

KIRIKKALE ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

FİZİK ANABİLİM DALI
YÜKSEK LİSANS TEZİ

DÖRT BOYUTLU ISING MODELİNİN CREUTZ 'CELLULAR AUTOMATON'I
İLE SİMÜLASYONUNDA HASSASİYETİN ARTIRILMASI

ESMA SÖNMEZ

OCAK 2010

Fizik Anabilim Dalı Esmâ SÖNMEZ tarafından hazırlanan DÖRT BOYUTLU ISING MODELİNİN CREUTZ 'CELLULAR AUTOMATON'I İLE SİMÜLASYONUNDA HASSASİYETİN ARTIRILMASI adlı Yüksek Lisans Tezinin Anabilim Dalı standartlarına uygun olduğunu onaylarım.

Prof. Dr. İhsan ULUER
Fizik Anabilim Dalı Başkanı

Bu tezi okuduğumu ve tezin Yüksek Lisans Tezi olarak bütün gereklilikleri yerine getirdiğini onaylarım.

Doç. Dr. Ziya MERDAN
Danışman

Jüri Üyeleri

Başkan : Prof. Dr. Abdullah GÜNEN

Üye (Danışman) : Doç. Dr. Ziya MERDAN

Üye : Prof. Dr. İlhan AKSOY

Bu tez ile Kırıkkale Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu Yüksek Lisans derecesini onaylamıştır.

Doç. Dr. Burak BİRGÖREN
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

Sevgili aileme ...

ÖZET

DÖRT BOYUTLU ISING MODELİNİN CREUTZ 'CELLULAR AUTOMATON'I İLE SİMÜLASYONUNDA HASSASİYETİN ARTIRILMASI

SÖNMEZ, Esmâ

Kırıkkale Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı, Yüksek Lisans Tezi

Danışman: Doç. Dr. Ziya MERDAN

Ocak 2010, 99 Sayfa

Dört boyutlu Ising model doğrusal boyutu $L= 4, 6, 8$ olan sonlu boyutlu örgüler kullanılarak Creutz Cellular Automaton'dan simüle edildi. Sonsuz örgü kritik sıcaklığında manyetik alınganlık, düzen parametresi ve özısı için sonlu örgü ölçekleme denklemlerindeki kritik üsler, $\gamma = 1.0366$, $\gamma = 1.0262$, $\gamma = 1.0216$, $\beta = 0.4985$, $\beta = 0.4989$, $\beta = 0.5004$ ve $\alpha = -0.0273$, $\alpha = -0.0272$, $\alpha = -0.0269$, doğrusal boyutu $L= 4, 6, 8$ olan sonlu boyutlu örgüler kullanılarak sırasıyla 7, 14, 21 bağımsız simülasyonlar için hesaplandı. Bağımsız simülasyonların sayısı arttığı zaman $\gamma = 1.0216$, $\beta = 0.5004$ ve $\alpha = -0.0269$ kritik üs değerleri $\gamma = 1$, $\beta = 0.5$ ve $\alpha = 0$ 'ın teorik değerleriyle oldukça iyi uyum halindedir. Sonsuz örgü kritik sıcaklık için değerler $T_c^x(\infty) = 6.6788$, $T_c^y(\infty) = 6.6798$, $T_c^z(\infty) = 6.6802$, $T_c^C(\infty) = 6.6822$, $T_c^C(\infty) = 6.6819$, $T_c^C(\infty) = 6.6908$ ve $T_c(\infty) = 6.6800$, $T_c(\infty) = 6.6801$, $T_c(\infty) = 6.6802$, sırasıyla manyetik alınganlık maksimumlarının, özısı maksimumlarının fit değerlerinden ve Binder parametresi eğrilerinin kesim noktasından doğrusal boyutu $L= 4, 6, 8$ olan sonlu boyutlu örgüler kullanılarak sırasıyla 7, 14, 21 bağımsız simülasyonlar için

hesaplandı. Bağımsız simülasyon sayısı arttığı zaman $T_c^Z(\infty) = 6.6802$, $T_c^C(\infty) = 6.6908$ ve $T_c(\infty) = 6.6802$ 'nin elde edilen değerleri renormalizasyon $T_c = 6.6802$, $T_c = 6.6820$ ve Monte Carlo $T_c = 6.6800$, $T_c = 6.6803$ 'ün değerleriyle oldukça iyi uyum halindedir.

Anahtar Kelimeler: Cellular Automaton, Kritik Üs, Sonlu Örgü Ölçekleme

ABSTRACT

INCREASING THE PRECISION IN THE SIMULATION OF THE FOUR - DIMENSIONAL ISING MODEL ON THE CREUTZ CELLULAR AUTOMATON

SONMEZ, Esmâ

Kırıkkale University

Graduate School of Natural and Applied Sciences

Department of Physics, Msc. Thesis

Supervisor: Assoc Prof. Dr. Ziya MERDAN

January 2010, 99 pages

The four – dimensional Ising model is simulated on the Creutz Cellular automaton using the finite – size lattice with the linear dimension $4 \leq L \leq 8$. The critical exponents in the finite – size scaling relations for the magnetic susceptibility, the order parameter and the specific heat at the infinite – lattice critical temperature are computed to be $\gamma = 1.0366$, $\gamma = 1.0262$, $\gamma = 1.0216$, $\beta = 0.4985$, $\beta = 0.4989$, $\beta = 0.5004$ and $\alpha = -0.0273$, $\alpha = -0.0272$, $\alpha = -0.0269$ using $4 \leq L \leq 8$ for 7, 14, 21 independent simulations, respectively. As the number of independent simulations increase, critical exponents ($\gamma = 1.0216$, $\beta = 0.5004$ and $\alpha = -0.0269$) are very good agreement with the theoretical predictions of $\gamma = 1$, $\beta = 0.5$ and $\alpha = 0$, respectively. The values for the critical temperature of infinite lattice $T_c^{\chi}(\infty) = 6.6788$, $T_c^{\chi}(\infty) = 6.6798$, $T_c^{\chi}(\infty) = 6.6802$, $T_c^C(\infty) = 6.6822$, $T_c^C(\infty) = 6.6819$, $T_c^C(\infty) = 6.6908$ and $T_c(\infty) = 6.6800$, $T_c(\infty) = 6.6801$, $T_c(\infty) = 6.6802$ are obtained from the straight line fits of the magnetic susceptibility maxima, the specific heat maxima and the intersection point of Binder parameter curves using $4 \leq L \leq 8$ for the 7, 14 and 21 independent

simulations, respectively. As the number of independent simulations increases, the obtained results ($T_c^Z(\infty) = 6.6802$, $T_c^C(\infty) = 6.6908$ and $T_c(\infty) = 6.6802$) are in very good agreement with the renormalization group and Monte Carlo prediction of $T_c = 6.6802$, $T_c = 6.6820$ and $T_c = 6.6800$, $T_c = 6.6803$, respectively.

Key Words: Cellular Automaton, Critical Exponent, Finite – Size Scaling

TEŐEKKÜR

Bu alıőmayı yűrűtebilmem iin deęerli yardımlarını esirgemedięinden ve tez yazım dili hususunda gűsterdięi hassasiyet ve dűzeltmelerden dolayı tez hocam Sayın Do. Dr. Ziya MERDAN'a teőekkűr ederim. Ayrıca tez alıőmalarım boyunca her konuda bana yardımcı olan eőime teőekkűr ederim.

İÇİNDEKİLER DİZİNİ

Sayfa

ÖZET	ii
ABSTRACT	iv
TEŞEKKÜR	vi
İÇİNDEKİLER DİZİNİ	vii
ÇİZELGELER DİZİNİ	ix
ŞEKİLLER DİZİNİ	xi
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ	xvi
1. GİRİŞ	1
2. TEORİ	6
2.1. Faz Geçişi	6
2.2. Termodinamik Nicelikler	11
2.3. Serbest Enerji, İç Enerji ve Özısı	13
2.4. İkinci Derece Faz Geçişi	15
3. ISING MODEL	16
3.1. Dört Boyutlu Ising Model	17
3.2. Ising Modelin Simülasyonu İçin Algoritmalar	18
3.2.1. Metropolis algoritması	20
3.2.2. Swendsen-Wang algoritması	20
3.2.3. Wolff algoritması	21
3.2.4. Creutz' un Gezgin 'Demon' algoritması	22
3.2.5. 'Cellular Automaton'lar	23
3.2.6. Q2R 'Cellular automaton'ı	25
3.2.7. Creutz 'Cellular Automaton'ı	25
3.2.8. Cellular Automaton standart algoritma	26
3.2.8.1. Kinetik enerji bitleri ve kinetik enerji değişkeni	32

3.3. Creutz Cellular Automatonunda Termodinamik Niceliklerin Hesabı	35
4. SONLU ÖRGÜ ÖLÇEKLEME	37
4.1. Dört Boyutlu Ising Model İçin Sonlu Örgü Ölçekleme İfadeleri	37
5. SONUÇLAR VE TARTIŞMA	49
5.1. Sonlu Örgü Sıcaklık Değerlerinden Sonsuz Örgü Sıcaklık Değerlerinden Elde Edilmesi	49
5.2. Statik Kritik Üsler	64
5.2.1. Düzen parametresi için kritik üsler	64
5.3. Manyetik Duyarlılık (Alınganlık) İçin Kritik Üs	66
5.4. Özısı İçin Kritik Üs	72
5.5. Dört Boyutlu Ising Modelinin Sonlu Örgü Ölçekleme Fonksiyonları	75
5.6. Binder Parametresi	85
KAYNAKLAR	93

ÇİZELGELER DİZİNİ

<u>ÇİZELGE</u>	<u>Sayfa</u>
2.1. Bazı Atomların Çiftlenmemiş İç 3d Elektronları	7
3.1. İki 'bit'li Demonların Alabileceği Tamsayı Değerleri	33
3.2. Üç 'Bit' li Demonların Alabileceği Tamsayı Değerleri	33
3.3. Dört 'Bit' li Demonların Alabileceği Tamsayı Değerleri	34
5.1. L= 4, 6, 8 Örgüler Ve 7, 14, 21 Bağımsız Simülasyonlar İçin Manyetik Alinganlığın Maksimumlarından Elde Edilen Sonlu Örgü Kritik Sıcaklık Değerleri	52
5.2. Sonsuz Örgü Kritik Sıcaklığından $T_c = 6.6802(2)$ ve $L = 4, 6, 8$ Örgülerinde 7, 14, 21 Bağımsız Simülasyonlar İçin Manyetik Alinganlık Değerleri	53
5.3. L= 4, 6, 8 Örgüler ve 7, 14, 21 Bağımsız Simülasyonlar İçin Özısının Maksimumlarından Elde Edilen Sonlu Örgü Kritik Sıcaklık Değerleri	56
5.4. Sonsuz Örgü Kritik Sıcaklığında $T_c = 6.6802(2)$ ve $L = 4, 6, 8$ Örgülerinde 7, 14, 21 Bağımsız Simülasyonlar İçin Özısı Değerleri	57
5.5. Dört Boyutlu Ising Modelinin Farklı Çalışmalardan Elde Edilen Sonsuz Örgü Kritik Sıcaklık Değerleri	63
5.6. L= 4, 6, 8 Örgüler ve 7, 14, 21 Bağımsız Simülasyonlar İçin β , $\bar{\beta}$ ($T < T_c = 6.6802, 0.04 \leq t \leq 0.1$), γ , $\bar{\gamma}$ ($T < T_c = 6.6802, 0.04 \leq t \leq 0.1$) ve $\gamma(L)$, $\bar{\gamma}(L)$ ($T \leq T_c^\chi(L) 0.04 \leq t \leq 0.1$), $\beta(L)$, $\bar{\beta}(L)$ ($T \leq T_c^\chi(L) 0.04 \leq t \leq 0.1$) Kritik Üslerin değerleri	67

