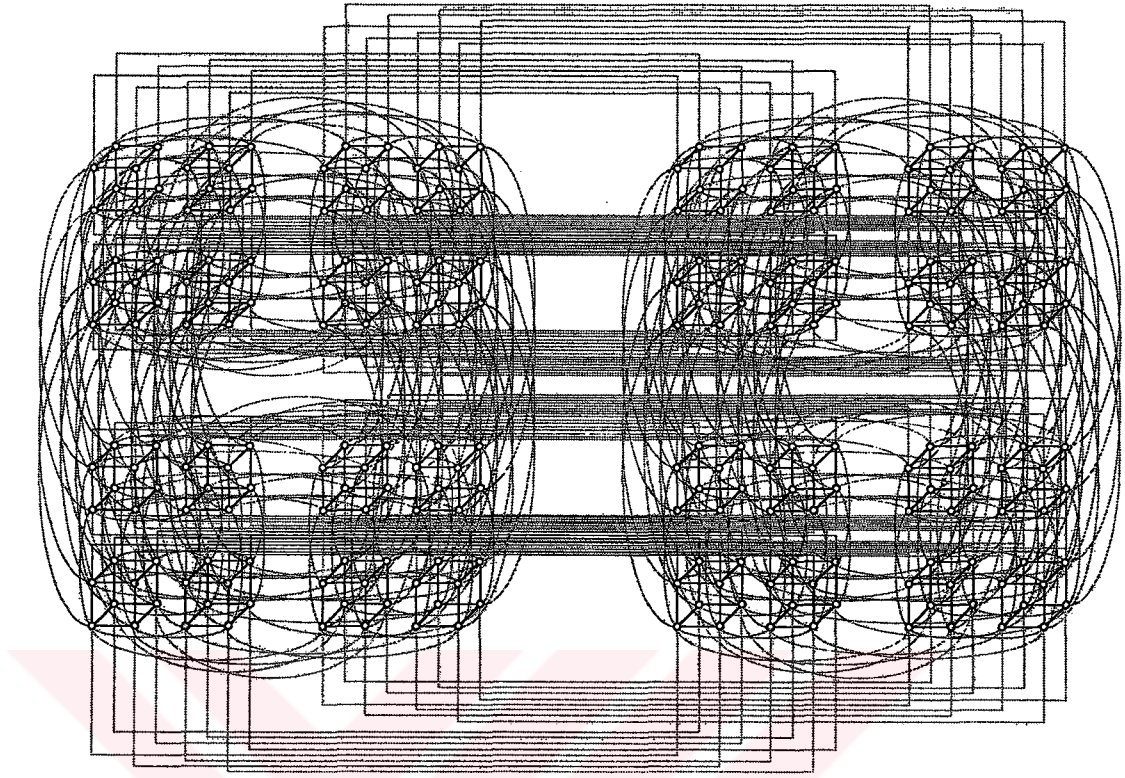
Şekil 2.1."Devam" $d=1,2,3,4,5,6,7,8$ boyutlu hiperküplerin oluşturulması



Şekil 2.1."Devam" $d=1,2,3,4,5,6,7,8$ boyutlu hiperküplerin oluşturulması



Şekil 2.1."Devam" $d=1,2,3,4,5,6,7,8$ boyutlu hiperküplerin oluşturulması



Şekil 2.1."Devam" $d=1,2,3,4,5,6,7,8$ boyutlu hiperküplerin oluşturulması

Şekil 2.1'de görüldüğü gibi d -boyutlu bir hiperküp $(d-1)$ -boyutlu iki hiperküpün birleşmesiyle oluşmaktadır. İki noktanın birleşmesiyle bir doğru, iki doğrunun birleşmesiyle bir kare, iki karenin birleşmesiyle bir küp, iki küpün birleşmesiyle bir tesseract ve iki tesseract'ın birleşmesiyle de bir 5-boyutlu hiperküp ($5d$), iki $5d$ 'nin birleşmesiyle bir 6-boyutlu hiperküp ($6d$), iki $6d$ 'nin birleşmesiyle bir 7-boyutlu hiperküp ($7d$) ve iki $7d$ 'nin birleşmesiyle bir 8-boyutlu hiperküp ($8d$) meydana gelmektedir. Aynı şekilde daha yüksek boyutlu hiperküpleri elde etmek mümkündür (22,23,24,25,26,27).

d -boyutlu hiperküplerde bulunan k -boyutlu hiperküplerin sayısı $\binom{d}{k} 2^{d-k}$

olarak adlandırılan $(2k+1)^d$ nin katsayılarından bulunabilir. Burada $\binom{d}{k}$

binom katsayısıdır. d -boyutlu bir hiperküpde bulunan daha küçük boyutlu hiperküplerin sayısı Çizelge 2.1'de verilmektedir.

Çizelge 2.1. d -boyutlu bir hiperküpde bulunan daha küçük boyutlu hiperküp sayısının formül ile gösterimi

Boyut	Nokta	Doğru	Kare	Küp	Tesseract	5d	6d	7d	8d
d	$\binom{d}{0}2^d$	$\binom{d}{1}2^{d-1}$	$\binom{d}{2}2^{d-2}$	$\binom{d}{3}2^{d-3}$	$\binom{d}{4}2^{d-4}$	$\binom{d}{5}2^{d-5}$	$\binom{d}{6}2^{d-6}$	$\binom{d}{7}2^{d-7}$	$\binom{d}{8}2^{d-8}$

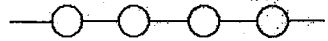
Çizelge 2.2. d -boyutlu bir hiperküpde bulunan k -boyutlu hiperküplerin sayısı

Boyut	Nokta	Doğru	Kare	Küp	Tesseract	5d	6d	7d	8d
0	1								
1	2	1							
2	4	2	1						
3	8	12	6	1					
4	16	32	24	8	1				
5	32	80	160	40	10	1			
6	64	192	240	160	60	12	1		
7	128	448	672	560	280	84	14	1	
8	256	1024	1792	1792	1120	448	112	16	1

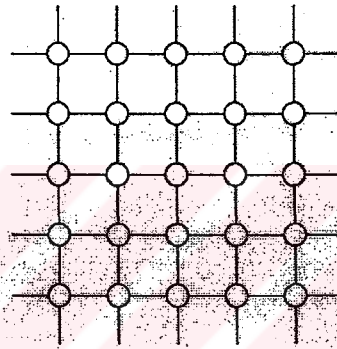
Spin modellerinde komşuluklar ve bu komşularla olan etkileşimler göz önüne alınmaktadır. Bu nedenle, model oluşturulurken köşeleri birleştiren doğrulardan oluşan düzenli bir geometrik “örgü” yapısı seçilmelidir. Örgüdeki bir köşe bir spin tarafından işgal edilir ve bu köşe “örgü noktası” olarak bilinmektedir. Böylelikle spinler, bir örgüdeki örgü noktalarını kaplarlar fakat her örgü noktası sadece bir spin tarafından işgal edilmek zorundadır. İki örgü noktasını birleştiren bir doğruya “örgü uzunluğu” adı verilmektedir. Bu doğruların birleştirdiği köşe sayısına da koordinat sayısı adı verilmekte ve seçilen örgü yapısında etkileşecek komşuluk sayısını belirlemekte bu koordinat sayısı önem kazanmaktadır. Mesela, en yakın komşuluklu $d=2$ boyutlu kare örgü 4 koordinata sahiptir ve 4 en yakın komşuluğa sahiptir.

Spin modellerinde $d=1,2,3,4,5,\dots,n$ boyutlu hiperkübik, elmas, balpeteği "honeycomb" ve üçgen "triangular" gibi örgüler kullanılmaktadır.

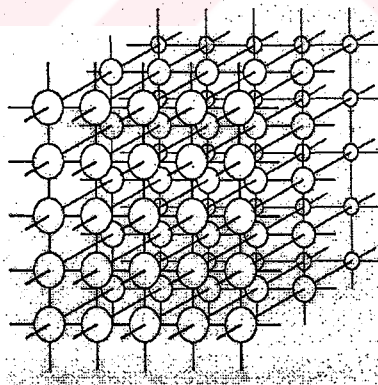
Aşağıda sırasıyla $d=1,2,3,4,5,6,7,8$ boyutlu hiperkübik örgüler verilmektedir.



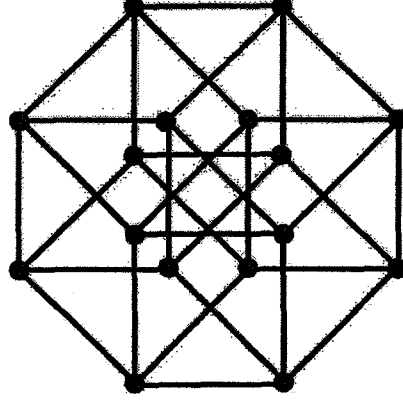
Şekil 2.2. 1-boyutlu hiperkübik örgü (doğrusal örgü)



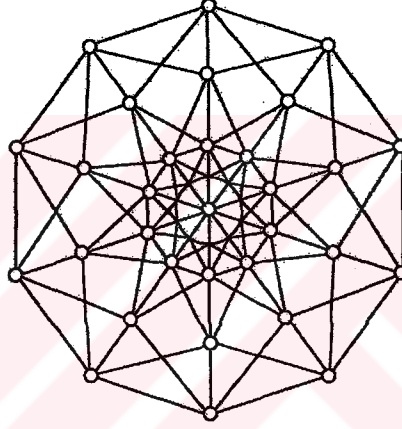
Şekil 2.3. 2-boyutlu hiperkübik örgü (kare örgü)



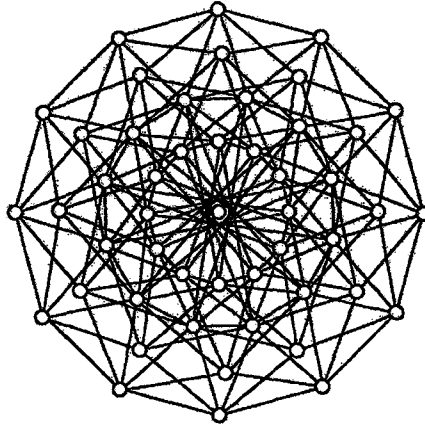
Şekil 2.4. 3-boyutlu hiperkübik örgü (kübik örgü)



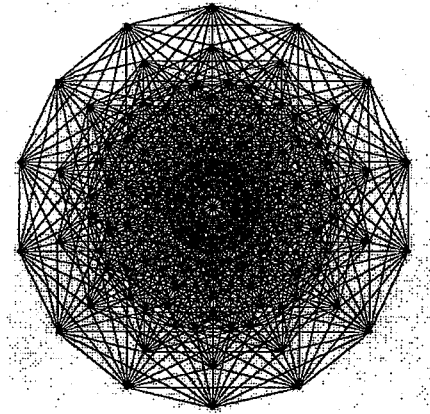
Şekil 2.5. Dört boyutlu hiperküp (4d)



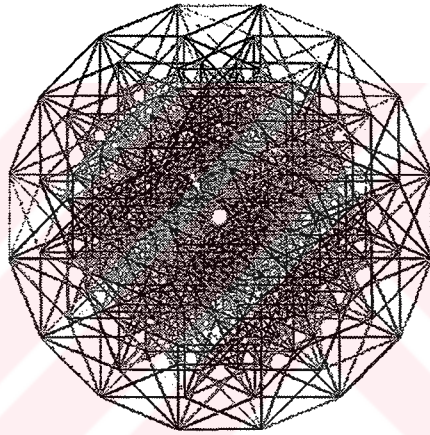
Şekil 2.6. 5-boyutlu bir hiperküp (5d)



Şekil 2.7. 6-boyutlu bir hiperküp (6d)

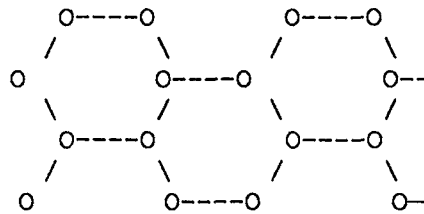


Şekil 2.8. 7-boyutlu bir hiperküp (7d)

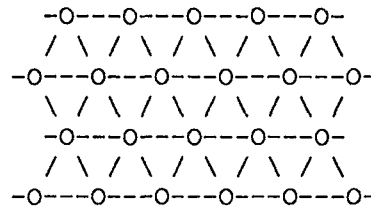


Şekil 2.9. 8-boyutlu bir hiperküp (8d)

Spin modellerinde kullanılan diğer geometriler bal peteği "honeycomb" örgüsü ve üçgen "triangular" örgüdür.