5.7. Doğrusal Boyut (L) Aralığı 7, 14, 21 Bağımsız Simülasyonlar İçin $\chi_c \text{Log}^{-1/2} L$ 'nin L 'ye Karşı ve $\chi_{\max} \text{Log}^{-1/2} L$ 'nin L 'ye Karşı Log-Log Grafiklerinin Eğimi	69
5.8. 7, 14, 21 Bağımsız Simülasyonlar İçin $C_c \text{Log}^{-1/3} L$ 'nin L 'ye Karşı ve $C_{\max} \text{Log}^{-1/3} L$ 'nin L 'ye Karşı Log – Log Grafiklerinin Eğimi	74
5.9. 7, 14, 21 Bağımsız Simülasyonlar İçin Binder Parametresi Eğrilerinin Kesişmesinden Elde Edilen $T_c(\infty)$ ve (g_L) Değerleri.....	88

ŞEKİLLER DİZİNİ

<u>ŞEKİL</u>	<u>Sayfa</u>
2.1. M (H) Grafikleri; a) $T < T_c$, b) $T \approx T_c$, c) $T > T_c$	10
2.2. (T,H) Yarı Düzlemi	10
2.3. $h=0$ 'da Kendiliğinden Manyetizasyon $ M $ ' nin Sıcaklıkla Değişimi	11
3.1. $d=1, 2, 3$ ve 4 Boyutlu Örgülerin Geometrik Yapıları ve İzdüşümleri	16
3.2. Kare Örgüde Bir Spin Ters Çevrildiğinde, ΔH_I , Ising Enerjisindeki Değişimler...	27
3.3. Basit Kübik Örgüde Bir Spin Ters Çevrildiğinde, ΔH_I , Ising Enerjisindeki Değişimler	28
3.4. Soyut Küp Örgüde Bir Spin Ters Çevrildiğinde, ΔH_I , Ising Enerjisindeki Değişimler	29
3.4. (devam) Soyut Küp Örgüde Bir Spin Ters Çevrildiğinde, ΔH_I , Ising Enerjisindeki Değişimler	30
5.1.a. 7 Bağımsız Simülasyon İçin Manyetik Alınganlığın Sıcaklıkla Değişimi	50
5.1.b. 14 Bağımsız Simülasyon İçin Manyetik Alınganlığın Sıcaklıkla Değişimi	51
5.1.c. 21 Bağımsız Simülasyon İçin Manyetik Alınganlığın Sıcaklıkla Değişimi	51
5.2.a. 7 Bağımsız Simülasyon İçin Özısının Sıcaklıkla Değişimi	54
5.2.b. 14 Bağımsız Simülasyon İçin Özısının Sıcaklıkla Değişimi	54
5.2.c. 21 Bağımsız Simülasyon İçin Özısının Sıcaklıkla Değişimi	55
5.3.a. $L= 4, 6, 8$ Örgüler ve 7, 14, 21 Bağımsız Simülasyonlar İçin $L^{-1/\nu}$ 'ye Karşı $T_c^{\chi}(L)$ (Düzeltilmesiz) Grafiği $\left(\nu = \frac{1}{2}\right)$	58

5.3.b. L= 4, 6, 8 Örgüler ve 7, 14, 21 Bağımsız Simülasyonlar İçin	
$L^{-1/\nu} \text{Log}^{-1/6} L$ 'ye Karşı $T_c^\chi(L)$ (Düzeltilmeli) Grafiği $\left(\nu = \frac{1}{2}\right)$	59
5.4.a. L= 4, 6, 8 Örgüler ve 7, 14, 21 Bağımsız Simülasyonlar İçin $L^{-1/\nu}$ 'ye Karşı	
$T_c^C(L)$ (Düzeltilmesiz) Grafiği $\left(\nu = \frac{1}{2}\right)$	60
5.4.b. L= 4, 6, 8 Örgüler ve 7, 14, 21 Bağımsız Simülasyonlar İçin	
$L^{-1/\nu} \text{Log}^{-1/6} L$ Karşı T_c^C (Düzeltilmeli) Grafiği $\left(\nu = \frac{1}{2}\right)$	61
5.5. 7, 14, 21 Bağımsız Simülasyonlar İçin $1/L$ ' ye Karşılık $\beta(L)$ Grafiği	65
5.6. 7, 14, 21 Bağımsız Simülasyonlar İçin $1/L$ 'ye Karşılık $\gamma(L)$ Grafikleri	68
5.7.a. 7, 14, 21 Bağımsız Simülasyonlar İçin Manyetik Alınanlığın Sonsuz Örgü	
Kritik Sıcaklığındaki Değerleri $\chi_c \text{Log}^{-1/2} L$ ' nin Sonlu Örgü Doğrusal	
Boyutuna Karşı Log – Log Grafiği ($4 \leq L \leq 8$)	70
5.7.b. 7, 14, 21 Bağımsız Simülasyonlar İçin Manyetik Alınanlığın Sonlu Örgü	
Kritik Sıcaklığındaki Değerleri $\chi_{\max} \text{Log}^{-1/2} L$ ' nin Sonlu Örgü Doğrusal	
Boyutuna Karşı Log – Log Grafiği ($4 \leq L \leq 8$)	71
5.8.a. 7, 14, 21 Bağımsız Simülasyonlar İçin Özısının Sonsuz Örgü Kritik	
Sıcaklığındaki Değerleri $C_c \text{Log}^{-1/3} L$ 'nin Sonlu Örgü Doğrusal Boyutuna	
Karşı Log – Log Grafiği ($4 \leq L \leq 8$)	72
5.8.b. 7, 14, 21 Bağımsız Simülasyonlar İçin Özısının Sonlu Örgü Kritik	
Sıcaklığındaki Değerleri $C_{\max} \text{Log}^{-1/3} L$ 'nin Sonlu Örgü Doğrusal	
Boyutuna Karşı Log – Log Grafiği ($4 \leq L \leq 8$)	73

5.9.a. 7 Bağımsız Simülasyon İçin Manyetizasyonun (M) Sıcaklığa (T) Göre Değişimi ($4 \leq L \leq 8$)	75
5.9.b. 14 Bağımsız Simülasyon İçin Manyetizasyonun (M) Sıcaklığa (T) Göre Değişimi ($4 \leq L \leq 8$)	76
5.9.c. 21 Bağımsız Simülasyon İçin Manyetizasyonun (M) Sıcaklığa (T) Göre Değişimi ($4 \leq L \leq 8$)	76
5.10.a. 7 Bağımsız Simülasyon İçin Ölçeklenmiş Manyetizasyonun Ölçeklenmiş Sıcaklığa Göre Grafiği ($4 \leq L \leq 8$), ($T_c = 6.6802$), $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right) = 2$	77
5.10.b. 14 Bağımsız Simülasyon İçin Ölçeklenmiş Manyetizasyonun Ölçeklenmiş Sıcaklığa Göre Grafiği ($4 \leq L \leq 8$), ($T_c = 6.6802$), $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right) = 2$	78
5.10.c. 21 Bağımsız Simülasyon İçin Ölçeklenmiş Manyetizasyonun Ölçeklenmiş Sıcaklığa Göre Grafiği ($4 \leq L \leq 8$), ($T_c = 6.6802$), $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right) = 2$	79
5.11.a. 7 Bağımsız Simülasyon İçin Ölçeklenmiş Manyetik Alınganlığın, Ölçeklenmiş Sıcaklığa Karşı Grafiği ($4 \leq L \leq 8$), ($T_c = 6.6802$), $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right) = 2$	80
5.11.b. 14 Bağımsız Simülasyon İçin Ölçeklenmiş Manyetik Alınganlığın, Ölçeklenmiş Sıcaklığa Karşı Grafiği ($4 \leq L \leq 8$), ($T_c = 6.6802$), $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right) = 2$	81
5.11.c. 21 Bağımsız Simülasyon İçin Ölçeklenmiş Manyetik Alınganlığın, Ölçeklenmiş Sıcaklığa Karşı Grafiği ($4 \leq L \leq 8$), ($T_c = 6.6802$), $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right) = 2$	82

- 5.12.a. 7 Bağımsız Simülasyon İçin Ölçeklenmiş Manyetik Alınganlığın, Ölçeklenmiş Sıcaklığa Karşı Grafiği ($4 \leq L \leq 8$), ($T_c = 6.6802$), $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right) = 2$ 83
- 5.12.b. 14 Bağımsız Simülasyon İçin Ölçeklenmiş Manyetik Alınganlığın, Ölçeklenmiş Sıcaklığa Karşı Grafiği ($4 \leq L \leq 8$), ($T_c = 6.6802$), $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right) = 2$ 84
- 5.12.c. 21 Bağımsız Simülasyon İçin Ölçeklenmiş Manyetik Alınganlığın, Ölçeklenmiş Sıcaklığa Karşı Grafiği ($4 \leq L \leq 8$), ($T_c = 6.6802$), $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right) = 2$ 85
- 5.13.a. 7 Bağımsız Simülasyon İçin Binder Parametresinin (g_L) Sıcaklık T'ye Göre Değişimi86
- 5.13.b. 14 Bağımsız Simülasyon İçin Binder Parametresinin (g_L) Sıcaklık T'ye Göre Değişimi87
- 5.13.c. 21 Bağımsız Simülasyon İçin Binder Parametresinin (g_L) Sıcaklık T'ye Göre Değişimi88
- 5.14.a. 7 Bağımsız Simülasyon İçin Binder Parametresinin Ölçeklenmiş Sıcaklığa Karşı Grafiği ($4 \leq L \leq 8$), ($T_c = 6.6802$), $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right) = 2$ 89
- 5.14.b. 14 Bağımsız Simülasyon İçin Binder Parametresinin Ölçeklenmiş Sıcaklığa Karşı Grafiği ($4 \leq L \leq 8$), ($T_c = 6.6802$), $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right) = 2$ 90
- 5.14.c. 21 Bağımsız Simülasyon İçin Binder Parametresinin Ölçeklenmiş Sıcaklığa Karşı Grafiği ($4 \leq L \leq 8$), ($T_c = 6.6802$), $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right) = 2$ 91

5.15. 7, 14, 21 Bağımsız Simülasyonlar İçin Binder Parametresi (g_L)'nin Örgü	
Uzunluğu (L)' ye Bağlı Grafiği	92

SİMGELER DİZİNİ

T	Sıcaklık
T_c	Kritik sıcaklık
d	Uzay boyutu
M	Manyetizasyon (Düzen parametresi)
$\beta, \bar{\beta}$	Manyetizasyon kritik üssü
χ	Manyetik alınganlık
$\gamma, \bar{\gamma}$	Manyetik alınganlık kritik üssü
C	Özısı
$\alpha, \bar{\alpha}$	Özısı kritik üssü
ν	Korelasyon uzunluğu kritik üssü
t	İndirgenmiş sıcaklık
∞	Sonsuz
k_B	Boltzmann sabiti
$\langle \rangle$	Beklenen değer ve ortalama

KISALTMALAR DİZİNİ

CA	Cellular Automaton
CCA	Creutz Cellular Automaton
MC	Monte Carlo
RG	Renormalizasyon Grup Teorisi

1. GİRİŞ

Doğada bazı sistemler belirli şartlar altında faz geçişi yapar. Faz geçişi maddenin bir durumdan diğer bir duruma ani geçişi olarak tanımlanır ve parçacıklar arası etkileşim sonucunda meydana gelmektedir. Günlük hayatta faz geçişine en iyi örnek suyun faz değiştirmesidir. Ancak bunun dışında faz geçişine birçok örnek verilebilir. Sıvıdan gaza, paramanyetik fazdan ferromanyetik faza, normaliletken fazdan süperiletken faza geçişler en çok bilinen ve deney ortamlarında gözlenebilen faz geçişleridir (1). Faz geçişlerinin anlaşılması ve açıklanması termodinamik ve istatistik fiziğin araştırma alanlarından biridir. Termodinamik, faz ve faz geçişinin genel ifadesini verirken istatistik fizik çeşitli modellerle faz geçişlerini inceleme imkânı verir.

Manyetik faz geçişi maddenin mıknatıslanmasındaki değişmeye dayanmaktadır. Demir (Fe), Kobalt (Co), Nikel (Ni) gibi maddelerin manyetik faz geçişi bilinen en yaygın örneklerdendir. Herhangi bir maddenin ölçülen manyetik dipol momentinin, maddenin hacmine oranı maddenin mıknatıslanması olarak tanımlanır. Mıknatıslanmanın kaynağı tamamlanmamış yörüngelerdeki çiftlenmemiş elektron spinidir. Manyetik özelliklerine bağlı olarak maddeler paramanyetik, diyamanyetik ve ferromanyetik olmak üzere başlıca üç sınıfa ayrılabilir. Paramanyetik maddeler sürekli (daimi) manyetik dipol momente sahip atomlardan oluşur. Bu momentler birbirleri ile çok zayıf etkileşimde bulunurlar ve bir dış manyetik alan içerisinde bulunmadıkları zaman gelişigüzel yönelmişlerdir. Sürekli manyetik dipol momente sahip atomların varlığından dolayı paramanyetik maddeler pozitif fakat küçük bir manyetik alınganlığa sahiptir. Diyamanyetik maddeler sürekli manyetik momente sahip olmayan atomlardan oluşur. Diyamanyetik bir maddeye bir dış manyetik alan uygulandığında, uygulanan dış manyetik alana zıt yönde zayıf bir manyetik moment oluşur. Bu diyamanyetik maddelerin bir mıknatıs tarafından zayıfça itilmesine neden olur. Diyamanyetik maddeler çok küçük ve negatif bir manyetik alınganlığa sahiptirler. Ferromanyetik maddeler ise zayıf bir dış alanda dahi birbirine paralel olarak yönelmeye çalışan manyetik momentlere sahiptir. Manyetik momentler bir

kere paralel hale getirildikten sonra dış alan ortamdan kaldırılrsa bile madde mıknatıslanmış olarak kalır (2). Bu nedenle ferromanyetik maddeler sürekli mıknatısların yapımında kullanılır. Ferromanyetik maddelerin mıknatıslanması aynı zamanda sıcaklığa bağlı bir niceliktir. Maddenin mıknatıslanması $T=0$ °K için en büyüktür, buna karşılık sıcaklık arttıkça maddenin mıknatıslanması azalmaktadır. Cruie sıcaklığı olarak isimlendirilen bir T_c sıcaklığında sıfır olur. T_c 'nin üstündeki sıcaklıklarda madde paramanyetik fazda bulunur. Bu tez çalışmanın konusu manyetik faz geçişleridir ve faz geçişleri için en iyi istatistik modellerden biri olan Ising model kullanılmıştır.

Ising model; faz geçişi yapan sistemleri temsil eden, ferromanyetik maddelerin gösterdiği davranışların anlaşılmasını ve termodinamik niceliklerinin incelenmesini sağlayan, spinler arası basit etkileşmeleri içeren bir modeldir. Ising modelin ferromanyetik faz geçişini temsil eden en basit hali spin $\frac{1}{2}$ Ising modelidir (3). İki durumlu ve tek düzen parametrelili bir modeldir. Analitik çözümü 1925 yılında E. Ising tarafından bir boyutlu uzayda yapılmıştır (4). Dış manyetik alan yokluğunda iki boyutlu uzayda ise 1944 yılında Onsager tarafından analitik çözüm yapılmıştır (5). Bundan başka üç durumlu ve iki düzen parametrelili bir sistem olan Spin-1 Ising modeli de araştırmacılar tarafından incelenmektedir (6-15). Spin-1 modeli Blume, Emery ve Griffiths tarafından 1971 yılında tanımlanmıştır (6). Bu tez çalışmasında spin $\frac{1}{2}$ Ising model kullanılmıştır.

Sadece bir ve iki boyutlu uzayda ve dış manyetik alan yokluğunda analitik çözümü bulunan spin $\frac{1}{2}$ Ising modelin üst boyutlarda henüz analitik çözümü yapılamamıştır. Bu nedenle istatistiksel sistemlerin sayısal simülasyon çalışmaları oldukça önem kazanmaktadır. Simülasyon gerçek bir sistemin modelini tasarlama süreci ve sistemin işlemesi için sistemin davranışını anlamak veya değişik görüşleri değerlendirmek amacıyla bu model üzerinde denemeler yapmaktır. İstatistik mekanikte bazı problemlerin çözümü tam yapılamazken yaklaşık çözüm bulmak mümkün olabilir. Bu yaklaşık çözümlerin doğruluğunu denemek ve desteklemek açısından simülasyon çalışmaları oldukça önemlidir (16,17). Yine deneysel çalışmalar esnasında karşılaşılabilecek birçok problemi ortadan kaldırması açısından

simülasyon çalışmaları önem kazanmaktadır. Yani bilgisayar simülasyon çalışmaları teorik ve deneysel çalışmalar arasında bir köprü görevi görmektedir. Simülasyon çalışmaları ile 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 incelenmesi için birçok model tanımlanmıştır. En yaygın olanları Ising model, Potts modeli, Küresel model, Örgü gazı modeli, Percolation modeli ve X-Y ve Heisenberg modelidir.

Monte Carlo ve Molekül Dinamiği (17,18) istatistik sistemlerin sayısal simülasyonu, dolayısı ile faz geçişi ve kritik olay çalışmalarında kullanılan en temel araçlardandır. Monte Carlo yöntemi şans karakterli olduğundan bu isimle anılır. Monte Carlo yaklaşımında rast gele sayı üretici kullanılır. Başlangıçta genel olarak spinlerin hepsi aynı yönlü alınır. Bu tür algoritmalarda sıcaklık önceden bilinmekte ve giriş parametresi olarak kullanılmakta ve sabit sıcaklıkta bütün spinler teker teker durumlarını değiştirme teşebbüsünde bulunmaktadır. Tüm örgüdeki spinlerin durum değiştirme girişiminde bulunması bir Monte Carlo adımını oluşturur. Değişikliğe uğrayacak spin, örgü üzerinde geliş güzel seçilebilir. Herhangi bir konfigürasyonla karşılaşma ihtimali Boltzman dağılımına uyacak şekildedir.

Molekül Dinamiği yöntemi Monte Carlo yönteminin bir alternatifidir (19). Molekül Dinamiği metodu, çok parçacıklı sistemlerin dinamik özelliklerini incelemede 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 imkân sağlamaktadır. Bu yöntemde rasgele sayı üretici kullanılmamaktadır.

Çok önemli ve çok kullanılan algoritmalarından biride, Markov yöntemidir ve ilk olarak 1953 yılında Metropolis ve arkadaşları tarafından türetilmiştir (20). Metropolis ve arkadaşlarının algoritması ile Molekül Dinamiği arasında yer alan diğer bir simülasyon yönteminde 1983'te M. Creutz tarafından geliştirilmiştir (21). Bu yöntem gezgin demon modeli olarak bilinmektedir. 1986'da M. Creutz iki boyutlu uzayda Ising modelinin deterministik (belirli bir kurala bağlı) bir 'Cellular Automaton(CA)' kuralı ile simülasyonunu gerçekleştirmiştir (22). 'Cellular Automaton' ilk olarak Neuman ve Ulam tarafından biyolojik sistemlerin simülasyonu için kullanılmıştır (23–25). 'Cellular Automaton' 0 veya 1 değerleri alabilen bir hücre veya örgü noktalarından 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 Wolfrom tarafından verilmiştir (25). Fizik, Kimya ve Biyoloji'deki dinamik sistemler için pek çok uygulamalar vardır.

Ising modelinin ve çeşitli fizik problemlerin bir CA olarak simülasyonu Vichniac tarafından önerilmiştir (26). Ising modelin simülasyonu için iki farklı CA algoritması vardır. Bunlardan ilki Vichniac, Pomeau ve Herrman tarafından sunulan Q2R algoritması (26–28), ikincisi ise Creutz tarafından ortaya atılan Creutz 'cellular automaton' olarak bilinmektedir (29). 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 $d=2$ (30–35), 3 (14, 36), 4 (37- 46), 5 (47–50), 6 (16, 51–55), 7 (56–59), ve 8 (59,60) 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 Monte Carlo ve Cellular Automaton simülasyonları ile incelenmiş ve

sonsuz örgü davranışları, sonlu örgü ölçekleme teorisi yardımıyla belirlenmiştir (29–34, 36–90).

Bu tez çalışmasında dört boyutlu Ising model için, doğrusal boyutu $L= 4, 6, 8$ olan periyodik sınır şartlı örgülerde ve sonsuz örgü kritik sıcaklığı yakınında dört ‘bit’ li demonlar kullanılarak Creutz cellular automaton ile simülasyonlar yapılmıştır. Bu çalışmada simülasyon sayısını artırmanın termodinamik nicelikler üzerine etkisi incelenmiştir. $L= 4, 6$ ve 8 örgülerinde yapılan simülasyonlarda enerji giriş parametresi olarak kullanılmıştır ve sıcaklık, manyetizasyon, manyetik alınganlık, özısı ve Binder parametresi simülasyon sonuçlarından elde edilmiştir. Sonlu örgü ölçekleme bağıntıları kullanılarak, sonsuz örgü kritik sıcaklık değerleri, manyetizasyon $(\beta, \bar{\beta})$, manyetik alınganlık $(\gamma, \bar{\gamma})$ ve özısı $(\alpha, \bar{\alpha})$ için kritik üsler elde edilmiştir. Tez çalışmasında elde edilen sonuçlardan görüldüğü gibi simülasyon sayısı artırıldığı zaman elde edilen kritik üs ve kritik sıcaklık değerlerinin literatür değerleri ile daha uyum içinde olduğu görülmektedir.

2. TEORİ

2.1. Faz Geçişi

Bir elektron spininden oluşan iç manyetik momentin Bohr magnetonu olarak bilinen ifadesi;

$$\mu_B = \frac{e}{2m} \hbar = 9,27 \cdot 10^{-24} \text{ J/T} \quad (2.1)$$

ile verilir.

Çok sayıda elektronu bulunan atomlarda veya iyonlarda, genellikle elektron spinleri zıt yönelecek 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. Mıknatıslanma, tamamlanmamış yörüngelerdeki çiftlenmemiş elektron spininden kaynaklanmaktadır. Çizelge 2.1.'de görüldüğü gibi Demir (Fe), Kobalt (Co) ve Nikel (Ni)'de çiftlenmemiş iç 3d elektronları mıknatıslığın nedenidir.