Şekil 2.10. Bal peteği "honeycomb" örgüsü



Şekil 2.11. Üçgen "triangular" örgü

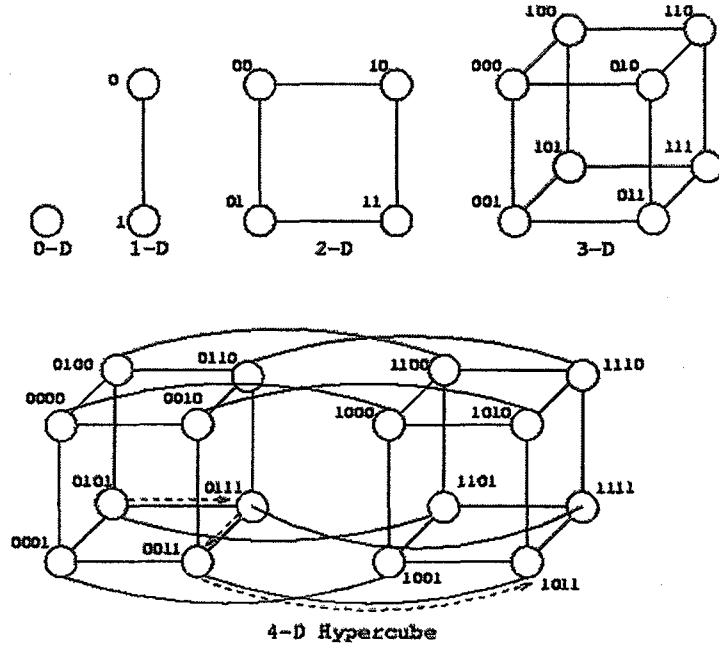
Şekil 2.11'de verilen bu üç boyutlu örgü bir elmas kristalindeki karbon atomlarının yapısında olan "elmas örgü" olarak bilinir.

Örgü geometrisinin karakteristik özelliklerinden birisi, direkt olarak bir örgü noktası ile bağlantıyı sağlayan örgü noktalarının sayısıdır. Bu, genellikle tüm örgü noktaları için aynıdır. Bu sayı, örgünün koordinat sayısı olarak bilinir. Değişik örgü geometrilerinin koordinat sayıları, Çizelge 2.3.'de verilmektedir.

Çizelge 2.3. Örgü çeşitlerinin uzay boyutu ve koordinat sayısı

<i>İsmi</i>	<i>Uzay Boyutu</i>	<i>Koordinat Sayısı</i>
Doğru	1	1
Honeycomb	2	3
Kare	2	4
Triangular	2	6
Diamond	3	4
Kübik	3	6
Tetrahedral	3	12
Tesseract	4	8
Hiperkübik	5	10
Hiperkübik	6	12
Hiperkübik	7	14
Hiperkübik	8	16

Spin $\frac{1}{2}$ Ising modelde örgü noktalarına spinlerin yerleştirilmesi yer almaktadır. Bu da hiperküplerde bulunan noktalara spin yerleştirildiği anlamına gelmektedir. Bir hiperküpte nokta sayısı 2^d olduğu gibi, Ising modelde kullanılan hiperkübik örgülerde örgü noktalarına yerleştirilen spinlerin konfigürasyon (şekillenim) sayısı 2^d 'dir. Spin $\frac{1}{2}$ Ising modelde spinler "0" veya "1" değerlerini almaktadırlar. 1d hiperkübik örgüde spin konfigürasyon sayısı iki, 2d hiperkübik örgüde spin konfigürasyon sayısı dört, 3d hiperkübik örgüde spin konfigürasyon sayısı sekiz, 4d hiperkübik örgüde spin konfigürasyon sayısı 16'dır. Bu durum, Şekil 2.13'de verilmektedir.



Şekil 2.13. $d=0, 1, 2, 3, 4$ için köşelerine digitler takılarak isimlendirilmiş hiperküplerin bir tür gösterimi.

Hiperküplerin köşelerine digitler takılarak isimlendirilmesi, Ising modelde hiperkübik örgülerin tercih sebebi olabilir.

Hiperkübik örgülerde, en yakın komşuluklar esas alındığında ise; d -boyutlu bir hiperkübik örgüde $2d$ komşuluk bulunduğu bilinmektedir. Bu, hiperküplerde bulunan koordinat sayısını ve farklı boyuttaki hiperküp sayısının hiperkübik örgülerdeki komşuluklarla bağlantısını ortaya koymaktadır. Örneğin, bir kare örgü $d=2$ uzay boyutuna sahiptir, 4 koordinatı ve 4 en yakın komşuluğu bulunmaktadır. Bu komşuluklar kare örgüye yerleştirilirken sahip olduğu doğrusal örgünün üzerine yerleştirilmektedir. Aynı şekilde, kübik örgü 6 kare örgüye sahiptir ve bu 6 kare örgü üzerine komşuluklar yerleştirilmektedir. O halde bu durum genelleştirilirse; d -boyutlu bir hiperkübik örgü, $(d-1)$ -boyutlu kaç örgüye sahipse o kadar en yakın komşuluğa ve koordinata sahip olur. Bu durum, Çizelge 2.2 ve Çizelge 2.3'den daha net görülebilir.

2.2. Spin ½ Ising Modeli

Spin ½ Ising modelinde incelen sistem, d-boyutlu periyodik bir örgüde N örgü konumuna sahiptir. Her bir örgü konumuna, +1 veya -1 değişkenlerinden birisini alabilen N tane spin değişkeni takılmıştır. S_i spin değişkeni olmak üzere; $S_i = +1$ olması i . örgünün konumunda spinin yukarı (spin-up), $S_i = -1$ olması da i . örgünün konumunda spinin aşağı (spin-down) yönlü olduğunu gösterir. Verilen bir $\{S_i\}$ kümesi bütün sistemin konfigürasyonunu belirlemekte ve bu konfigürasyona sahip bir sistemin enerjisi aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır.

$$H_I = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - H \sum_{i=1}^N S_i \quad [2.1]$$

Burada H_I Ising enerjisini, $\langle ij \rangle$ en yakın komşuluklu spin çiftleri üzerinden toplamı göstermektedir. Sistem, düzgün bir manyetik alan H ile ya aynı ya da zıt yönlü olmaya zorlanan mıknatıslar şeklinde düşünülebilir. Spinler arası etkileşme sabitleri J_{ij} yerine tek bir değer J değeri kullanılır; eğer $J > 0$ ise, komşu spinler hem birbiriyle hem de H ile aynı yönlü olmaya çalışırlar ve böylelikle model ferromanyetik olur. Eğer $J < 0$ ise, komşu spinler hem birbiriyle hem de H ile zıt yönlü olmaya çalışırlar ve böylelikle model antiferromanyetik olur. Ising modelinde bütün termodinamik fonksiyonlar, E_I enerjili bütün konfigürasyonlar üzerinden hesaplanmaktadır. E_I enerjili bir sistemin bölüşüm fonksiyonu aşağıdaki gibidir.

$$Z_I(H, T) = \sum_{S_1} \sum_{S_2} \dots \sum_{S_N} e^{-\beta E_I(S_i)} \quad [2.2]$$

Burada her bir S_i spin değişkeni bağımsız olarak ± 1 değerlerini alabildiğinden, yukarıdaki toplam 2^N terimden oluşmaktadır (3,28,29,30).

Ising modeli test etme kriteri, ferromanyetizma ile ilişkilendirilen süreksizliklerin karakteristik özelliklerini verip vermeyeceği ve ayrıca T_c Curie sıcaklığının $T < T_c$ için sıfırdan farklı kendiliğinden mıknatıslanmanın oluşması özelliğiyle tanımlanıp tanımlanamayacağıdır.

2.3. Ising Modelde Termodinamik Nicelikler

2.3.1. Serbest enerji ve özısı

Termodinamik nicelikler genel olarak spin başına serbest enerjiden elde edilmektedir. Serbest enerji, Boltzmann dağılımına uyan sistemlerin serbestlik derecesi başına enerjisi olup

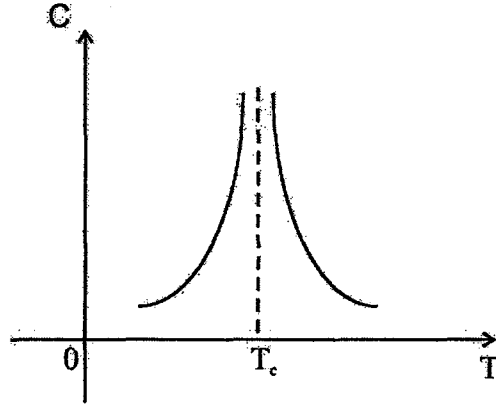
$$f(H, T) = -kT \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \log Z_I(H, T) \quad [2.3]$$

şeklinde ifade edilir. Serbest enerjiye bağlı olarak spin başına termodinamik nicelikler aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır (28).

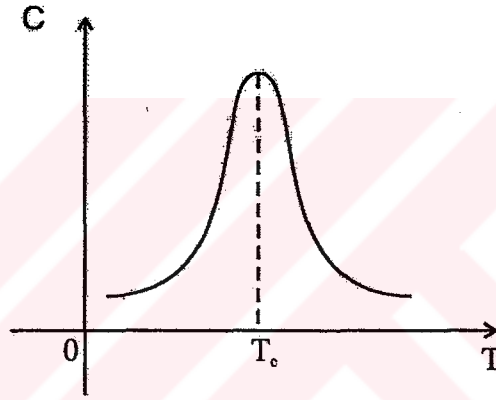
$$U_I(H, T) = -kT^2 \frac{\partial}{\partial T} (f/kT) \quad [2.4]$$

$$C_I = \frac{\partial U_I}{\partial T} \quad [2.5]$$

Burada U_I iç enerji (Ising enerjisi), C_I özısıdır. Özısı T_c 'de bir süreksizliğe sahiptir. Bu süreksizliği Şekil 2.13. (a)'da gösterilmektedir. Fakat bu durum sonsuz örgüler için geçerlidir. Bu çalışmada sonlu örgü alındığı için Şekil 2.13.(b)'de gösterildiği gibi bir durum sergilemekte, yani özısı T_c 'de maksimum bir değer almaktadır.



Şekil 2.13. (a) Sonsuz örgüler için özısının T_c civarındaki davranışı



Şekil 2.13. (b) Sonlu örgüler için özısının T_c civarındaki davranışı

2.3.1. Düzen parametresi ve manyetik alınganlık

Ferromanyetizma için M düzen parametresi, mıknatıslanma (manyetizasyon) vektörüdür. Termodinamik limitte mıknatıslanma ($N \rightarrow \infty$) "Eş. 2.6" ifadesiyle verilir. Z_f ve f , H dış manyetik alanın çift fonksiyonudur, böylelikle M "Eş. 2.7"de verildiği gibi tek fonksiyondur.

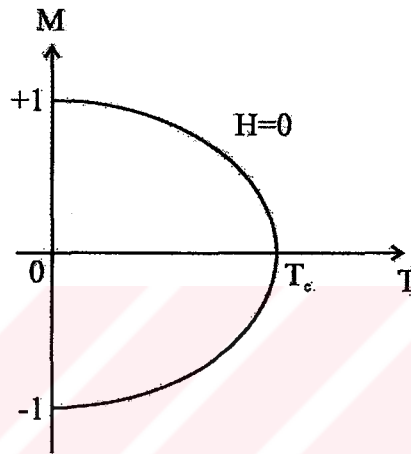
$$M(H, T) = -\frac{\partial}{\partial H}(f/T) \quad [2.6]$$

$$M(H, T) = -M(T, H) \quad [2.7]$$

ve mıknatıslanma örgü başına spin ortalamasıdır.

$$M(H, T) = N^{-1}(S_1 + S_2 + \dots + S_N)$$

$$= N^{-1} Z_I^{-1} \sum_S (S_1 + S_2 + \dots + S_N) e^{\left\{ - \left[E_0(S) - H \sum_i S_i \right] / kT \right\}} \quad [2.8]$$



Şekil 2.14. Düzen parametresinin sıcaklıkla değişimi

"Eş. 2.8" ve Şekil 2.14'den bu fonksiyonun $-1 \leq M \leq 1$ değer aralığında olduğu açıktır.

Manyetik alınganlık χ ,

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

$$= \left(\frac{N}{kT} \right) \left\{ \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \right\} \quad [2.9]$$

şeklinde ifade edilir. Burada mıknatıslanma

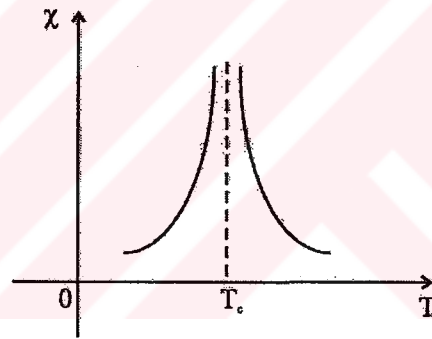
$$M = \sum_i S_i \quad [2.10]$$

olarak tanımlandığından, bir sabitin ortalamasının o sabitin kendisine eşit olduğundan hareketle

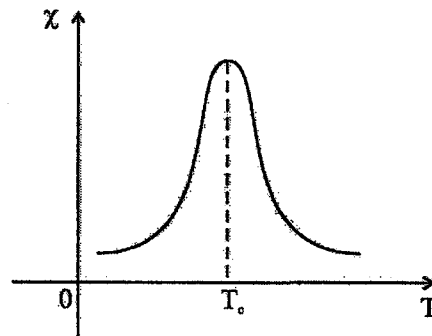
$$\chi = \left(\frac{N}{kT} \right) \langle [M - \langle M \rangle]^2 \rangle \quad [2.11]$$

şeklinde yazılabilir. χ pozitif bir büyüklüğün ortalamasıdır (16).

$$\chi(H, T) = \frac{\partial M}{\partial H} \geq 0 \quad [2.12]$$



Şekil 2.15. (a) Sonsuz örgüler için manyetik alınganlığın T_c civarındaki davranışı



Şekil 2.15. (b) Sonlu örgüler için manyetik alınganlığın T_c civarındaki davranışı

Şekil 2.15. (a) ve (b)'de görüldüğü gibi manyetik alınganlık sonsuz örgüler için T_c 'de bir süreksizliğe sahipken, sonlu örgülerde maksimum bir değere sahip olmaktadır (31).