Çizelge 2.1. Bazı atomların çiftlenmemiş iç 3d elektronları

Çiftlenmemiş 3d elektronları	Atom	Elektron adedi	Elektronkurulumu 3d yörüngesileri	4s elektronları
3	V	23	⊗⊗⊗○○	2
5	Cr	24	⊗⊗⊗⊗⊗	1
5	Mn	25	⊗⊗⊗⊗⊗	2
4	Fe	26	⊗⊗⊗⊗○	2
3	Co	27	⊗⊗⊗○○	2
2	Ni	28	⊗⊗○○○○	2
0	Cu	29	○○○○○○	1

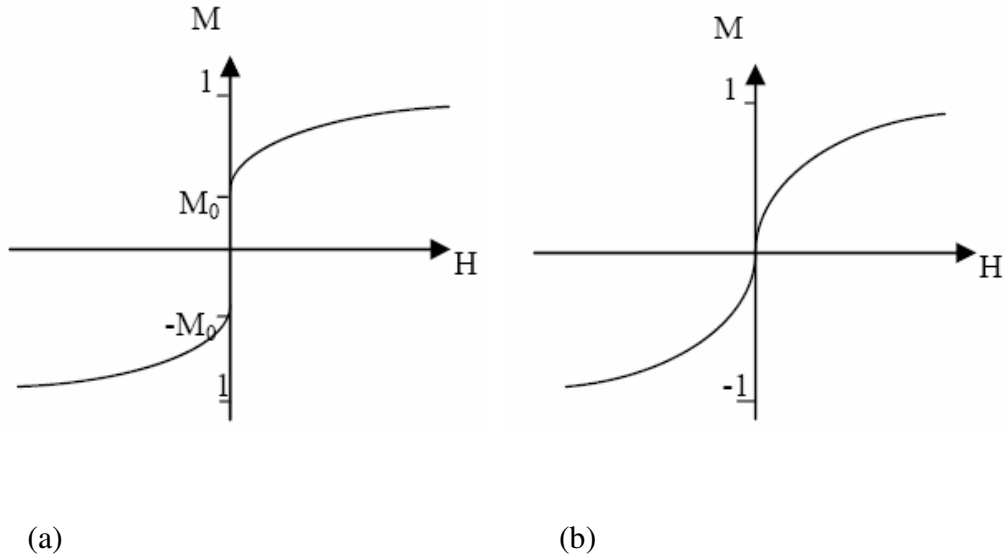
Bilindiği gibi bütün maddeler az veya çok manyetik özelliğe sahiptir ve manyetizma, maddenin atom ve kristal yapılarına bağlıdır. Maddelerin manyetik özelliklerinin büyüklükleri ve sıcaklığa bağımlılıkları farklıdır. Manyetik maddeler uygulanan manyetik alana karşı davranışlarına göre sınıflandırılabilir. Manyetizmanın bazı türleri şunlardır:

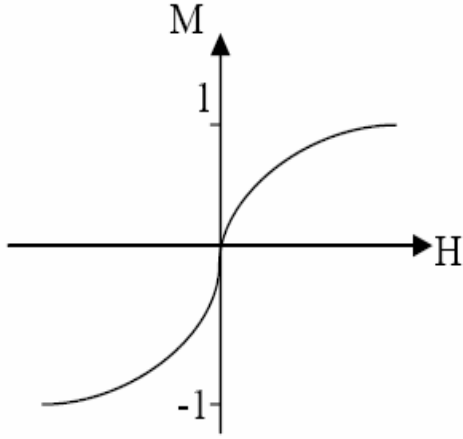
- a) Diyamanyetizma
- b) Paramanyetizma
- c) Ferromanyetizma
- d) Ferrimanyetizma
- e) Antiferromanyetizma
- f) Zorlanmış ferromanyetizma

- a) Diyamanyetik maddeler, manyetik momente sahip değildirler, dış manyetik alan tarafından zayıfça itilirler; tüm elektronları çiftlenmiştir. Örnek olarak H_2O , Cu (k), N_2 , $BaSO_4$, Bi, Hg, Ag, Pb, elmas, NaCl verilebilir.
- b) Paramanyetik maddeler, manyetik alan tarafından zayıfça çekilirler, çiftlenmemiş elektronlara sahiptirler. Elektronların spin ve orbital hareketleri manyetizmayı doğurur. Dış manyetik alan kalktığında manyetizmaları yok olur. Çiftlenmemiş elektron sayısı arttıkça paramanyetik özellik artar. Örnek olarak O_2 , Gd, Mg Al, Pt, U, Na, verilebilir.
- c) Ferromanyetik maddeler, belirli bir sıcaklığın (Curie sıcaklığı) altında kalıcı manyetik özelliğe sahiptirler; kalıcı manyetik özelliği paramanyetizmanın 1000 katı daha büyüktür, atomların manyetik momentleri aynı doğrultuda yönelmiştir, dış manyetik alan kalktığında manyetik özelliklerini korurlar. Örnek olarak Fe, Ni, Co, çelik verilebilir.
- d) Ferrimanyetik maddeler, kristal içindeki iyonların manyetik momentleri antiparalel yönelmiştir, birbirlerini tamamen yok etmemiştir, net manyetik moment hala mevcuttur. Örnek olarak magnetit (Fe_3O_4) verilebilir.
- e) Antiferromanyetik maddeler, yönelmeleri sonucu atom veya iyonların manyetik momentleri birbirlerini yok eder, net manyetik moment sıfırdır.
- f) Zorlanmış ferromanyetik maddeler, spinleri bir kuvvet uygulanarak paralel hale getirilmiş antiferromanyetik maddelerdir.

Kendiliğinden mıknatıslanma ferromanyetizmanın tanımlayıcı özelliğidir. 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 ortamdaki kaldırılabilir 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 sifira ($0 \text{ }^\circ\text{K}$) 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 sifir olur. Curie sıcaklığının üstündeki sıcaklıklarda spinler rastgele yöneldiklerinden dolayı madde paramanyetik fazda bulunur. Bu durumda sıcaklıktan kaynaklanan hareketler, komşu atomlar arası etkileşmelerden 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. Örneğin oda sıcaklığındaki demir çubuk incelendiğinde sıcaklık artarken sifir manyetik alandaki kendiliğinden manyetizasyonun (M_0) azaldığı görülür. Eğer sıcaklık kritik sıcaklığa (T_c) yükselirse Şekil 2.1.'de görüldüğü gibi M_0 sifira gider ve $M(H)$, $h=0$ 'da sonsuz eğimli sürekli bir fonksiyon haline gelir

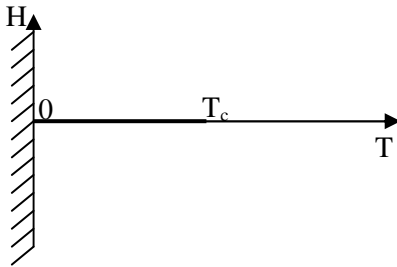




(c)

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

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

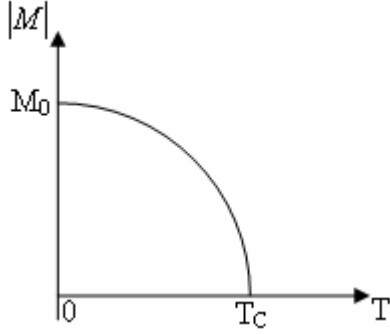


Şekil 2.2. (T, H) yarı düzlemi

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

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

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



Şekil 2.3. $h=0$ 'da kendiliğinden manyetizasyon $|M|$ 'nin sıcaklıkla değişimi

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. 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 (1–3).

2.2. Termodinamik Nicelikler

Termodinamik nicelikler genel olarak spin başına serbest enerjiden elde edilmektedir ve serbest enerji aşağıdaki gibi tanımlanabilir:

$$f(H, T) = -kTN^{-1} \log Z(H, T) \quad (2.2)$$

Serbest enerjiye bağılı olarak termodinamik nicelikler aşağıdaki ifadelerle tanımlanmaktadır:

$$H_I(H,T) = -kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{f(H,T)}{kT} \right) \quad (2.3)$$

$$C(H,T) = \frac{\partial}{\partial T} H_I(H,T) \quad (2.4)$$

$$M(H,T) = -\frac{\partial}{\partial H} \left(\frac{f(H,T)}{kT} \right) \quad (2.5)$$

$$\chi(H,T) = \frac{\partial}{\partial H} M(H,T) \quad (2.6)$$

Burada H_I iç enerji, C özısı, M mıknatıslanma ve χ ise manyetik alınganlıktır.

Manyetizasyon cinsinden ifade edilebilen bir nicelik olan Binder kümülanı (g_L) ise aşağıdaki ifade ile tanımlanır (61).

$$g_L = 1 - \langle M^4 \rangle / (3 \langle M^2 \rangle^2) \quad (2.7)$$

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

İkinci derece faz geçişlerinde mıknatıslanma düzen parametresi ismini alır. Faz geçişi serbest enerji veya onun türevlerinde singülerlik (ıraksama) oluştuğunda ortaya çıkar. Ising model faz geçişi yapabilen sistemleri temsil eden bir modeldir. İkili alaşım, örgü gazı modelleri uygun parametrelerle Ising modele özdeş hale

getirilebilir. Fiziksel sistemlerin dışında birçok alandaki problemler de Ising modelle çözülebilir. Bu nedenle Ising modelin çözümü oldukça önem kazanmaktadır.

2.3. Serbest Enerji, İç Enerji ve Özısı

Termodinamik limitte spin başına serbest enerji;

$$f(H,T) = -kT \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \ln Z_1(H,T) \quad (2.8)$$

şeklinde ifade edilir. Burada $N \rightarrow \infty$ termodinamik limitte işlem yapıldığını göstermektedir. Klasik bir sistem büyük hacim (V) içerisinde çok sayıda (N) molekülün kompozisyonu olarak düşünülebilir. N ve V'nin büyüklüğünün genel olarak $N \approx 10^{23}$ ve $V \approx 10^{23}$ olduğu düşünülür. N ve V çok büyük sayılar olduğundan bir limit durumu göz önüne almak uygundur. Bu limit 'termodinamik limit' olarak bilinmektedir. $v=V/N$ özgül hacmi sonlu bir sayı olacak şekilde termodinamik limitte parçacık sayısı ve hacim sonsuza gider ($N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$). Fiziksel olarak büyük sistemlerin serbest enerjilerinin sistemin büyüklüğü ile orantılı olması beklenir. Örgünün eni, boyu ve yüksekliğinin aynı anda ya da sırasıyla sonsuza gitmesi durumunda termodinamik limit aynı sonucu verir. Termodinamik nicelikler spin başına serbest enerjiden elde edilmektedir. Termodinamik limitte ($N \rightarrow \infty$) manyetizasyon ve iç enerji serbest enerjinin dış alan ve sıcaklığa göre birinci türevinden elde edilmektedir. $X(S_i)$ sistemin S_i durumuna karşılık gelen toplam enerji, içenerji ($H_1 = \langle E \rangle$) veya mıknatıslanma gibi gözlenebilir bir nicelik olmak üzere

$$\langle X \rangle = Z^{-1} \sum_s X(s) \exp[-E(s)/kT] \quad (2.9)$$

şeklinde tanımlanır (77). Burada;

$$H_1 = \langle E \rangle = Z^{-1} \sum_s E(s) \exp[-E(s)/kT] \quad (2.10)$$

ifadesi yazılabilir. Eşitlik 2.9 ve 2.10'u kullanarak iç enerji ifadesi Eşitlik 2.11 şeklinde tanımlanır.

$$H_1 = kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln Z \quad (2.11)$$

$$H_1 = -kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{f}{kT} \right) \quad (2.12)$$

Diğer taraftan spin başına özısı ise

$$C(H, T) = \frac{\partial H_1}{\partial T} \quad (2.13)$$

ifadesi ile verilir. Voronel 1963 yılında argonun T_c yakınında sabit hacimde özısını ölçmüştür. Klasik teori özısının sadece kritik noktada süreksiz sıçramaya sahip olduğunu tahmin eder.

$$C_v(TC^-) \neq C_v(TC^+) \quad (2.14)$$

Özısı düz olarak artar, kritik sıcaklığın her iki yanında ani bir hızla artar.

Kritik sıcaklıkta C_v 'nin bir pike sahip olup olmadığı veya sonsuzda ıraksayıp ıraksamadığı oldukça önemlidir. Onsager özısını $C_v(T) = A \ln(t) +$ sonlu belirsizlik terimleri şeklinde tanımlar.

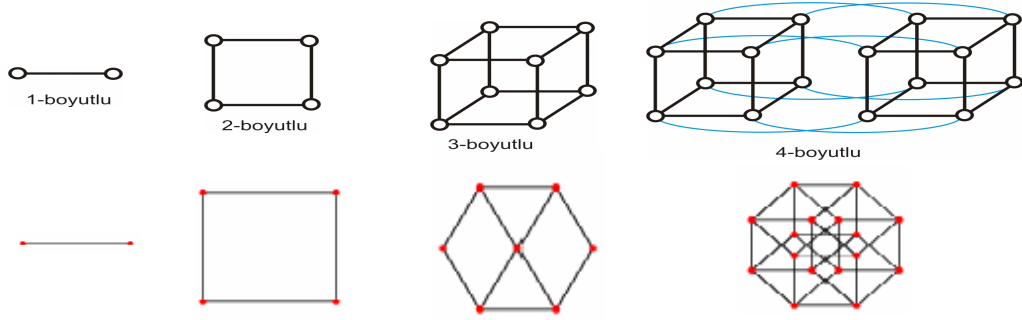
$\alpha = 0$ (log) olması özısının singüler olmayan bir kısma sahip olmasındandır. Özısı $T < T_c$ için α' ve $T > T_c$ için α şeklinde iki üs ile tanımlanır. Teorik ve deneysel olarak $\alpha = \alpha'$ olduğu ispatlanmıştır.

2.4. İkinci Derece Faz Geçişi

İkinci derece faz geçişleri, serbest enerjinin birinci türevinin sürekliliği, ikinci türevinin süreksizliği ile tanımlanır. İkinci derece faz geçişini Fe, Co ve Ni gibi manyetik malzemelerde görülen ferromanyetizmadan paramanyetizmaya, ikili alaşımlarda görülen düzenden düzensizliğe ve süper akışkanlarda görülen süper akışkandan akışkana faz geçişlerinde görmek mümkündür. Bu tür sistemlerde, paramanyetik ve ferromanyetik fazı karakterize eden düzen parametresi manyetizasyondur. Herhangi bir manyetik sistem için faz geçiş sıcaklığı civarında manyetizasyon ve iç enerjide görülen sürekliliğin yanı sıra alınganlık ve özısıda görülen ıraksama ikinci derece faz geçişinin karakteristik özelliğidir. Sistemdeki bu tür ıraksamalar kritik üslerle karakterize edilir. İkinci derece faz geçişlerinin karakteristik bir diğer özelliği ise, korelasyon uzunluğunun faz geçiş noktasında sonsuza gitmesidir. Simülasyon çalışmalarının sonlu sistemlerde yapılabilmesi zorunluluğu, ikinci derece faz geçişlerinde beklenen sonsuz korelasyon uzunluğunun örgü boyu ile sınırlanmasını beraberinde getirmektedir. Bunun sonucu olarak, sonsuz hacim limitinde, geçiş noktasında, termodinamik niceliklerde ortaya çıkan sonsuz değerler örgü büyüklüğüne bağlı olarak sonlu değerlere sahip olur.

3. ISING MODEL

Ising model spinler arası etkileşmeleri içeren ferromanyetik maddelerin termodinamik niceliklerinin incelenmesini sağlayan bir modeldir. Bu modelde incelenen sistem örgü konumları 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 hekzagonal, dört boyutta hiper kübiktir.



Şekil 3.1. d=1, 2, 3 ve 4 boyutlu örgülerin geometrik yapıları ve izdüşümleri

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. Her bir spin bir bölgenin tüm etkileşmelerini içeren net manyetik momenti temsil eder. 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. Konfigürasyona sahip olan bir sistemin enerjisi aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır:

$$E_I = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - H \sum_{i=1}^N S_i \quad (3.1)$$

Burada I alt indisi Ising enerjisi $\langle ij \rangle$ yakın komşuları çeşitleri üzerinden toplamı göstermektedir. J_{ij} en yakın komşu etkileşme sabiti ve H dış manyetik alan olarak verilmektedir. Etkileşmenin izotropik olduğu durumda $J_{ij}=J$ alınmaktadır. $J>0$ ferromanyetizma, $J<0$ ise antiferromanyetizma durumuna karşılık gelmektedir. Ising modelde bütün termodinamik fonksiyonlar E_I enerjili mümkün konfigürasyon üzerinden hesaplanmaktadır. $\{S_i\}$ spin kümesi mikrokronik topluluk kavramına uymaktadır fakat analitik çalışmalarında kanonik topluluk kullanılmaktadır (37).

3.1 Dört Boyutlu Ising Model

Ising evrensellik sınıfı için üst kritik boyut dördür ($d^*=4$). 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 düzeltmeler gereklidir. Kuvvet kanunu ıraksamaları için bu tahmin edilen logaritmik düzeltmeler, 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 düzeltmeleri ve sıra dışı davranışın bazı kanıtlarını göstermektedir. Fakat modelin sonlu örgü ölçekleme analizinde sistematiklik yoktur ve sonlu sistemlerin doğrudan Monte Carlo simülasyonlarıyla bu etkileri gözlemek ilginçlik arz etmektedir. Dört boyutlu Ising model gerçek manyetik sistemlere uygulanmamasına rağmen üst kritik boyutta logaritmik düzeltme olasılığının bir genel durum oluşturması beklenilmektedir. Üst kritik boyut üç olduğu zaman bu logaritmik düzeltmeler gerçekte deneysel olarak gözlenebilir. Üstelik dört boyutlu Ising modelinin sonuçları sonlu örgü ölçekleme teorisi için ilginçlik göstermektedir (16).

3.2. Ising Modelin Simülasyonu İçin Algoritmalar

Birçok 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 simülasyonları 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 bulunabilir.

$$X_i(t + \Delta t) = X_i(t) + V_i(t) \Delta t \quad (3.2)$$

$$V_i(t + \Delta t) = V_i(t) + \frac{f_i(t)}{m_i} \Delta t \quad (3.3)$$

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;

$$E_k = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{m_i} \quad (3.4)$$

ve sistemin potansiyel enerjisi;

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{i<j} U(r_{ij}) \quad (3.5)$$

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

$$H = \frac{1}{2} \sum_i \frac{p_i^2}{m_i} + \sum_{i<j} U(r_{ij}) \quad (3.6)$$

olur. Sistemin hareket denklemleri ise;

$$m \frac{dr_i}{dt} = P_i \quad \text{ve} \quad \frac{dP_i}{dt} = \sum_{i<j} F(r_{ij}) \quad (3.7)$$

olur.

Molekül Dinamiği arasında yer alan simülasyon çalışmalarının temeli, ilk olarak 1953 yılında Metropolis ve arkadaşları tarafından ortaya konulan algoritmaya dayanmaktadır (20).

Bu simülasyon çalışmaları zamanla geliştirilmiş ve birçok yeni simülasyon metodu ile algoritma ortaya çıkmıştır.

3.2.1. 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 eder.

Yani ;

$$P(\alpha \rightarrow \alpha') = \begin{cases} A^{-1} & E_{\alpha'} < E_{\alpha} \\ A^{-1} e^{-\beta(E_{\alpha'}-E_{\alpha})} & E_{\alpha'} > E_{\alpha} \end{cases} \quad (3.8)$$

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 ya da 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.

3.2.2. Swendsen-Wang Algoritması

Spin kümesi 'cluster' algoritmalarından biri olan Swendsen-Wang algoritması 1987 yılında Swendsen ve Wang tarafından sunulmuştur (19). Spinlerin kendiliğinden ters çevrilmesi ve spin kümelerinin 'cluster' şeklinin belirlenmesine sistemin kendisinin karar vermesi fikrine dayanan ilk başarılı çalışmadır. Bu Ising modele 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_l ve S_m spinlerinin aynı ya da zıt yönde olmalarına göre bu

hamiltonyene uyan üleşim (partition) fonksiyonu hesaplanır. Swendsen-Wang spin temsilinden baę temsiline geęen ve tekrar geri dönen bir algoritma teklif etmişlerdir.

Bu algoritma şöyledir:

- i) Bir spin konumu alınır. Aynı yönde olanlar birleştirilerek bir bağlantılar aęı oluşturulur.
- ii) 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.
- iii) Temel birimler olarak yeni daha küçük spin kümelerinin yönelimleri ele alınır ve eşit olasılıkla rasgele olarak aşağı veya yukarı yönlendirilir.
- iv) Son olarak, yeniden yönlendirilmiş spin kümelerinden başlangıçtaki spin örgüsü yeniden oluşturulur.

Bütün bu işlemler, sistem için bir Monte Carlo yineleme (tekrarlama) basamaęı olarak kabul edilir. Benzer iki spin arasındaki baęın silinmesinin mümkün olması ve herhangi bir durum tek basamakta başka birinden elde edildięinden, bu işlemin girilebilirlik kriterini destekledięi anlaşılmaktadır.

3.2.3. Wolff Algoritması

Spin kümesi algoritmalarından dięeri olan Wolff algoritması 1989 yılında Wolff tarafından tanımlanmıştır. Swendsen-Wang algoritmasının mantıęına 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 deęiřtirmesi iřlemine ierir. Bu algoritma řoyledir:

Örgü üzerinde rasgele bir i hücresi seilir.

Bütün komřu j hücreleri ziyaret edilir ve $P_{ekle}(S_i, S_j) \equiv 1 - e^{-\min(0, 4\beta J S_i S_j)}$ ihtimaliyle j örgüsü i 'yi ieren spin kümesine eklenir. Ferromanyetik bir model iin eęer spinler zıt yönde iseler P_{ekle} sıfır ve spinler aynı yönde iseler $1 - e^{-4\beta J}$ 'dir.

i 'li spin kümesi ile birleřen yeni hücrelerin her biri j indisine eřit alınarak ikinci basamak tekrarlanır.

Daha fazla yeni hücre ekleninceye kadar üçüncü basamak tekrarlanır.

Spin kümesindeki bütün hücelere ait spinler yön deęiřtirir ve iřlem tamamlanır.

Wolff algoritması Swendsen-Wang algoritması ile oldukça benzerdir. Spin kümesine yeni bir spin baęlanma ihtimali Swendsen-Wang algoritmasında bir baęı 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 deęiřtirir. Wolff yönteminde ise o sadece başlama spini ieren spin kümesidir. Bu daha büyük spin kümelerinin bu iřlemde daha sık böyle yön deęiřtirdiklerini göstermektedir. Bu büyük spin kümelerinde algoritmayı daha etkin yapar.