2.4. Statik Kritik Olay ve Statik Kritik Üsler

İkinci dereceden faz geçişi yapan bir sistem için, termodinamik niceliklerin T_c civarındaki davranışlarına kritik olay adı verilmektedir. Kritik sıcaklık ile, farklı uzay simetrisine sahip iki faz uzayı birbirinden ayrılmaktadır. Kritik sıcaklığın üzerinde, sistem dönme simetrisine sahiptir ve kendiliğinden mıknatıslanma sıfırdır. Kritik sıcaklığın altında ise, kendiliğinden mıknatıslanma sıfırdan farklıdır. Kendiliğinden mıknatıslanma vektörünün uzayda tercihli bir doğrultuda olması, dönme simetrisini bozmaktadır. Kritik noktadaki süreksizlik nedeniyle, farklı simetri özelliklerinden kaynaklanan iki faz, termodinamik niceliklere karşılık gelen fonksiyonlarla tanımlanmaktadır. Simetrisi bozulan düşük sıcaklık fazını tanımlayan parametre, "düzen parametresi" olarak adlandırılmaktadır ve " M " ile simgelenmektedir. Ferromanyetizma için M kendiliğinden mıknatıslanma vektörüdür. Kritik noktada termodinamik niceliklerin süreksizliklerini farklı kritik üsler tanımlamaktadır. Dış manyetik alanın sıfır olduğu durumda $\alpha, \beta, \gamma, \eta, \mu, \nu$ kritik üsleri vardır (16,28).

2.4.1. Kendiliğinden mıknatıslanma (manyetizasyon) (M), manyetik alınganlık (χ) ve özısı (C) nın sıcaklığa bağımlılığı

Kritik olay, indirgenmiş sıcaklık ε 'a bağlı olarak incelenir. $\varepsilon \rightarrow 0$ limitinde, termodinamik nicelikler; sonlu, düzenli ve ıraksayan bir kısma ayrılabilir. Singüler kısımların genellikle sıcaklığın kesirli bir kuvveti ile orantılı olarak değiştiği kabul edilir.

$$\varepsilon = \frac{T_c - T}{T_c} \quad [2.13]$$

Dış manyetik alanın olmadığı durumlarda kendiliğinden mıknatıslanma (M); T_c 'de sıfır, T_c 'nin altında sıcaklığın azalan bir fonksiyonu ve kritiğe çok yakın sıcaklıklarda "Eş. 2.14" ve "Eş. 2.15"de olduğu gibi basit kuvvet yasasına uygun davranır.

$$M(0, T) \approx \varepsilon^{\beta'} \quad \varepsilon \rightarrow 0^+ \quad [2.14]$$

$$M(0, T) \approx (-\varepsilon)^{\beta} \quad \varepsilon \rightarrow 0^- \quad [2.15]$$

β, β' kendiliğinden mıknatıslanmaların kritik üsleridir ve $\beta = \beta'$ 'dür.

Kritik sıcaklık T_c yakınlarında manyetik alan da ıraksamaktadır. Manyetik alınganlığın T_c 'deki davranışını γ, γ' kritik üsleri sergilemektedir ve $\gamma = \gamma'$ 'dür.

$$kT\chi(0, T) \approx \varepsilon^{-\gamma} \quad \varepsilon \rightarrow 0^+ \quad [2.16]$$

$$\chi(0, T) \approx (-\varepsilon)^{\gamma'} \quad \varepsilon \rightarrow 0^- \quad [2.17]$$

Ayrıca C özısı da kritik noktada singüler davranış göstermektedir. α, α' özısının kritik üsleri ve $\alpha = \alpha'$ 'dür.

$$C(0, T) \approx \varepsilon^{-\alpha} + b^+ \quad \varepsilon \rightarrow 0^+ \quad [2.18]$$

$$C(0, T) \approx (-\varepsilon)^{\alpha'} + b^- \quad \varepsilon \rightarrow 0^- \quad [2.19]$$

Burada $b^{\pm}$ özısının düzeltme terimleridir. Buraya kadar verilen tanımlamalar,

kritik sıcaklık T_c 'nin her iki yanında da aynı tipte singüler davranış sergilediği kabul edilerek yapılmıştır (16,28,30).



3. MODEL

3.1. Creutz Cellular Automaton Modeli ve Algoritması

Bu modelde, " n " ikili bit her bir örgü hücresi ile ilişkilendirilmektedir. Her bir hücre değeri bir önceki zaman adımındaki kendi değeri ve en yakın komşu değerleriyle tanımlanmaktadır. İlk ikili bit B_i Ising spin değişkenidir ve "0" veya "1" değerini alabilmektedir. $S_i = 2B_i - 1$ olmak üzere, J en yakın komşu çiftlenim katsayısı birimindeki H_I , örgünün Ising spin enerjisi "Eş. 3.1" de verilmektedir.

$$H_I = - \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad [3.1]$$

Son ikili bit de dama tahtası değişkeni (W_i) ne ait olur. Spine eşlenik momentum değişkenine karşılık gelen, $n-2$ "ikili bit" demonlara ayrılır. Bu değişken "0" ve "1" sınırlı değerlerini alabilmektedir. Bir spin değişiminde Ising enerji değişimi dH_I ,

$$N_i = \sum_k (B_i + B_k) \bmod 2 \quad [3.2]$$

$$dH_I = 4(2 - N_i) \quad [3.3]$$

olmak üzere dördün katları ile "Eş. 3.3" ile değişmektedir. Burada k alt indisi i hücrenin en yakın komşu hücreleri üzerinden toplamını göstermektedir. Kinetik enerji Ising enerji değişimine uygun olarak 4'ün katları olarak değiştiğinden, onun maksimum değeri $M = 4x(1 + 2^1 + \dots + 2^{(n-3)})$ 'dir. Burada spin değişimi deterministik bir "cellular automaton" kuralı ile gerçekleşmektedir. E_I , kinetik enerjinin alabileceği değerlere karşılık gelmek üzere, spin değişim kuralı, aşağıdaki şekilde verilmektedir.

$$q_i^t = E_i^t - 4(2 - N_i) \quad [3.4]$$

$$A_i^t = \lfloor -1 < q_i^t < M + 1 \rfloor_T \quad [3.5]$$

$$B_i^{t+1} = (B_i^t + (B_i^t W_i^t)) \bmod 2 \quad [3.6]$$

$$E_i^{t+1} = q_i^t A_i^t + E_i^t (1 - A_i^t) \quad [3.7]$$

$$W_i^{t+1} = 1 - W_i^t \quad [3.8]$$

"Eş. 3.5" de, $\lfloor \rfloor_T$ işlemi eğer kontrol doğru ise 1, yanlış ise 0'a eşittir. Burada W_i son "ikili bit" e karşılık gelen değişkendir. Bu algorithmadan açıkça görülebileceği gibi bir merkezi hücrenin spin değişkeninin bir sonraki zaman adımındaki değeri,

$$B_{i,j}^{t+1} = f(B_{i,j}^t B_{i,j-1}^t B_{i,j+1}^t B_{i-1,j}^t B_{i+1,j}^t, E_{i,j}^t W_{i,j}^t) \quad [3.9]$$

Şeklinde deterministik bir Cellular Automaton kuralı ile elde edilmektedir. Bu kural tersinir bir Cellular Automaton kuralıdır. Eğer herhangi bir zaman adımında bütün örgünün W_i değişkenleri ters çevrilir, ve elde edilen bu konfigürasyon başlangıç konfigürasyonu olarak alınırsa, bu zaman adımından geriye doğru ardıl konfigürasyonları oluşturmak mümkün olmaktadır. Bu yüzden Creutz cellular automaton dengesindeki bir sistemin simülasyonunu yapmak için oldukça kullanışlı bir algoritmadır.

Bu model toplam enerjinin korunumu altında mikrokantoniktir. Ancak kinetik enerji ve iç enerji açısından kanonik bir davranış sergilemektedir (13). Yani simülasyon süresince bu enerjiler dalgalanmaktadır. Bu yüzden kinetik enerji değişkeninin değeri $T = 1/\beta$ sıcaklığına karşılık gelen Boltzmann ağırlıklı üstel

bir dağılıma uymaktadır;

$$P(E_i) \approx \exp(-4\beta E_i) \quad [3.10]$$

$H_K = 4x \sum_i E_D^i$ ve $E_D^i = D_{1,i} + 2^1 D_{2,i} + \dots + 2^{(n-3)} D_{n-2,i}$ 'dir. Burada $n-2$ kaç ikili

demon kullanıldığını belirtir. Bu dağılıma uygun olarak kinetik enerjinin beklenen değeri aşağıdaki şekilde ifade edilmektedir.

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

"Eş. 3.11" deki toplamda verilen üst sınır değeri $N = \sum_{i=1}^{n-2} 2^{i-1}$ demon enerjisinin alabileceği maksimum değerdir. Bu durumda, E_i 'nin beklenen değeri ölçülen sistem sıcaklığının ortalama değerini verir. Bu çalışmada E_i 'nin beklenen değeri göz başına ve zaman başına hesaplandığında, yukarıdaki ifade kullanılarak $T = 1/\beta$ eşitliğinden sıcaklık değerleri belirlenebilmektedir (8,16,32).

3.2. Sekiz Boyutlu Ising Model İçin Creutz Cellular Automaton Modeli

Bu modelde her bir hücreye altı ikili "bit" karşılık getirilmekte ve bir hücredeki bir değişkenin alacağı değer o değişkenin bir önceki zaman adımındaki kendi değeri ile ona en yakın komşularındaki değerlerinden elde edilmektedir. Bu altı ikili "bit" den ilki, B_i Ising spini içindir; "0" veya "1" değerlerini alabilir. $S_i = 2B_i - 1$ olmak üzere, örgünün Ising spin enerjisi H_I (iç enerji, potansiyel enerji) (en yakın komşu etkileşme sabiti J cinsinden) aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır.

$$H_I = -\sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad [3.12]$$

Burada $\langle ij \rangle$ bütün en yakın komşu hücre çiftleri üzerinden toplamı göstermektedir. Kalan beş bitten dördü "demon" veya spine eşlik eden momentuma karşı gelmektedir. D_1, D_2, D_3, D_4 ile gösterilen bu bitler "0" veya "1" değerlerini alabilmekte ve $(2^0 x D_1 + 2^1 x D_2 + 2^2 x D_3 + 2^3 x D_4)$ ifadesine göre (0,15) aralığındaki tamsayıları oluşturmaktadır. Momentum değişkenine karşılık gelen kinetik enerji E_K bu tam sayı değerlerinin dört katını almaktadır ve maksimum 60 değerini alabilmektedir.

$$E_K = 4x(2^0 x D_1 + 2^1 x D_2 + 2^2 x D_3 + 2^3 x D_4) \quad [3.13]$$

Kinetik enerji bu değerleri aldığı anda, bir spin değişiminde Ising enerjisinde oluşan ve değerleri 4'ün katları olan enerji değişimi karşılanabilmektedir. Bu sırada, örgünün toplam enerjisi $H = H_I + H_K$ korunmaktadır. H_K örgünün toplam kinetik enerjisidir, yani E_D^i , i.nci örgü gözüne ait "demon"un enerjisi olmak üzere $H_K = 4 \sum_i E_D^i$ dir. Verilen bir toplam enerji için sistemin sıcaklığı, T , (J/k_B biriminde; burada k_B Boltzmann sabitidir) bir "demon"un kinetik enerjisinin ortalama değerinden elde edilir.

$$\langle E_K \rangle = \sum_{n=0}^{15} 4ne^{-4n\beta} / \sum_{n=0}^{15} e^{-4n\beta} \quad [3.14]$$

$$T = 1/\beta \quad [3.15]$$

Altıncı bit "cellular automaton"ın zamanla dama tahtası düzeninde gelişimini sağlamakta ve böylece Ising modelinin "cellular automaton" ile simülasyonunu mümkün kılmaktadır. Her bir zaman adımında dama tahtasının siyah hücrelerine kural uygulanıp rengi beyaza çevrilir; beyaz hücrelerin ise sadece rengi siyaha çevrilir. Rengi beyaza çevrilen siyah hücrelerin spini ters çevrilerek Ising enerjisindeki enerji değişimi hesaplanır.

Eğer enerji değişimi bu hücrenin momentum değişkenine aktarılabilir veya momentum değişkeninden alınabilecek bir değer ise, toplam enerji korunmak üzere spin ters çevrilir. Buna uygun olarak momentum değiştirilir, aksi halde spin ve momentum değiştirilmez. Bu işlem örgüdeki bütün siyah hücrelere aynı zaman adımıyla uygulanmakta ve gelişim süresince periyodik sınır şartı kullanılmaktadır. Başlangıçta sistemin bütün spinleri aşağı veya yukarı yönde alınabilir. İlk kinetik enerji beyaz hücrelerdeki demonun "bit"leri vasıtasıyla örgüye rasgele verilir; bu çalışmada ikinci ve dördüncü "bit"ler vasıtasıyla verilmektedir (21).

Simülasyonlar periyodik sınır şartlı lineer boyutu $L=4$ olan sekiz boyutlu Ising model 4^8 basit hiperkübik örgü için başarılmıştır. Bu örgüde her bir toplam enerji için 3 bağımsız simülasyon yapılmıştır. Her bir bağımsız simülasyonda bu örgü için 60 000, 120 000 ve 180 000 zaman adımıyla örgünün bütün spinlerine ters çevirme kuralı uygulanmıştır.

3.2.1 Sekiz boyutlu Ising modelin Creutz cellular automaton'da demon enerjisi ve kinetik enerji hesabı

Demon enerjisi demonun bit sayısına göre hesaplanır. Bu çalışmada 4 ikili bit demon enerji hesabında kullanılmaktadır. 4 ikili bit için E_D demon enerjisi "Eş. 3.16"dan hesaplanır.

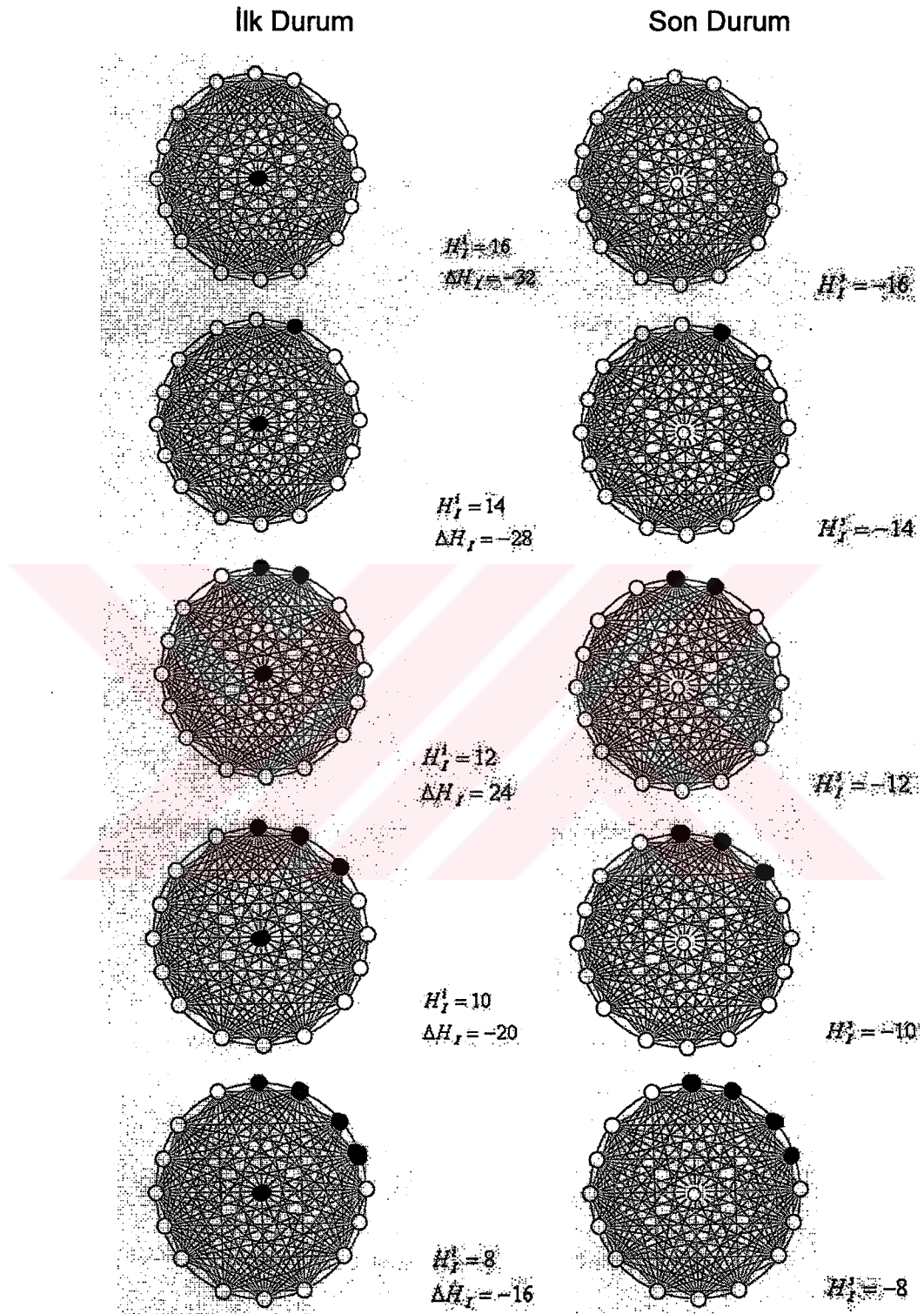
$$E_D = 2^0 x D_1 + 2^1 x D_2 + 2^2 x D_3 + 2^3 x D_4 \quad [3.16]$$

Burada D_1, D_2, D_3, D_4 ile gösterilen bu bitler "0" veya "1" değerlerini alabilmektedir. E_K kinetik enerji değeri "Eş. 3.13"den hesaplanmaktadır. E_D ve E_K enerji değerlerinin sayısı Çizelge 3.1.'de detaylı şekilde verilmektedir.

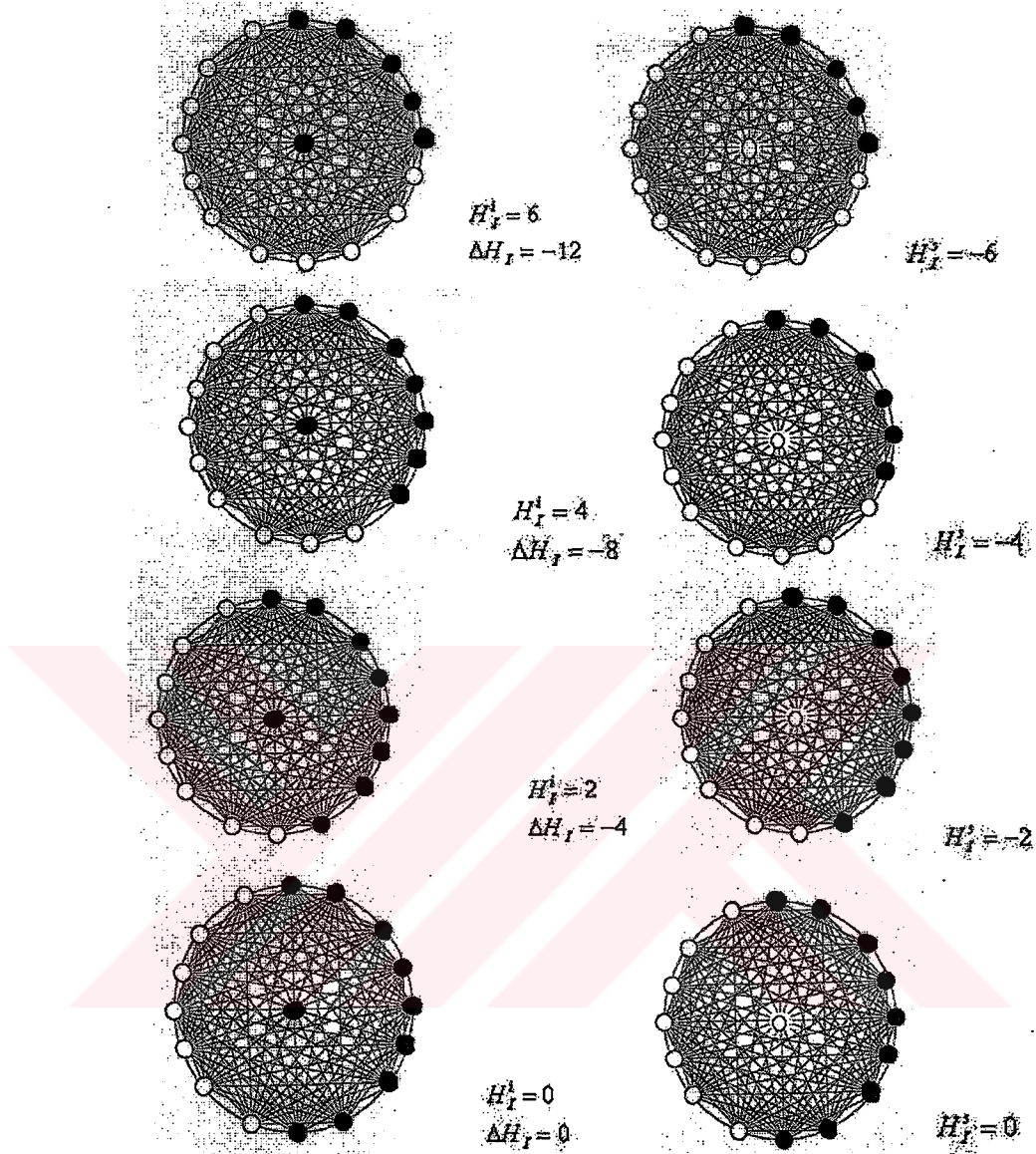
Çizelge 3.1. Dört bitli demonların alabileceği tamsayı değerleri, E_D ve E_K değerleri

D_4	D_3	D_2	D_1	E_D	E_K
0	0	0	0	0	0
0	0	0	1	1	4
0	0	1	0	2	8
0	0	1	1	3	12
0	1	0	0	4	16
0	1	0	1	5	20
0	1	1	0	6	24
0	1	1	1	7	28
1	0	0	0	8	32
1	0	0	1	9	36
1	0	1	0	10	40
1	0	1	1	11	44
1	1	0	0	12	48
1	1	0	1	13	52
1	1	1	0	14	56
1	1	1	1	15	60

Çizelge 3.1.'de demon 4 ikili bit'e sahip olduğunda (0,15) arasında tamsayı değerlerini almaktadır. Kinetik enerji de (4,60) arasında tamsayı değerlerini almaktadır. Hiperkübik örgülerde en yakın komşuluk sayısı koordinat sayısı ile ifade edilmektedir. Sekiz boyutlu hiperkübik örgüde 16 koordinat bulunmaktadır, böylelikle en yakın komşuluk sayısı 16'dır. Sekiz boyutlu Ising modelde bir spin ters çevrildiğinde Ising enerjisinde meydana gelen değişim Şekil 3.1.'de verilmektedir.



Şekil 3.1. Sekiz boyutlu hiperkübik örgüde spinlerin ters çevrilmesi durumunda, ΔH_I , Ising enerjisindeki değişimler



Şekil 3.1. "Devam" Sekiz boyutlu hiperkübik örgüde spinlerin ters çevrilmesi durumunda, ΔH_I , Ising enerjisindeki değişimler

Şekil 3.1.'de siyah noktalar spin durumunun aşağı yönlü (-1) olmasını, beyaz noktalar da spin durumunun yukarı yönlü (+1) olmasını ifade etmektedir. Şekil 3.1 incelendiğinde, ΔH_I , Ising enerjisindeki değişimin -32,-28,-24,-20,-16,-12,-8,-4,0,32,28,24,20,16,12,8,4 olacağı görülmektedir.

3.3. Creutz Cellular Automaton Ising Modelde Termodinamik Niceliklerin Hesabı

Elde edilen bu sıcaklık değerlerine karşılık gelen kendiliğinden M magnetizasyon, H_I iç enerji (Ising enerji) (en yakın komşu etkileşme sabiti J biriminde), χ magnetik alınganlık ve C özısı (k_B Boltzmann sabiti biriminde), yukarıda tanımlanan kural uygulanarak oluşturulan konfigürasyonlardan, aşağıda verilen ifadeler yardımıyla hesaplanmaktadır.

$$M = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i \quad [3.17]$$

$$H_I = -\frac{1}{2N} \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad [3.18]$$

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} = L^8 \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{kT} \quad [3.19]$$

$$\frac{C}{k} = \frac{\partial H_I}{\partial T} = L^8 \frac{\langle H_I^2 \rangle - \langle H_I \rangle^2}{(kT)^2} \quad [3.20]$$

"Eş.3.17" ve "Eş. 3.18" de $N = 4^8$, örgüdeki hücre sayısıdır, ve $\langle \rangle$ zaman üzerinden ortalamaya karşılık gelmektedir. Burada M , H_I hücre başına ortalama değere ve H düzenli bir dış alana karşılık gelmektedir. Ising hamiltoniyende, düzenli bir dış magnetik alanın varlığında, alan-spin etkileşmesinin oluşturduğu $H \sum_{i=1}^N S_i$ şeklinde bir ek enerji terimi mevcuttur. Bu tez çalışmasında, dış manyetik alanı (H) nın olmadığı durum ele alındı.