3.2.4. Creutz' un Gezgin 'Demon' Algoritması

1983 yılında M. Creutz tarafından geliřtirilen simülasyon yöntemi Metropolis ve arkadaşlarının algoritması ile moleköl dinamięi arasına girmiřtir (21). Öncelikle 'demon' (spine eřlenik momentum) denilen bir serbestlik derecesi tanımlanmaktadır.

Bu yeni deęişken molekül dinamięindeki eşlenik momentumun benzeridir. Molekül dinamięindeki 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 aktarılmışsa 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' kullanılabilirdiği gibi birden fazla gezgin 'demon' da kullanılabilir.

3.2.5. '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 (23–25). 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 deęişkenler yer almaktadır. Bir 'CA' bu hücre deęişkenlerinin değeri ile belirlenmektedir. Genel olarak basit bir 'cellular automaton' 0 veya 1 deęerli hücre veya sitelerin bir satırından oluşur. Bu deęerler kesikli her zaman adımı sırasında yenilenir. 'Cellular automaton'un kesikli zaman adımlarındaki gelişimi sırasında bir hücre deęişkeni bölgesel bir kurala uyarak bir önceki zaman adımında kendisi ve kendisine komşu hücrelerdeki deęişkenlerin deęerlerine baęlı olarak yeni deęerini alır. Bir hücrenin komşusu ifadesi ile kendisi ve kendisine en yakın komşu hücreler kastedilmektedir. Hücrenin herhangi bir zaman

adımındaki deęişkenlerinin deęerleri özdeş bir kural yardımıyla eş zamanlı olarak elde edilmektedir. Bir boyutlu ‘CA’larda bir hücrenin bir sonraki zaman adımında alacağı deęeri belirleyen bölgesel kural, en yakın üç hücre deęerinin fonksiyonu olarak tanımlanmaktadır. i . konumdaki bir hücrenin deęeri a_i ile verilirse bu hücrenin yeni deęerini veren kural;

$$a_i^{t+1} = f(a_{i-1}^t, a_i^t, a_{i+1}^t) \quad (3.9)$$

şeklinde ifade edilebilir. Bu ifadede f kuralı açıklayan bir fonksiyondur. Herhangi bir fiziksel sistem için cellular automaton 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 deęişken veya deęişkenler belirlenir.
- iii) Hücrelerin birbiriyle etkileşme şeklini ve gelişimini sağlayan bir bölgesel kural tanımlanır.

Fiziksel sistemlerin yanı sıra biyoloji, kimya ve sosyal bilimlerdeki birçok problem bir ‘cellular automaton’ olarak incelenebilmektedir. Biyolojide DNA’nın kopyasını yapan fonksiyonun bulunması, kalbin hızlı ya da yavaş çarpması, ‘filamentous’ organizmalarının büyütülmesi ‘CA’ ile modellenmiştir. Kimyada ise uzaysal diffüzyon ile çiftlenmiş reaksiyonların bir ağını içeren lineer olmayan kimyasal sistemler ‘CA’ olarak modellenmiştir (25).

3.2.6. 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 (26–27).

3.2.7. Creutz ‘Cellular Automaton’ı

1986 yılında M. Creutz tarafından geliştirilen simülasyon yöntemi Metropolis ve arkadaşlarının algoritması ile molekül dinamiği arasına girmiştir (22). Creutz Ising modelde iç enerji ile spine eşlik eden momentuma karşılık gelen kinetik enerjinin toplamı korunur. Böylece Creutz algoritması kullanılarak üretilen konfigürasyonlardan iç enerjiye bağlı termodinamik nicelikleri hesaplamak mümkün olmaktadır. Üstelik bu algoritma yaygın MC metodlarından on kat daha hızlı çalışmakta ve yüksek kalitede rastgele sayı üreticine gereksinim duymamaktadır.

CCA algoritması kullanılarak dış manyetik alan yokluğunda iki ve üç boyutlu Ising modelde yapılan hesaplamalar algoritmanın $2 \leq d \leq 8$ boyutlu uzaylardaki Ising modellerinin simülasyonlarında oldukça başarılı olduğunu göstermiştir (10–16, 29–60). Bu algoritmadan türetilen çeşitli algoritmalar dış alan (23), ikinci derece en yakın komşu etkileşme ve dört spin etkileşim terimleri içeren Ising model problemlerine uygulanmış ve literatürle uyumlu sonuçlar elde edilmiştir (32–33). Bu tez çalışmasında Creutz ‘cellular automaton’ında dört boyutlu Ising modelin simülasyonu standart algoritma kullanılarak yapılmıştır.

3.2.8. Cellular Automaton Standart Algoritma

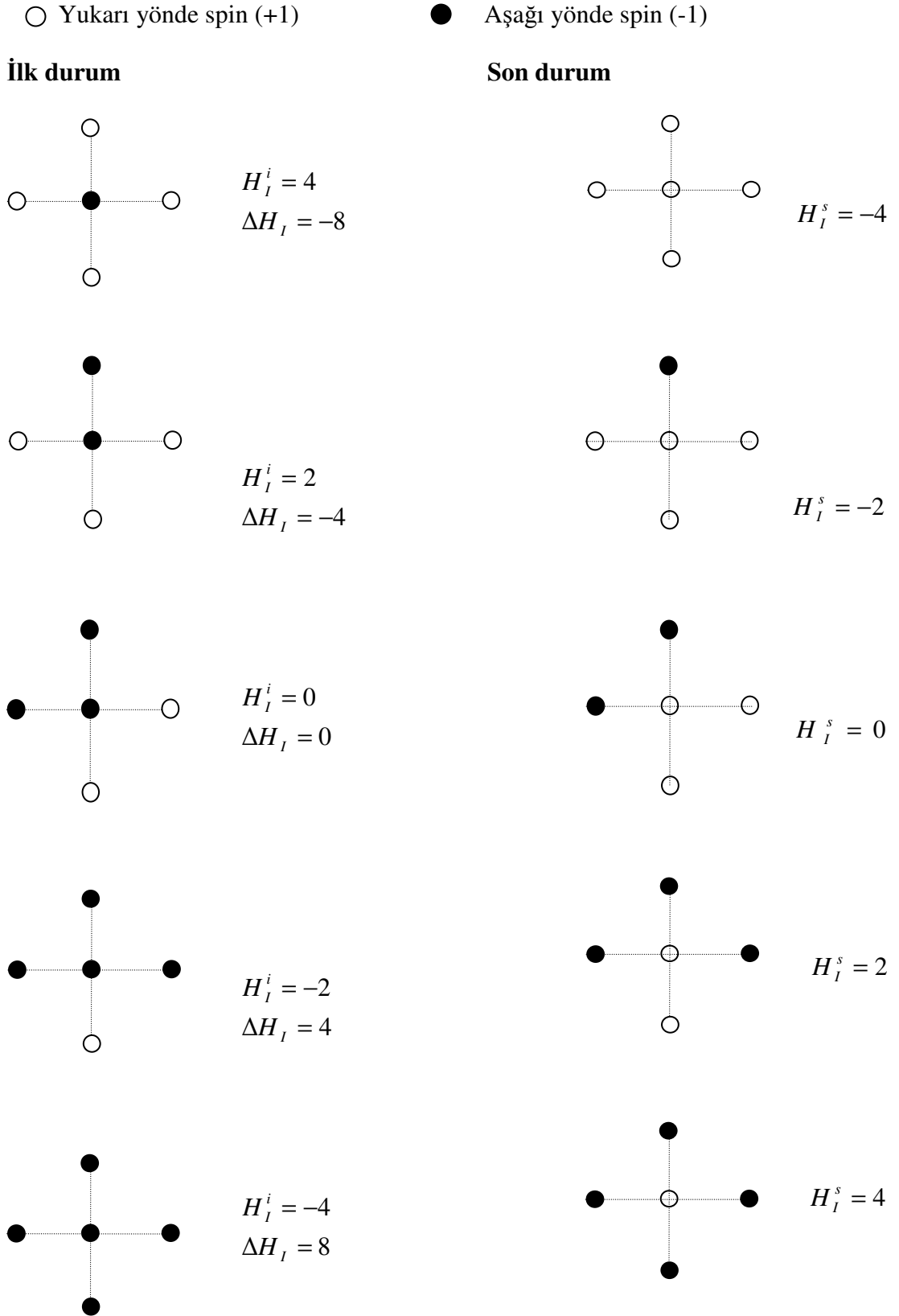
Bu algoritmada örgünün her bir hücresinde üç değişken bulunmaktadır. Bu değişkenler; Ising spin değişkeni, spine eşlik eden momentum ve paritedir. Her bir hücredeki bu değişkenlerin değerleri, kendi değişkenleri ve enyakın komşuların değişkenlerinden bir cellular automaton kuralı ile belirlenir. Her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

$$H_I = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad (3.10)$$

ile ifade edilir. İkinci değişken spine eşlik eden momentum değişkenidir. Momentuma karşılık gelen kinetik enerji H_k , $(0, m)$ aralığında herhangi bir spin değişimi için Ising enerjideki değişime eşit olan tamsayı değerler almaktadır. Kinetik enerji bitlerle veya bu bitlerin oluşturduğu değerlere karşılık gelen bir değişkenle temsil edilebilir. Toplam enerji ise;

$$H = H_I + H_K \quad (3.11)$$

olmak üzere tüm zaman adımlarında korunur. Algoritmanın ilk adımı en düşük iç enerjili (Ising enerjisi) durumun taban durumu olarak tanımlanması ve başlangıç konfigürasyonu olarak alınmasıdır. İkinci adımda algoritma spin değişimine karar vermektedir. Bu aşamada spin konfigürasyonunun t zamanındaki H_I^t Ising enerjisi hesaplanır. Değeri değiştirilecek hücrenin spini $\frac{1}{2}$ olasılıkla diğer iki halden birine çevrilir ve $t+1$ zamanında H_I^{t+1} Ising enerjisi elde edilir. Daha sonra Ising enerjisindeki değişim, ΔH_I , hesaplanır.