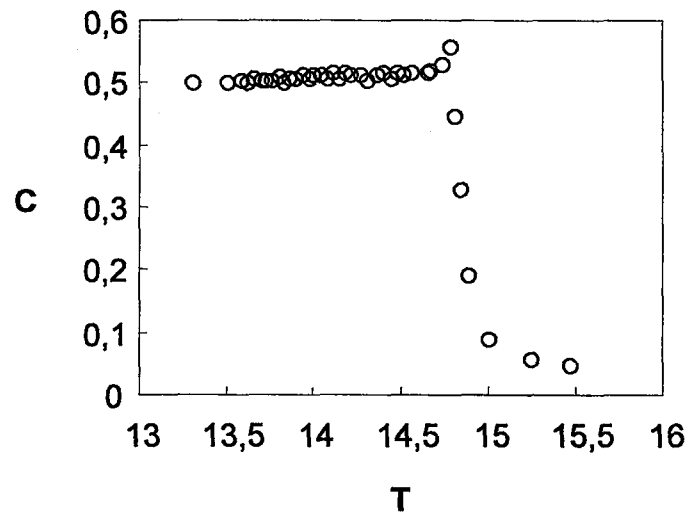
4. SONUÇLAR

4.1. Termodinamik Niceliklerin Sıcaklıkla Değişimi

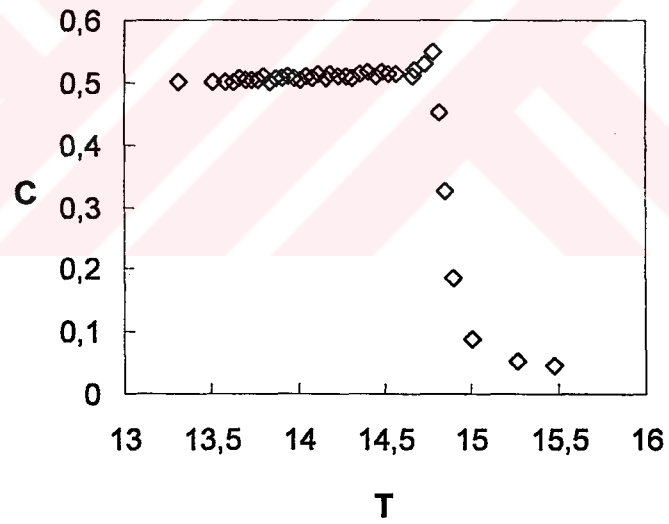
Doğrusal boyutu $L=4$ olan sonlu örgü için sekiz boyutlu basit hiperhübk örgülü Ising model, 60 000, 120 000 ve 180 000 zaman adımlarında her zaman adımı için üç ayrı set oluşturularak Creutz cellular automaton ile simüle edildi. Simülasyon sonucunda termodinamik niceliklerden; sıcaklık, özısı, düzen parametresi (kendiliğinden mıknatıslanma) ve manyetik alınganlık değerleri hesaplandı. Her zaman adımı için çalıştırılan bu üç setten elde edilen termodinamik niceliklerin ortalaması alındı. Bu ortalama değerler ile; özısı, kendiliğinden mıknatıslanma ve manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişim eğrileri çizildi. Özısı ve manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişim eğrilerinden, $T_c^C(L)$ ve $T_c^Z(L)$ değerleri elde edildi ve elde edilen sonuçlar tartışıldı. Bu çalışmada; T sıcaklığı J/k_B biriminde, C özısı k_B biriminde, M kendiliğinden mıknatıslanması ve χ manyetik alınganlığı birimsiz alınmaktadır. Ayrıca ε indirgenmiş sıcaklığı da birimsizdir.

4.1.1. Özısının sıcaklıkla değişimi

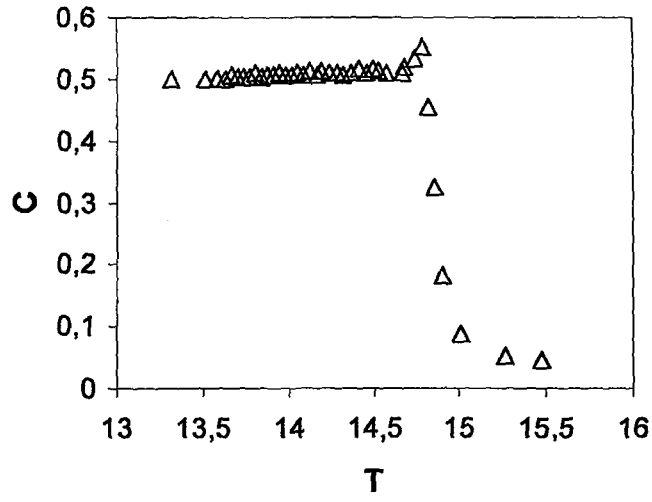
Simülasyon süresince iç enerji dalgalanmalarından yararlanarak, C özısının değeri bulundu. Sonsuz örgülerde T_c civarında süreksizlik sergileyen özısı, belli bir sıcaklıkta maksimum bir değer aldı. Özısının bu maksimum değerini aldığı T_c sıcaklığı, simülasyon sonucunda elde edilen verilerin ortalaması alınarak özısının sıcaklıkla değişim eğrilerinden bulundu. $L=4$ doğrusal boyutlu sonlu örgü için sekiz boyutlu basit hiperkübik örgülü Ising model için; 60 000, 120 000, 180 000 zaman adımlarındaki özısının sıcaklıkla değişim eğrileri Şekil 4.1.(a), (b) ve (c)'de verilmektedir. Ayrıca bu üç zaman adımıdaki davranışı Şekil 4.1.(d)'de verilmektedir. Bu eğrilerden elde edilen T_c değerleri Çizelge 4.1'de verilmektedir.



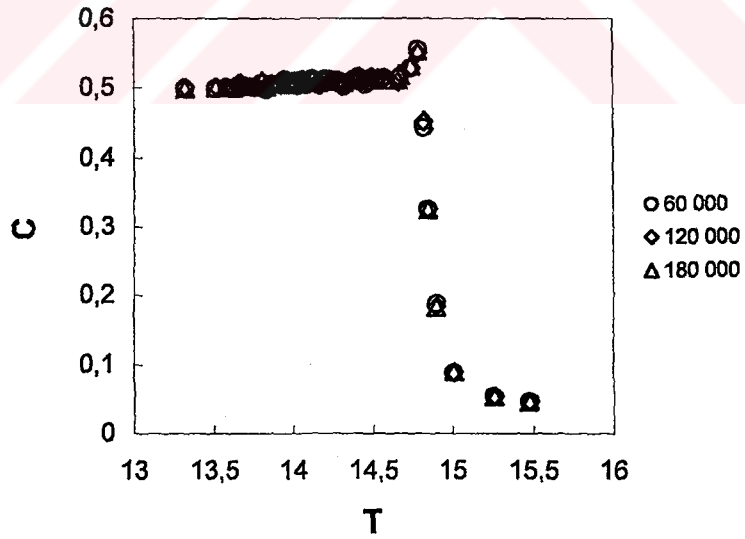
Şekil 4.1.(a) 60 000 zaman adımında özısının sıcaklıkla değişimi



Şekil 4.1.(b) 120 000 zaman adımında özısının sıcaklıkla değişimi



Şekil 4.1.(c) 180 000 zaman adımında özısının sıcaklıkla değişimi



Şekil 4.1.(d) 60 000, 120 000 ve 180 000 zaman adımlarında özısının sıcaklıkla değişimi

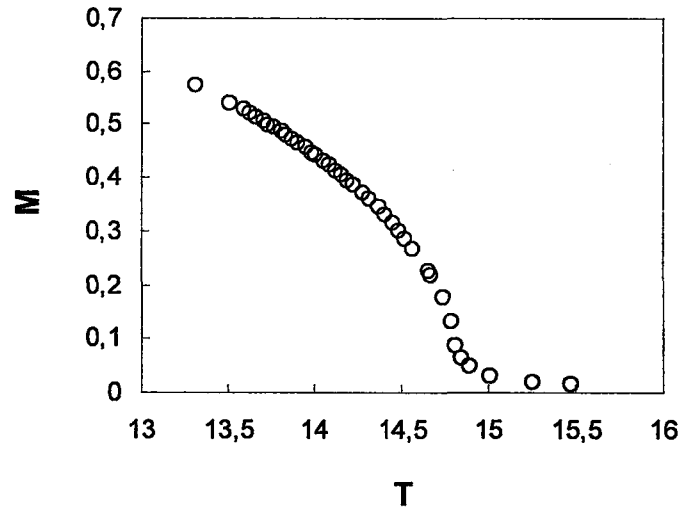
Çizelge 4.1. $L=4$ örgüsü için zaman adımıdaki artışa bağlı olarak $T_c^c(L)$ özısı kritik sıcaklığının değişimi

Zaman Adımı	$T_c^c(L)$
60 000	$14,7904 \pm 0,0004$
120 000	$14,7905 \pm 0,0009$
180 000	$14,7904 \pm 0,0004$

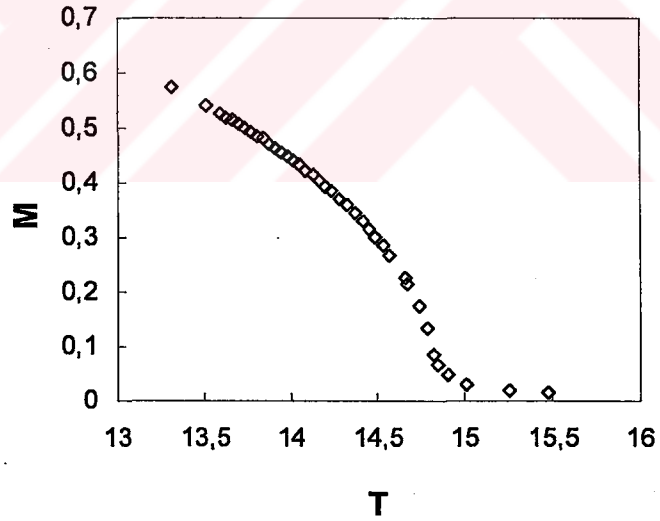
Çizelge 4.1 incelendiğinde, zaman adımı artıkça sonlu örgü T_c değerlerinin literatürdeki $T_c=14,898 \pm 0,010$ (21), $T_c=14,8911 \pm 0,0002$ (32) ve $T_c=14,892$ (33) değerlerine yaklaştığı görülmektedir. Bu durum, zaman adım sayısının artırılmasıyla gerçek kritik sıcaklık değerine daha yakın sonuçlar elde edileceğini göstermektedir.

4.1.2. Kendiliğinden mıknatıslanmanın sıcaklıkla değişimi

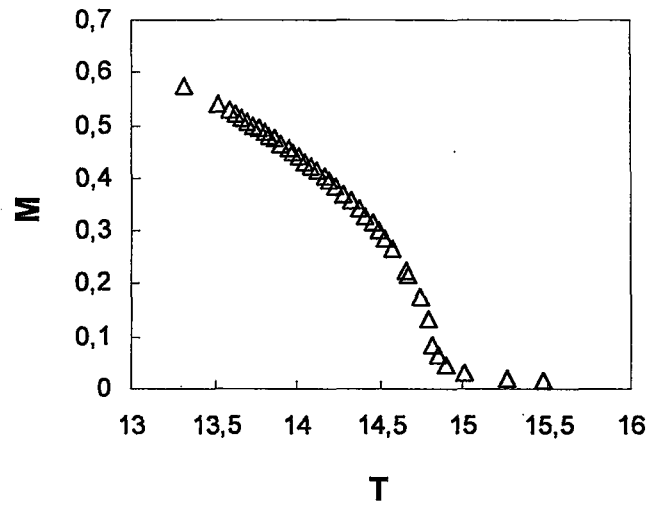
$L=4$ doğrusal boyutlu sonlu örgü için sekiz boyutlu basit hiperhübik örgülü Ising model için düzen parametresi (mıknatıslanma), (M) nin, 60 000, 120 000, 180 000 zaman adımlarındaki sıcaklıkla değişim grafikleri verildi. Bu grafikler, Şekil 4.5, Şekil 4.6, Şekil 4.7 ve Şekil 4.8'de verilmektedir.