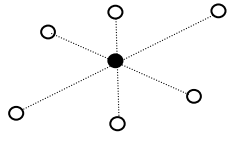
Şekil 3.2. Kare örgüde bir spin ters çevrildiğinde, ΔH_I , Ising enerjisindeki değişimler

○ Yukarı yönde spin (+1)

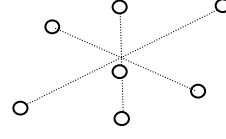
● Aşağı yönde spin (-1)

İlk durum

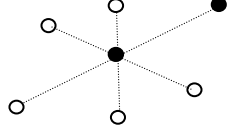
Son durum



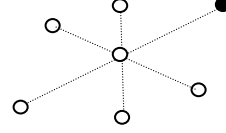
$$H_I^i = 6$$
$$\Delta H_I = -12$$



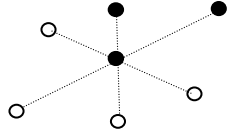
$$H_I^s = -6$$



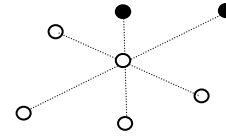
$$H_I^i = 4$$
$$\Delta H_I = -8$$



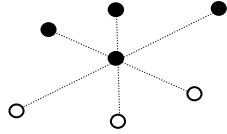
$$H_I^s = -4$$



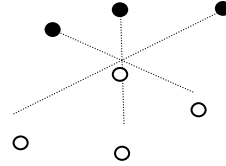
$$H_I^i = 2$$
$$\Delta H_I = -4$$



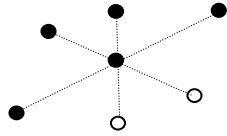
$$H_I^s = -2$$



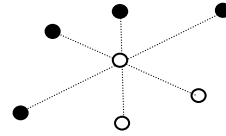
$$H_I^i = 0$$
$$\Delta H_I = 0$$



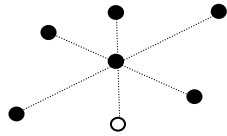
$$H_I^s = 0$$



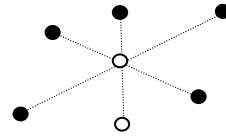
$$H_I^i = -2$$
$$\Delta H_I = 4$$



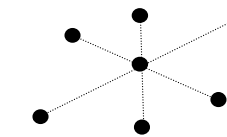
$$H_I^s = 2$$



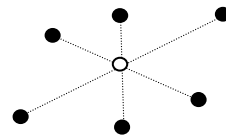
$$H_I^i = -4$$
$$\Delta H_I = 8$$



$$H_I^s = 4$$



$$H_I^i = -6$$
$$\Delta H_I = 12$$



$$H_I^s = 6$$

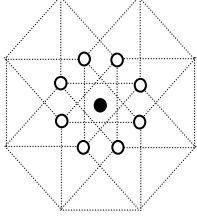
Şekil 3.3. Basit kübik örgüde bir spin ters çevrildiğinde, ΔH_I , Ising enerjisindeki değişimler

○ Yukarı yönde spin (+1)

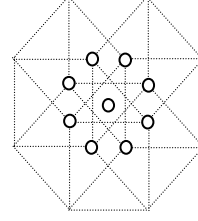
● Aşağı yönde spin (-1)

İlk durum

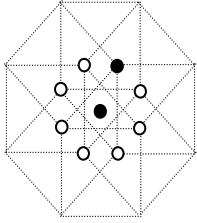
Son durum



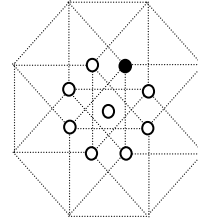
$$H_1^i = 8$$
$$\Delta H_1 = -16$$



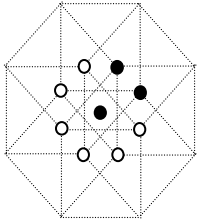
$$H_1^s = -8$$



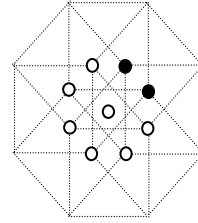
$$H_1^i = 6$$
$$\Delta H_1 = -12$$



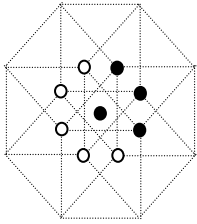
$$H_1^s = -6$$



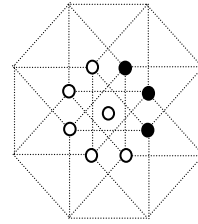
$$H_1^i = 4$$
$$\Delta H_1 = -8$$



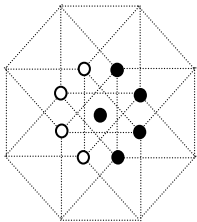
$$H_1^s = -4$$



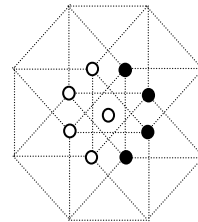
$$H_1^i = 2$$
$$\Delta H_1 = -4$$



$$H_1^s = -2$$



$$H_1^i = 0$$
$$\Delta H_1 = -0$$

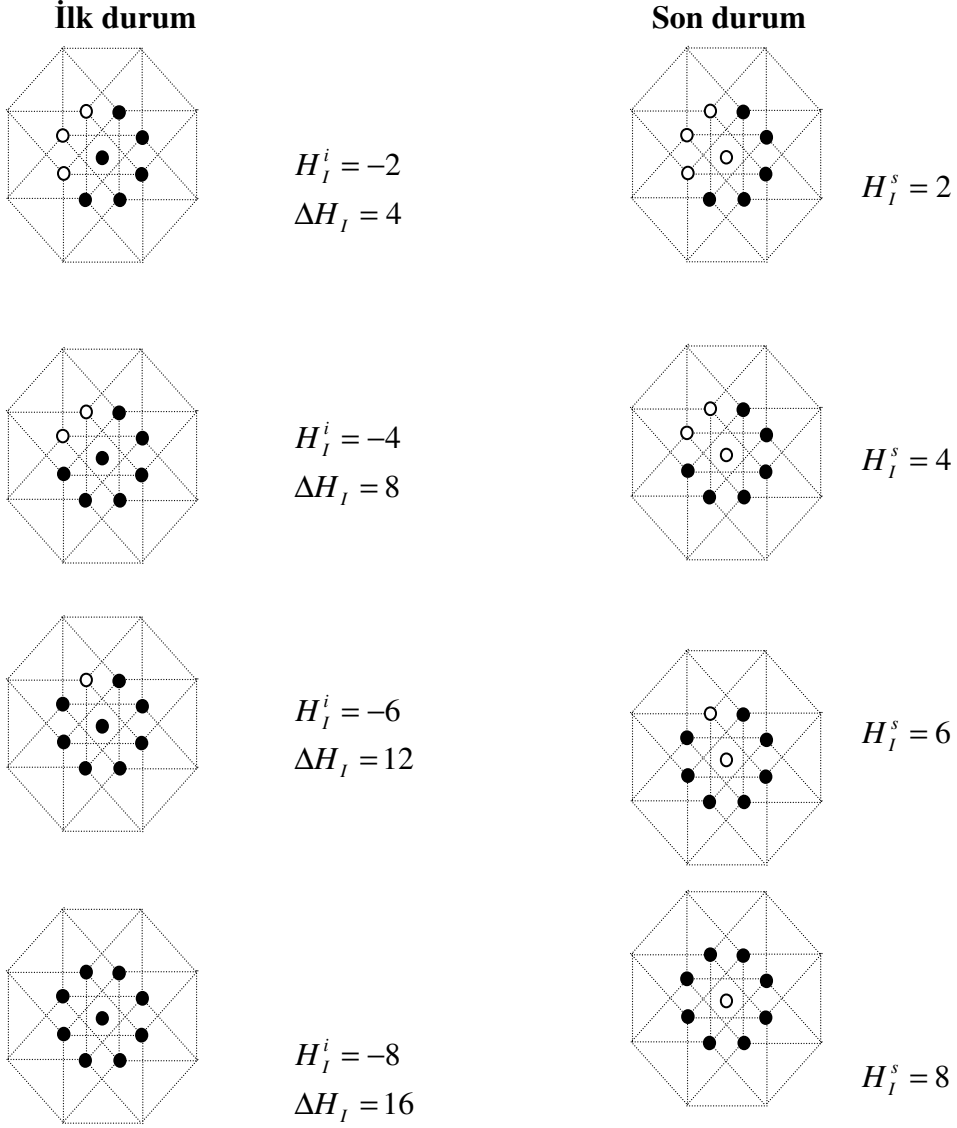


$$H_1^s = -0$$

Şekil 3.4. Soyut küp örgüde bir spin ters çevrildiğinde, ΔH_1 , Ising enerjisindeki değişimler

○ Yukarı yönde spin (+1)

● Aşağı yönde spin (-1)



Şekil 3.4. (devam) Soyut küp örgüde bir spin ters çevrildiğinde, ΔH_I , Ising enerjisindeki değişimler

Ising enerjisindeki deęişim bu hücrelerin momentum deęişkenine aktarılabilir veya momentum deęişkeninden alınabilecek bir deęer ise ve toplam enerji korunuyorsa spin ters çevrilir ve yeni konfigürasyon kabul edilmiş olur. Buna uygun olarak momentum deęiştirilir. Aksi halde spin ve momentum deęiştirilmez. Bu işlem örgüdeki bütün siyah hücelere aynı zaman adımında uygulanmaktadır. Aşağıdaki eşitliklerde Ising enerji deęişiminin, dH_I , hesaplanması görülmektedir.

$$H_T^t = H_T^{t+1} \quad (3.12)$$

$$H_I^t + H_K^t = H_I^{t+1} + H_K^{t+1} \quad (3.13)$$

$$H_K^{t+1} = H_I^t - H_I^{t+1} + H_K^t \quad (3.14)$$

$$H_K^{t+1} = H_K^t + dH_I \quad (3.15)$$

İki, üç ve dört boyutlu uzayda bir spin ters çevrildiğinde Ising enerjisinde meydana gelen deęişim (ΔH_I), iki boyutlu uzayda 8, 4, 0, -4, -8 deęerlerini, üç boyutlu uzayda 12, 8, 4, 0, -4, -8, -12 deęerlerini, dört boyutlu uzayda 16, 12, 8, 4, 0, -4, -8, -12, -16 deęerlerini almaktadır. Üçüncü deęişken paritedir. CA'nın zamanla dama tahtası üzerinde gelişimini sağlamakta, böylece Ising modelin 'CA' ile simülasyonunu mümkün kılmaktadır. Her bir zaman adımında dama tahtasının siyah hücelerine kural uygulanıp rengi beyaza çevrilir. Beyaz hücelerin ise kural uygulanmaksızın sadece rengi siyaha çevrilir. Bir hücrenin yenilenmesi için spini ters çevrilir. Sistemin iç enerji deęişimi hesaplanır. Toplam enerji H korunmak üzere, eęer sistemin iç enerjisindeki deęişim bu hücreye ait momentum deęişkenine verilebilecek veya ondan alınabilecek kadarsa, o zaman bu spinin yönünde deęişiklik yapılır. Aksi halde spinin yönü ve momentumu deęiştirilmez. Başlangıçta bütün spinler aşağı veya yukarı yönde alınırlar. İlk kinetik enerji örgüye rasgele verilir. Toplam enerjide sınırlama devam ettiği müddetçe rastgele hareket, konfigürasyon uzayı boyunca devam eder.

3.2.8.1. Kinetik Enerji Bitleri ve Kinetik Enerji Değişkeni

Demon enerjisinin hesabı yapılırken bit sayısı göz önünde bulundurulur. Çünkü demon enerjisinin alacağı enerji değerleri kinetik enerji bit sayısına bağlı olarak değişmektedir. İki bitten oluşan demon;

$$E_D = (2^0 x D_1 + 2^1 x D_2) \quad (3.16)$$

eşitliğine göre (0'dan 3'e kadar) dört enerji seviyesine, üç bitten oluşan demon

$$E_D = (2^0 x D_1 + 2^1 x D_2 + 2^2 x D_3) \quad (3.17)$$

eşitliğine göre (0'dan 7'e kadar) sekiz enerji seviyesine, dört bitten oluşan demon

$$E_D = (2^0 x D_1 + 2^1 x D_2 + 2^2 x D_3 + 2^3 x D_4) \quad (3.18)$$

eşitliğine göre (0'dan 15'e kadar) on altı enerji seviyesine sahiptir.