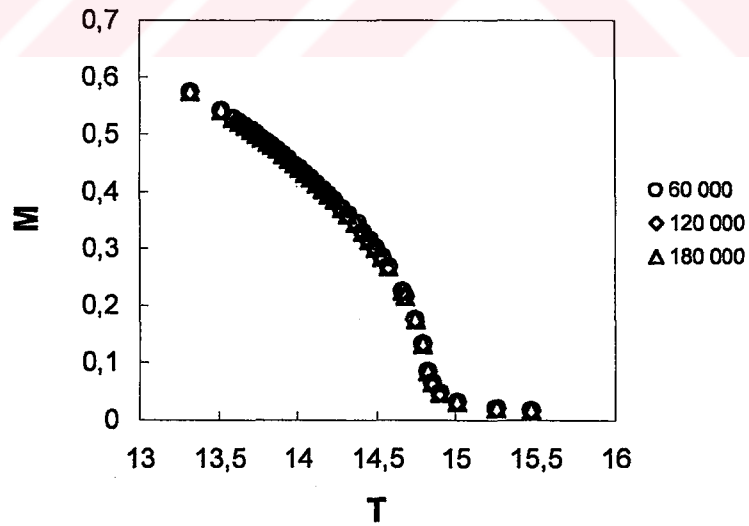
Şekil 4.2.(a) 60 000 zaman adımında düzen parametresinin sıcaklıkla değişimi



Şekil 4.2.(b) 120 000 zaman adımında düzen parametresinin sıcaklıkla değişimi



Şekil 4.2.(c) 180 000 zaman adımında düzen parametresinin sıcaklıkla değişimi



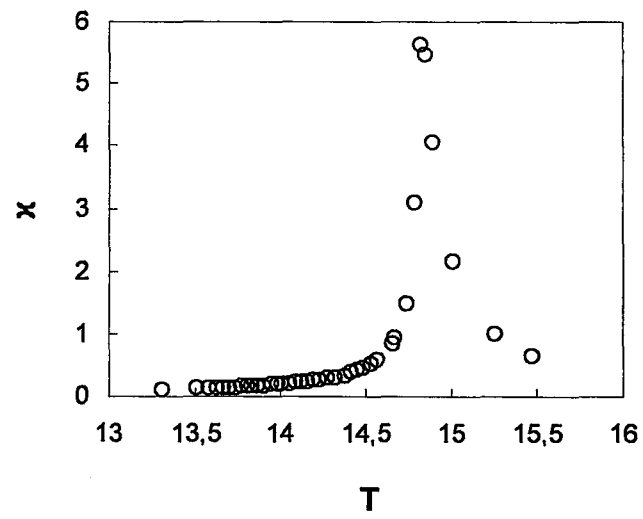
Şekil 4.2.(d) 60 000, 120 000 ve 180 000 zaman adımında düzen parametresinin sıcaklıkla değişimi

Sonsuz örgü kritik sıcaklık değerinde sıfır olan mıknatıslanmanın değeri,

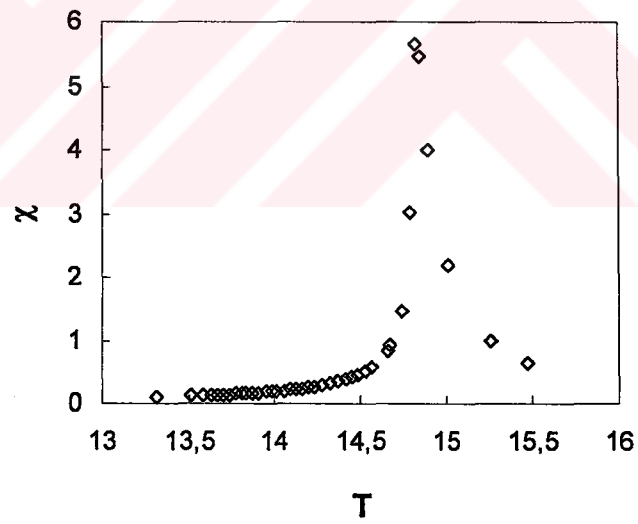
sonlu örgülerde belli bir sıcaklık değerinden itibaren sıfıra yaklaşmaktadır.

4.1.3. Manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişimi

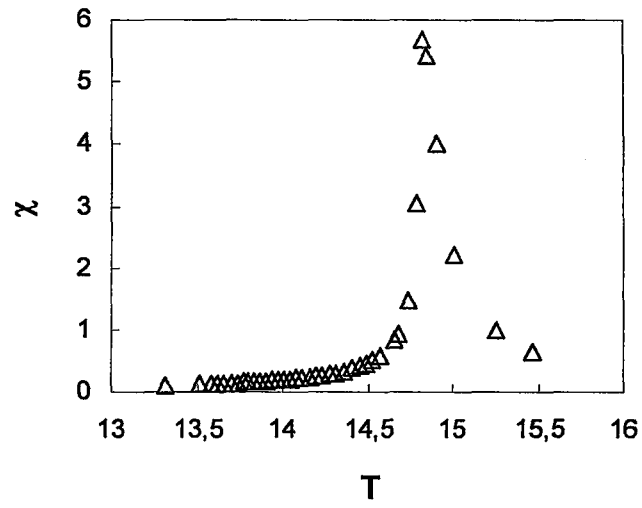
Doğrusal boyutu $L=4$ olan sonlu örgü için, sekiz boyutlu basit hiperhübik örgülü Ising model için 60 000, 120 000 ve 180 000 zaman adımında simülasyonu süresince düzen parametrelerinin dalgalanmalarından yararlanarak χ manyetik alınganlığının değeri bulundu. Sonsuz örgüde T_c de süreksizlik sergileyen manyetik alınganlık, sonlu örgüler için bir maksimuma sahip oldu. $T_c^x(4)$ manyetik alınganlığın maksimum olduğu sıcaklık değerlerinde her zaman adımı için üç ayrı set oluşturularak, simülasyon sonucunda elde edilen verilerin ortalaması alınarak manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişim eğrileri bulundu. Bu zaman adımlarındaki manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişimi eğrileri Şekil 4.3.(a), (b) ve (c)'de verilmektedir. Ayrıca bu üç zaman adımındaki davranışı Şekil 4.3.(d)'de verilmektedir. Bu eğrilerden elde edilen T_c sıcaklık değerleri de Çizelge 4.1'de verilmektedir.



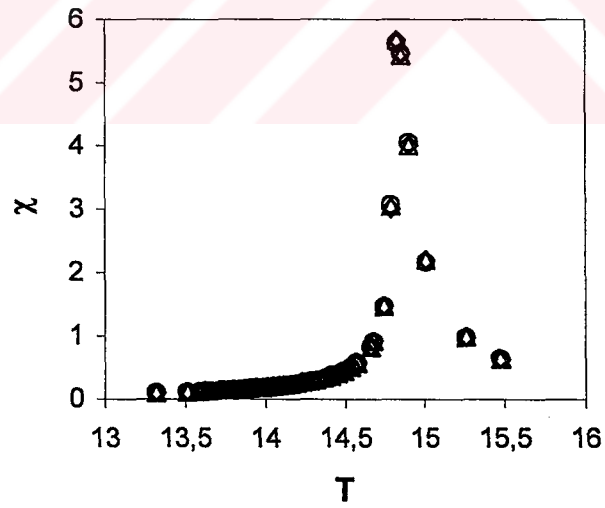
Şekil 4.3.(a) 60 000 zaman adımında manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişimi



Şekil 4.3.(b) 120 000 zaman adımında manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişimi



Şekil 4.3.(c) 180 000 zaman adımında manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişimi



Şekil 4.3.(d) 60 000, 120 000 ve 180 000 zaman adımlarında manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişimi

Çizelge 4.2. $L=4$ örgüsü için zaman adımındaki artışa bağlı olarak manyetik alınganlık kritik sıcaklığının değişimi

Zaman Adımı	$T_c^z(L)$
60 000	$14,8240 \pm 0,0028$
120 000	$14,8252 \pm 0,0011$
180 000	$14,8253 \pm 0,0005$

Çizelge 4.2 incelendiğinde, zaman adım sayısı artıkça, sonlu örgü kritik sıcaklık değerlerinin literatürdeki $T_c=14,898 \pm 0,010$ (21), $T_c=14,8911 \pm 0,0002$ (32) ve $T_c=14,892$ (33) değerlerine yaklaştığı görülmektedir. Bu durum, zaman adım sayısının artırılmasıyla gerçek kritik sıcaklık değerine daha yakın sonuçlar elde edileceğini göstermektedir.

4.2. β , β' , γ , γ' Statik Kritik Üslerin Hesabı

Sekiz boyutlu Ising model için Şekil 4.3. (a), (b), (c) ve (d)'de görüldüğü gibi, manyetik alınganlığın maksimumları özısının kilere göre daha sivri ve daha yüksek olduğundan $T_c^z(L)$ değerleri, elde edilen $T_c^c(L)$ değerlerinden daha hassas olacaktır. Bu nedenle; kritik sıcaklık değeri olarak manyetik alınganlıkların kritik sıcaklık değerleri. statik kritik üslerin bulunmasında kullanıldı.

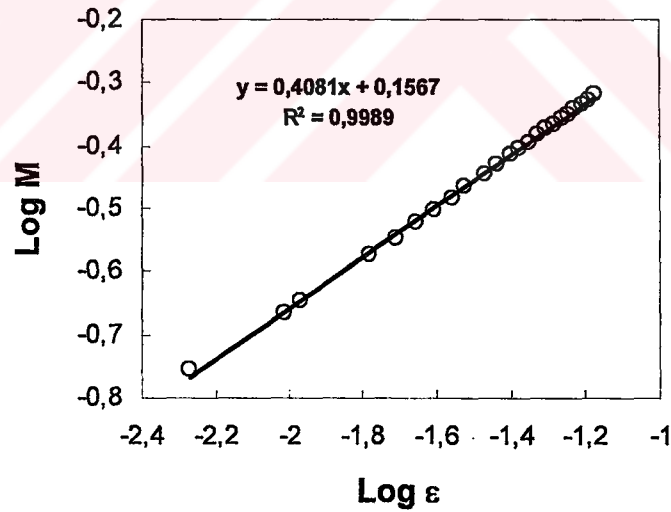
4.2.1. Kendiliğinden mıknatıslanma β , β' kritik üsleri

Kendiliğinden mıknatıslanma kritik üssü üç farklı şekilde hesaplanabilmektedir (14). Bu çalışmada; β , β' , renormalizasyon grup teorisine göre sonsuz örgünün düzen parametresinin sıcaklığa bağlı ifadesini veren basit kuvvet yasası Eş. 4.1 ve düzeltmeli kuvvet yasası Eş. 4.2 ile fit edilerek hesaplandı.

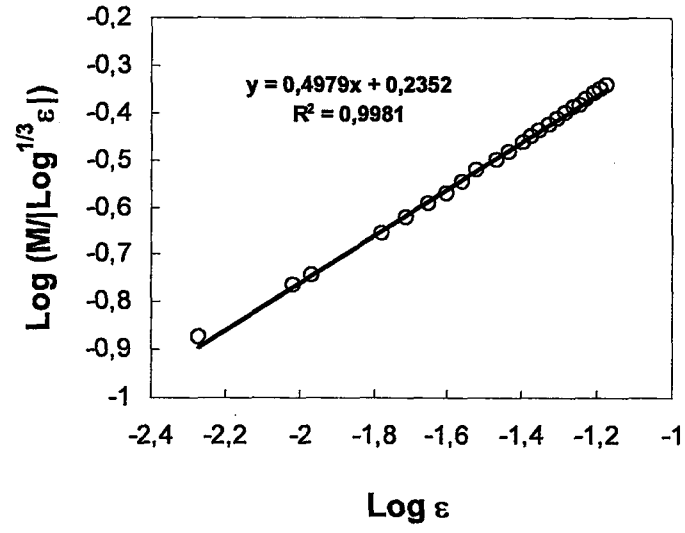
$$M \propto \varepsilon^{\beta'} \quad T < T_c \quad [4.1]$$

$$M \propto \varepsilon^{\beta} |\text{Log}^{1/3} \varepsilon| \quad T < T_c \quad [4.2]$$

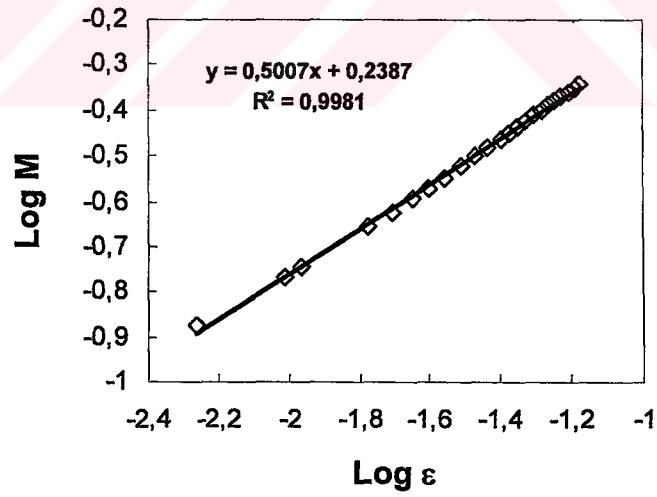
Kendiliğinden mıknatıslanma kritik üssü β' , her zaman adımı üç ayrı sette simüle edilerek, 60 000, 120 000 ve 180 000 zaman adımlarında $T < T_c$ için $\varepsilon \geq 0,005$ ve $13,8351 \leq T \leq 14,7442$ aralığındaki M ile ε verileri kullanılarak basit kuvvet yasasıyla fit edilerek elde edildi. Aynı zaman adımlarında, $T < T_c$ için $\varepsilon \geq 0,005$ ve $13,8351 \leq T \leq 14,7442$ aralığındaki M ile ε verileri verileri kullanılarak β kritik üssü de aynı zaman adımlarında düzeltmeli kuvvet yasası ile fit edilerek elde edildi.



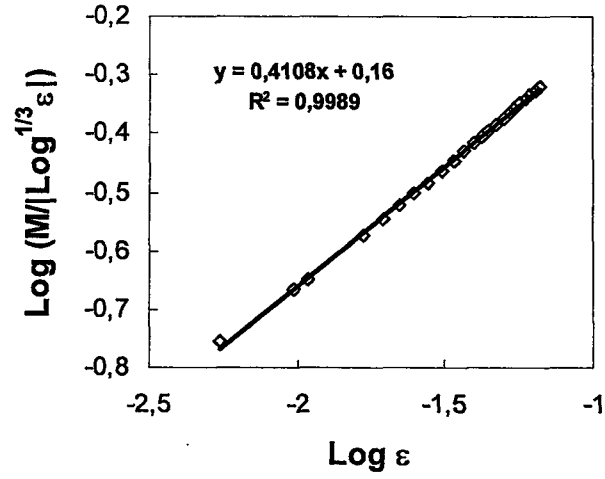
Şekil 4.4.(a) $T < T_c$ için, 60 000 zaman adımı için LogM – Logε'a göre değişimi



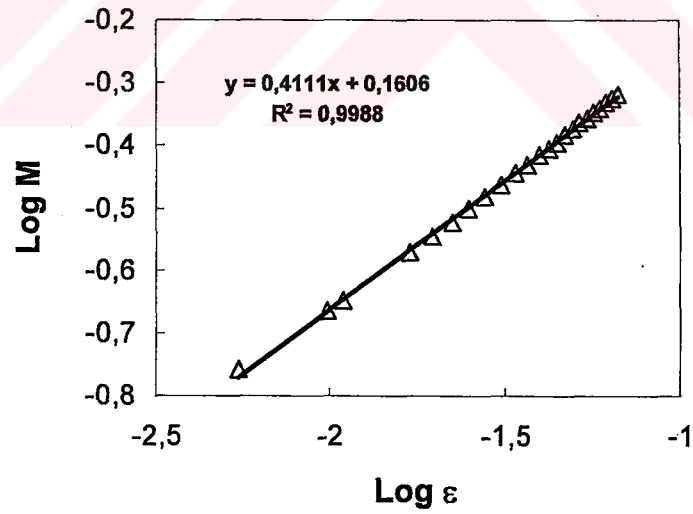
Şekil 4.4.(b) $T < T_c$ için, 60 000 zaman adımı için $\text{Log}(M/\text{Log}^{1/3} \epsilon) - \text{Log} \epsilon$ 'a göre değişimi



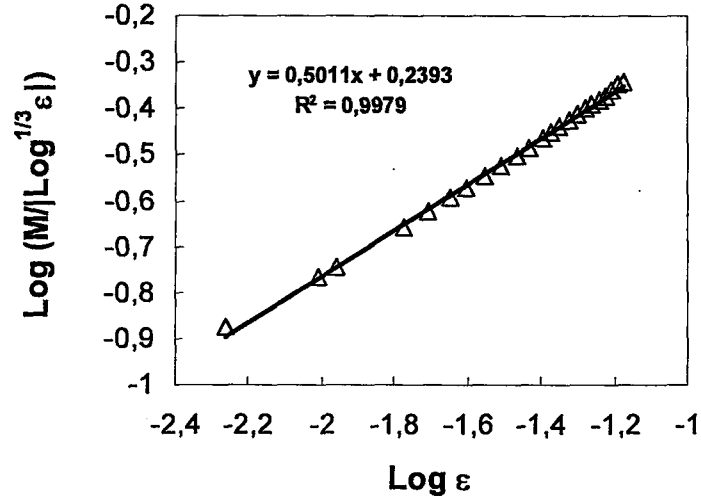
Şekil 4.5.(a) $T < T_c$ için, 120 000 zaman adımı için $\text{Log} M - \text{Log} \epsilon$ 'a göre değişimi



Şekil 4.5.(b) $T < T_c$ için, 120 000 zaman adımı için $\text{Log}(M/|\text{Log}^{1/3} \epsilon|) - \text{Log} \epsilon$ 'a göre değişimi



Şekil 4.6.(a) $T < T_c$ için, 180 000 zaman adımı için $\text{Log} M - \text{Log} \epsilon$ 'a göre değişimi



Şekil 4.6.(b) $T < T_c$ için, 180 000 zaman adımı için $\text{Log}(M/\text{Log}^{1/3} \epsilon) - \text{Log} \epsilon$ 'a göre değişimi

Şekil 4.4.(a) ve (b), Şekil 4.5.(a) ve (b), Şekil 4.6.(a) ve(b) fit eğrilerinden yararlanarak β , β' kendiliğinden mıknatıslanma statik kritik üs değerleri hesaplandı. Bu değerler Çizelge 4.3'de verilmektedir.

Çizelge 4.3. 60 000, 120 000 ve 180 000 zaman adımlarında $T < T_c$ için düzen parametresi kritik üsleri

Zaman adım sayısı	β	β'
60 000	0,4979	0,4081
120 000	0,5007	0,4108
180 000	0,5011	0,4111

Simülasyonda, zaman adım sayısının artırılmasıyla elde edilen β , β' değerleri, renormalizasyon grup tahmini ($\beta = \beta' = 0,5$) ve literatürdeki diğer teorik ($\beta = \beta' = 0,48$ (21)) değerlerine yaklaşmaktadır. Bu durum; zaman adım sayısının artırılmasıyla, gerçek kritik üs değerine daha yakın sonuçlar elde edileceğini göstermektedir.

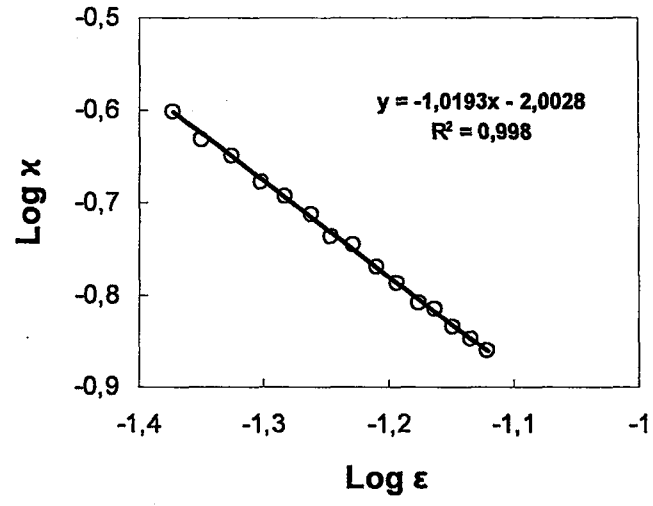
4.2.2. Manyetik alınganlık γ ve γ' kritik üsleri

Manyetik alınganlık kritik üsleri, üç farklı şekilde hesaplanabilmektedir (14). Bu çalışmada; γ ve γ' , renormalizasyon grup tahminine göre sonsuz örgünün manyetik alınganlığının sıcaklığa bağlı ifadesini veren basit kuvvet yasası, "Eş. 4.3", ve düzeltmeli kuvvet yasası, "Eş. 4.4", ile hesaplandı.

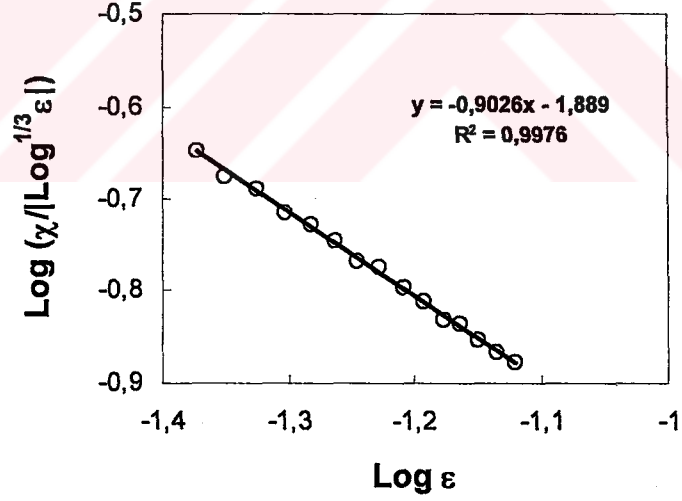
$$\chi \propto \varepsilon^{-\gamma'} \quad T < T_c \quad [4.3]$$

$$\chi \propto \varepsilon^{-\gamma} |\text{Log}^{1/3} \varepsilon| \quad T < T_c \quad [4.4]$$

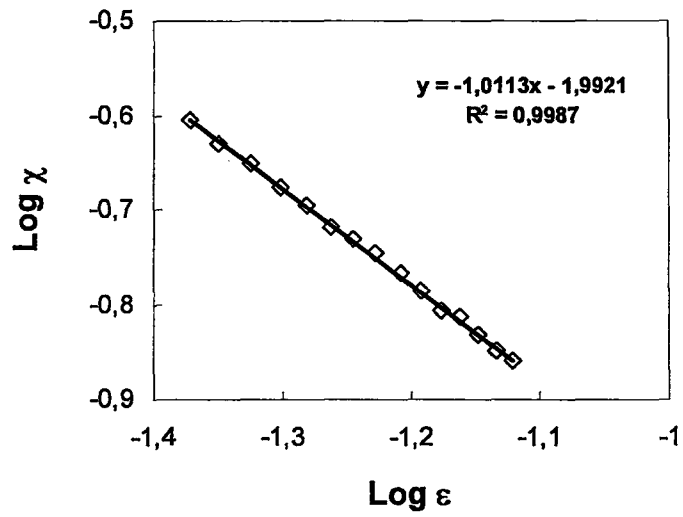
Manyetik alınganlık kritik üslerinden γ' , her zaman adımı üç ayrı sette simüle edilerek ve $\varepsilon \geq 0,035$ ve $13,6642 \leq T \leq 14,2800$ aralığındaki χ ile ε verileri kullanılarak; 60 000, 120 000 ve 180 000 zaman adımlarındaki $T < T_c$ için basit kuvvet yasasıyla fit edilerek elde edildi. Aynı zaman adımlarında, $T < T_c$ için $13,6642 \leq T \leq 14,2800$ aralığındaki χ ile ε verileri kullanılarak γ kritik üssü de aynı zaman adımlarında düzeltmeli kuvvet yasası ile fit edilerek elde edildi.



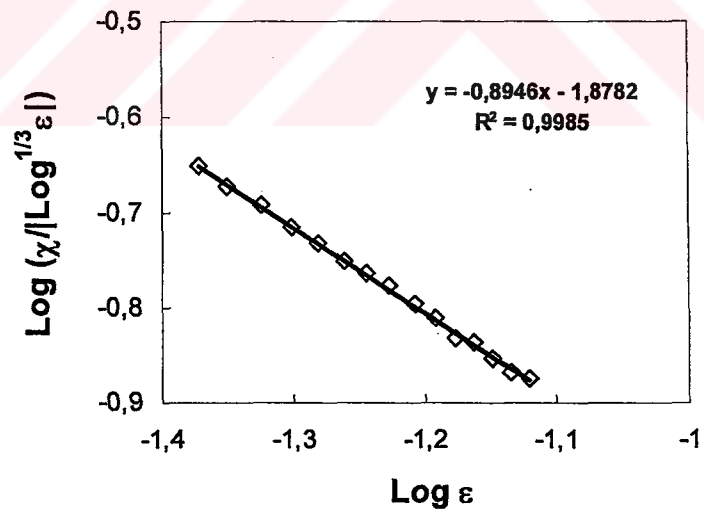
Şekil 4.7.(a) $T < T_c$ için, 60 000 zaman adımı için $\text{Log } x - \text{Log } \varepsilon$ 'a göre değişimi



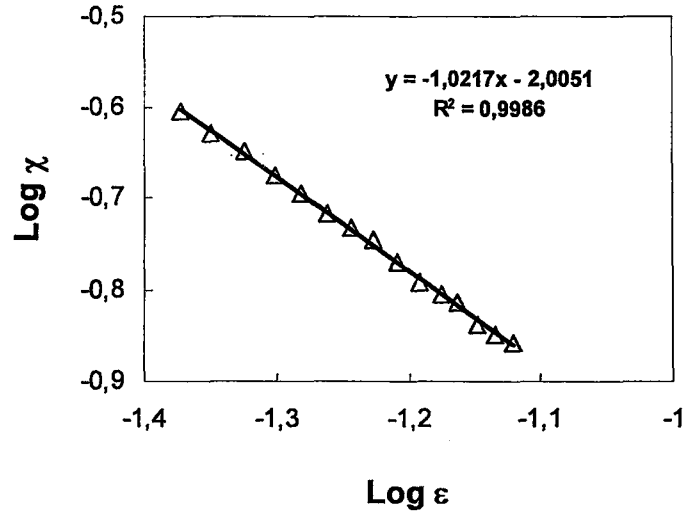
Şekil 4.7.(b) $T < T_c$ için, 60 000 zaman adımı için $\text{Log}(x/|\text{Log}^{1/3} \varepsilon|) - \text{Log } \varepsilon$ 'a göre değişimi



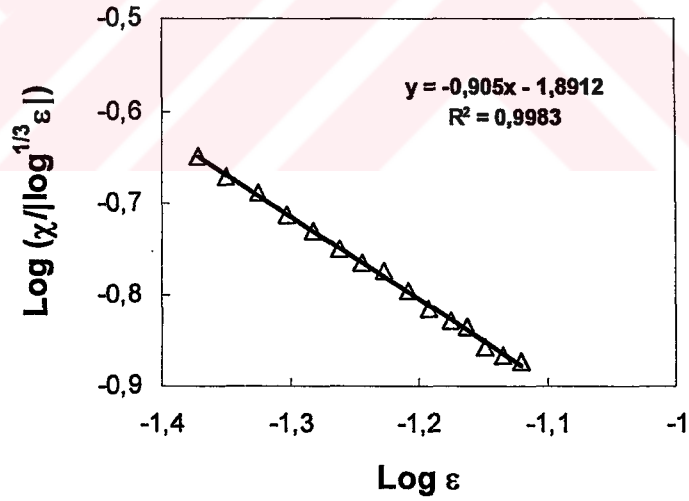
Şekil 4.8.(a) $T < T_c$ için, 120 000 zaman adımı için $\text{Log } \chi - \text{Log } \epsilon$ 'a göre değişimi



Şekil 4.8.(b) $T < T_c$ için, 120 000 zaman adımı için $\text{Log}(\chi/|\text{Log}^{1/3} \epsilon|) - \text{Log } \epsilon$ 'a göre değişimi



Şekil 4.9.(a) $T < T_c$ için, 180 000 zaman adımı için $\text{Log } \chi - \text{Log } \varepsilon$ 'a göre değişimi



Şekil 4.9.(b) $T < T_c$ için, 180 000 zaman adımı için $\text{Log}(\chi / |\log^{1/3} \varepsilon|) - \text{Log } \varepsilon$ 'a göre değişimi

Şekil 4.7.(a) ve (b), Şekil 4.8.(a) ve (b), Şekil 4.9.(a) ve(b) fit eğrilerinden yararlanarak γ, γ' manyetik alınganlık statik kritik üs değerleri hesaplandı. Bu değerler, Çizelge 4.4'de verilmektedir.

Çizelge 4.4. 60 000, 120 000 ve 180 000 zaman adımlarında $T < T_c$ için manyetik alınganlık kritik üsleri

Zaman adım sayısı	γ	γ'
60 000	0,9026	1,0193
120 000	0,8946	1,0113
180 000	0,9050	1,0217

Elde edilen γ ve γ' değerleri, zaman adımı arttıkça renormalizasyon grup tahmini ($\gamma = \gamma' = 1$) ve literatürdeki diğer teorik ($\gamma = \gamma' = 1,05$ (21)) değerlerine yaklaşmaktadır. Bu durum, zaman adım sayısının artırılmasıyla gerçek kritik üs değerine daha yakın sonuçlar elde edileceğini göstermektedir.

5. TARTIŞMA

Bu çalışmada, sekiz boyutlu Ising modelinin, doğrusal boyutu $L=4$ olan periyodik sınır şartlı basit hiperkübik örgülerde ve sonsuz örgü kritik sıcaklığı yakınında dört bitli demonlar kullanarak Creutz "cellular automaton"da simülasyonu yapıldı. Simülasyonlar, 60 000, 120 000 ve 180 000 zaman adımlarında ve her zaman adımı için üç ayrı set oluşturularak yapıldı. Simülasyon sonucunda termodinamik niceliklerden; sıcaklık, özısı, düzen parametresi (kendiliğinden mıknatıslanma) ve manyetik alınganlık değerleri hesaplandı. Her zaman adımı için çalıştırılan bu üç setten elde edilen termodinamik niceliklerin ortalaması alındı. Bu ortalama değerler ile; özısı, kendiliğinden mıknatıslanma ve manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişim eğrileri çizildi.

Mıknatıslanmanın sıcaklıkla değişim eğrisinden; sonsuz örgü kritik sıcaklık değerinde sıfır olan mıknatıslanmanın, sonlu örgülerde belli bir sıcaklık değerinden itibaren sıfıra yaklaştığı görülmektedir. Bu durum, mıknatıslanmanın kritik noktadaki davranışını ortaya koymaktadır. Özısı ve manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişim eğrileri, kritik noktada beklenen davranışlarını göstermiştir. Özısı ve manyetik alınganlık; sonsuz örgülerde T_c noktasında bir süreksizliğe sahipken, sonlu örgülerde bu T_c noktasında maksimum bir değere sahiptirler. Özısı ve manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişim eğrilerinden, $T_c^C(L)$ ve $T_c^Z(L)$ değerleri elde edildi. Elde edilen bu kritik sıcaklık değerleri Çizelge 4.1 ve 4.2'de verilmektedir. Çizelge 4.1 ve 4.2 incelendiğinde, zaman adımı artıkcı sonlu örgü T_c değerlerinin literatürdeki $T_c=14,898\pm0,010$ (21), $T_c=14,8911\pm0,0002$ (32) ve $T_c=14,892$ (33) değerlerine yaklaştığı görülmektedir. Bu durum, zaman adım sayısının artırılmasıyla gerçek kritik sıcaklık değerine daha yakın sonuçlar elde edileceğini göstermektedir.

Manyetik alınganlığın maksimumları özısının maksimlarına göre daha belirgin olduğundan; $T_c^Z(L)$ değerleri, elde edilen $T_c^C(L)$ değerlerinden daha hassas olacaktır. Bu nedenle; kritik sıcaklık değeri olarak manyetik alınganlıkların kritik sıcaklık değerleri, statik kritik üslerin bulunmasında kullanıldı. Manyetik alınganlık kritik sıcaklık değerleri ile elde edilen indirgenmiş sıcaklık (ε) verileri kullanılarak; düzen parametresi ve manyetik alınganlık, kuvvet yasasıyla ve düzeltmeli kuvvet yasasıyla fit edildi. Düzen parametresine ve manyetik alınganlığa ait β , β' ve γ, γ' statik kritik üsleri elde edildi. Bu değerler, Çizelge 4.3 ve 4.4'de verilmektedir. Statik kritik üslerin elde edilen bu değerleri renormalizasyon grup teorisi ($\beta = \beta' = 0,5$; $\gamma = \gamma' = 1$) ve literatürdeki diğer teorik ($\beta = \beta' = 0,48$; $\gamma = \gamma' = 1,05$ (21)) değerler ile uyum halindedir. Ayrıca zaman adım sayısı arttırıldıkça teorik değerlere daha yakın sonuçlar elde edilmektedir. Bu durum, simülasyonlarda zaman adım sayısının önemini ortaya koymaktadır.

KAYNAKLAR

1. Serway, A. R., "Fen ve Mühendislik için Fizik Modern Fizik ilaveli", Çeviri Editörü, Kemal Çolakoğlu, **Palme Yayıncılık**, Ankara, 855,863 (1996).
2. Griffiths, D. J., "Elektromanyetik Teori", Çeviri Editörü, Bekir Karaoğlu, **İstanbul**, 189, 204, 206, 207 (1996).
3. Binney, J. J., Dowrick, N. J., Fisher, A. J., and Newman, M. E. J., "The Teory of Critical Phenomena An Introduction to the Renormalization Group", **Oxford University Press**, Oxford, 55 (1992).
4. Onsager, L., "Crystal Statistics I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition" **Phys. Rev.**, 65,117 (1944).
5. Aktekin, N., "Simulation of The Four-Dimensional Ising Model on the Creutz Cellular Automaton", **Physica A**, 232, 397-407 (1996).
6. Merdan, Z., Boyacıoğlu, B., Günen, A., and Sağlam, Z., "The Simulation of the Four-Dimensional Ising Model on the Creutz Cellular Automaton", **Bulletin of Pure and Applied Sciences**, 22D (2): 95-100, (2003)
7. Merdan, Z., N. Aktekin, "The Simulation of the Six-Dimensional Ising Model on the Creutz Cellular Automaton" , **Balkan Physics Letters**, 10, 95-101 (2002).
8. Merdan, Z., "Altı Boyutlu Ising Modelin Creutz "Cellular Automaton"ında İncelenmesi", Doktora Tezi, **Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü**, Ankara, 5 (2003).
9. Frenkel, D., Smit, B., "Understanding Molecular Simulation: from Algorithms to Applications", **Academic Press**, 204 (1996).
10. Creutz, M., "Microcanonical Monte Carlo Simulation, **Phys. Rev. Lett.**, 50, 1411 (1983).
11. Hoogland, A., Spaa, J., Selman. B., and Compagner, A., "A special-Purpose Processor for Monte Carlo Simulation of Ising Spin Systems", **J. of Comput. Phys.**, 51, 250 (1983).
12. Pearson, R.B., Richardson, J.L. and Toussaint, D., "A Fast Processor for Monte Carlo Simulation", **J. of Comput. Phys.**, 51, 241 (1983).
13. Frenkel, D., "Moleculer Dynamics Simulation of Statical Mechanical Systems", **Proceedings of The International School of Physics**, Ed. G. Ciccotti and W.G. Hoover, North-Holland, 151 (1986).

14. Spohn, H., "Molecular Dynamics Simulation of Statical Mechanical Systems", ***Proceedings of The International School of Physics***, Ed. G. Ciccotti and W.G. Hoover, North-Holland, 304 (1986).
15. Creutz, M., "Deterministic Ising Dynamics", ***Annals of Physics***, 167, 62 (1986).
16. Kutlu, B., "İki Boyutlu Ising Modelin Creutz Cellular Automaton'da İncelenmesi", ***Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü***, Ankara, 5 (1996).
17. Vichniac, G. Y., "Simulating Physics with Cellular Automata", ***Physica 10D***, 96 (1984).
18. Pameau, Y., " Invariant in Cellular Automata ", ***J. Phys. A: Math. Gen.***,17,L415 (1984).
19. Herrmann, H.J., "Fast Algorithm for The Simulation of Ising Model", ***J.of Stat.Phys.***, 45, 145 (1986).
20. Herrmann, H.J.,Camesin, H.O., and Stauffer, D., "Periods and Clusters in Ising Cellular Automata", ***J.Phys. A: Math. Gen.***, 20,4939 (1987).
21. Aktekin, N., "Simulation of eight-dimensional Ising model on the Creutz Cellular Automaton", ***Int. J. Mod. Phys. C.***,8,287 (1997).
22. Modi, J.J, "Parallel Algorithms and Matrix Computation", ***Clarendon Press***, Oxford, 29-30 (1988).
23. Seigel, H.J., McMillen, R.J., "The Multistage Cube: A Versatile Interconnection Network", ***Computer***, IEEE, 65-76 (1981).
24. Feng, T., "A Survey of Interconnection Networks", ***Computer***, IEEE, 12-27 (1981).
25. Hillis, W.D., "The Connection Machine", ***The MIT Press***, London, 0-262-58097-7 (1985).
26. Hockney, R.W., Jesshope, C.R., "Parallel Computers 2", ***Adam Hilger/IOP Publishing***, Bristol, 0-85274-812-4 (1988).
27. Hwang, K., Briggs, F.A., "Computer Architecture and Parallel Processing", ***McGraw Hill***, London, 333-350, 481-502 (1984).
28. Baxter, R. J., "Exactly Solved Models in Statistical Mechanics", ***Academic Press***, San Diego, 14,32 (1982).

29. Yeomans, J. M., "Statistical Mechanics of Phase Transitions", **Clarendon Press**, Oxford, 121 (1992).
30. Özkan, A., "İki-Boyutlu Ising Model İçin Şekil Etkisinin Creutz Cellular Automaton ile İncelenmesi", **Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü**, Ankara, 5-6 (2001).
31. Landau, D.P., "Finite-Size Behavior of the Ising Square Lattice", **Phys. Rev.B**, 13, (1997).
32. Aktekin, N., "The Simulation of the Ising model on the Creutz Cellular Automaton", **Annual Reviews of Computational Physics VII**, edited by D. Stauffer, World Scientific, (2000).
33. Fisher, M.E., and Gaunt, D.S., "Ising Model and Self-Avoiding Walks on Hypercubic Lattices and "High-Density" Expansions", **Phys.Rev.A133**, 224 (1964).



ÖZGEÇMİŞ

Ayşe DURAN, 1977 yılında İzmir'in Ödemiş ilçesinde doğdu. İlk, orta ve lise öğrenimini Ödemiş'te tamamladı. 1997-1998 öğretim yılında Gazi Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü'nde lisans öğrenimine başladı ve 2002 yılında lisans öğrenimini tamamladı. 2002-2003 öğretim yılında Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilimdalında yüksek lisans programına başladı.