Çizelge 3.1. İki 'bit'li demonların alabileceği tamsayı değerleri

D_2	D_1	E_D	$H_K=4E_D$
0	0	0	0
0	1	1	4
1	0	2	8
1	1	3	12

Çizelge 3.2. Üç 'bit'li demonların alabileceği tamsayı değerleri

D_3	D_2	D_1	E_D	$H_K = 4E_D$
0	0	0	0	0
0	0	1	1	4
0	1	0	2	8
0	1	1	3	12
1	0	0	4	16
1	0	1	5	20
1	1	0	6	24
1	1	1	7	28

Çizelge 3.3. Dört ‘bit’li demonların alabileceği tamsayı değerleri

D ₄	D ₃	D ₂	D ₁	E _D	H _K =4E _D
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

Altı ikili ‘bit’ için dört bit ‘demon’ veya spine eşlik eden momentuma karşılık gelmektedir. D₁ , D₂ ,D₃ ve D₄ ile gösterilen bu bitler ‘0’ veya ‘1’ değerini alabilir. Buna göre (0, 15) aralığındaki tamsayıları oluşturmaktadır. Yerleşik ‘demon’a ait kinetik enerji (H_K) bu tamsayı değerlerinin dört katını almaktadır.

Kinetik enerji deęişkeni

Algoritmada spine eşlik eden momentuma karşılık gelen kinetik enerji bitleri yerine kinetik enerji deęişkeni tanımlanabilir. Örgünün gereksinim duyabileceęi maksimum Ising enerji deęişimini karşılayacak şekilde kinetik enerji deęerleri Şekil 3.2., Şekil 3.3., Şekil 3.4.'den bulunarak bir deęişkende saklanıp algoritma düzenlenmiştir (37).

3.3. Creutz Cellular Automatonunda Termodinamik Niceliklerin Hesabı

Toplam enerjinin korunumu altında mikrokanonik olan bu model kinetik enerji ve iç enerji simülasyon süresince dalgalanmakta yani bu enerjiler kanonik bir davranış sergilemektedir (31).

Sistemde E_i kinetik enerjili konfigürasyona raslama ihtimali Boltzman aęırlıklı üstel bir daęılıma uymaktadır.

$$P(E_i) \rightarrow \exp(-4\beta E_i) \quad (3.19)$$

Burada $4E_i = H_K$ dır ve bu daęılıma uygun olarak kinetik enerjinin beklenen deęeri aşıęıdaki gibidir:

$$\langle E_D \rangle = \sum_n n e^{-4n\beta} / \sum_n e^{-4n\beta} \quad (3.20)$$

Eşitlik 3.17 ile verilen kinetik enerjinin beklenen deęeri ile sistemin sıcaklığı belirlenebilmektedir. Yukarıdaki ifade kullanılarak $T = 1/\beta$ eşitliğinden sıcaklık deęerleri belirlenir ve elde edilen bu sıcaklık deęerine karşılık kendilięinden miknatislanma (M) aşıęıda verilen ifade yardımıyla hesaplanır.

$$M = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i \quad (3.21)$$

Bu eşitlikteki $N=LxLxLxL$, örgüdeki hücre sayısına karşılık gelmektedir.

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

$$H_i = -\frac{1}{2N} \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad (3.22)$$

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} = L^2 \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 / kT \quad (3.23)$$

Bu çalışmada dış manyetik alanın sıfır olduğu durum göz önüne alınmaktadır. Bu yüzden Eşitlik 3.23, manyetik alınganlık için dış manyetik alanın varlığında elde edilen ifadenin $H \rightarrow 0$ limitine karşılık gelmektedir.

Özısı ve binder parametresi

$$C = \partial H_i / \partial T = N(\langle H_i^2 \rangle - \langle H_i \rangle^2) / (kT)^2 \quad (3.24)$$

$$U_L = 1 - \langle M^4 \rangle / (3 \langle M^2 \rangle^2) \quad (3.25)$$

şeklinde elde edilir. Termodinamik niceliklerin zaman ortalamaları ise;

$$\langle a \rangle = \frac{1}{t} \sum_{i=1}^t a(t) \quad (3.26)$$

ile hesap edilir.

4. SONLU ÖRGÜ ÖLÇEKLEME

Fiziksel sistemlerin kritik davranışlarını taklit etmek amacıyla yapılan hesaplamalar sonlu örgüler üzerinde gerçekleştirilebilmektedir. Bu nedenle sonlu örgülerdeki hesaplamalardan sonsuz örgü davranışını tahmin edebilmek için sonlu örgü ölçekleme teorisi geliştirilmiştir. Sonlu örgü ölçekleme bağıntıları; sistemin kritik nokta yakınlarında olması ve tüm uzunlukların, sisteme ait karakteristik uzunluk olan, korelasyon uzunluğu (ξ) cinsinden ifade edilmesi gibi kabullerden elde edilmektedir. Bu yüzden ölçekleme teorisi uzunluk ölçeğinin değişimine bağlı olarak termodinamik niceliklerde görülen değişimlerle ilgilidir. Boyutlu bir niceliğin değeri standart bir birim uzunluğa bağlı olarak değişir (61–62).

4.1. Dört Boyutlu Ising Model İçin Sonlu Örgü Ölçekleme İfadeleri

Ising modeli ϕ^4 alan teorisi ile aynı evrensellik sınıfındadır. ϕ^4 alan teorisi için üst kritik boyut dördür. $d=4$ 'ün üzerindeki boyutlarda bu teori kritik bölgede renormalize olmuş etkileşmenin yok olması ile önemsiz olmakta ve kritik üsler ϕ^4 alan teorisinin ortalama alan değerlerini almaktadır. Renormalize olmuş etkileşme g_R aşağıdaki şekilde ifade edilebilir:

$$g_R = \frac{\chi^{(4)}}{\xi^d \chi^2} \quad (4.1)$$

Burada ξ korelasyon uzunluğu $\chi^{(4)}$ ve χ sırasıyla düzen parametresi dağılımının dördüncü ve ikinci dereceden 'cumulant'larıdır. Serbest alan limiti yaklaşımında tanımlanan niceliklerden biride Fisher üssüdür. (ω^*) ile gösterilir ve aşağıdaki şekilde tanımlanmaktadır:

$$v\omega^* \equiv d\nu + \gamma - 2\Delta \quad (4.2)$$

Burada ν korelasyon uzunluğu için kritik üs, γ manyetik alınganlık için kritik üs, Δ ‘gap’ üssüdür. $\omega^* \geq 0$ genel bir durum olup ‘hyperscaling’ bozulmasının bir ölçüsüdür. Renormalize olmuş etkileşme (g_R) kritik nokta yakınında aşağıdaki şekilde verilmektedir.

$$g_R \sim t^{u\omega^*} \quad (4.3)$$

Burada $t = (T - T_c)/T_c$ ve T_c kritik sıcaklıktır. İki boyutta kesin çözüm $\omega^* = 0$ durumunda görülmekte ve böylece ‘hyperscaling’ bozulmamaktadır. Model önemli bir etkileşme teorisi. $d=3$ için ilk çalışmalar ‘hyperscaling’ bozulma olasılığını göstermiştir. Fakat seri açılım ve Monte Carlo simülasyon sonuçları ω^* ’ın sıfır ya da sıfıra yakın olduğunu göstermektedir. $d=5$ için Monte Carlo hesaplamaları büyük ‘hyperscaling’ bozulmalarının ortalama alan tahminlerini doğrulamaktadır. $d=4$ üst kritik boyut da renormalizasyon grup hesaplamalarıyla ortaya atılan ortak inanış eşitlik 4.2 için logaritmik düzeltmenin kritik bölgede önemsiz (Gaussian teorisine) olduğu sonucuna götürmektedir. Gerçekte Gaussian teorisinin dört boyutta ϕ^4 teorisi için ispatlanması zordur.

- i) Kritik bölgede ortalama alan davranışından birçok logaritmik sapma vardır.
- ii) $t \rightarrow 0$ olduğu zaman $g_R \rightarrow 0$ olmakta ve renormalize olmuş etkileşme serbest alan limitinde yok olmaktadır. Bu tahminler bilgisayar simülasyonunda gözlemlenebilir.

Kritik bölgede korelasyon uzunluğu ıraksar ve bilgisayar simülasyon sonuçlarında sonlu boyut etkileri önemli olabilir. Üst kritik boyutta sonlu sistemler için Rudnick

ve arkadaşları (83) tarafından analiz edilen renormalizasyon grup, ortalama alan sonlu örgü ölçekleme tahminleri için boyuta bağlı logaritmik düzeltmeleri tahmin eder. Özıısı için sonlu boyut, logaritmik bağımlılığı dört boyutlu Ising sistemlerin simülasyonunda gözlenebilir.

ϕ^4 teorisi için manyetik alınganlık, dördüncü alan türevi ve korelasyon uzunluğu aşağıda gösterilmektedir.

$$\chi \sim |\log|t||^{1/3} \quad (4.4)$$

$$\chi^{(4)} \sim t^{-\gamma-2\Delta} |\log|t||^{1/3} \quad (4.5)$$

$$\gamma(t) \sim t^{-\nu} |\log|t||^{1/6} \quad (4.6)$$

Kritik nokta yakınında yukarıdaki niceliklerin aldığı tüm üsler ortalama alan değerindedir ($\nu = 1/2, \gamma = 1, \Delta = 3/2$). Böylece dört boyutta renormalizasyon grup, kritik nokta yakınında Gaussian alan teorisini tahmin eder. Fakat ortalama alan davranışı logaritmik düzeltmelere sahiptir. Nümerik simülasyon için Binder ve arkadaşları (80) tarafından kullanılan periyodik sınır koşulu ile sonlu soyut küp ('hypercubic') hücrelerden oluşan bir örgü için korelasyon uzunluğu;

$$2d \xi_L^2 = \frac{\sum_{i,j} (r_i - r_j)^2 (\langle s_i s_j \rangle - c_L)}{\sum_{i,j} (\langle s_i s_j \rangle - c_L)} \quad (4.7)$$

dir. Burada r_i , i hücresinde s_i spininin konumudur. $c_L = (1/L^d) \sum_i \langle s_i s_i \rangle$ ve i'

$r_{i'} = r_i + \frac{1}{2}(1,1,1,1)L$ 'deki uzunluğun ölçekleme fonksiyonları

$$\xi_L(t) = LZ(tL^{1/\nu} |\log t|^{1/3}) \quad (4.8)$$

dır. Burada $x \gg 1$ için $Z(x) \sim x^{-\nu}$ 'dür. Serbest enerji için türetilen nicelikler, sonlu boyutlu renormalize olmuş etkileşme, manyetik alınganlık ve özısı gibidir. Korelasyon uzunluğuna göre daha yavaş ıraksayan ikinci bir ölçekleme uzunluğunun varlığından dolayı $d \geq 4$ için sonlu örgü ölçekleme bozulması denenmemiştir. Renormalize olmuş etkileşmeyi çalışmak için sonlu renormalize olmuş etkileşme (g_R), Binder tarafından aşağıdaki şekilde sunulmuştur.

$$g_L = \frac{\chi_L^{(4)}}{L^d \chi_L^2} \quad (4.9)$$

Burada χ_L manyetik alınganlık ve $\chi_L^{(4)}$ dördüncü alan türevidir. L sonlu boyuta benzer nicelikleri gösterir. d=4 için renormalize olmuş ortalama alan yaklaşımında

$$g_L(t) = G(tL^{y_L^*} (\log L)^{1/6}) \quad (4.10)$$

d=4 olduğu zaman;

$$y_L^* = \frac{1}{\nu} = 2 \quad (4.11)$$

g_L , L/ξ olduğu zaman ölçeklenmez. g_L 'nin 'bulk' değerinden $G(x)$, $x \gg 1$ için

$$G(x) \sim x^{-d/y_L^*} \quad (4.12)$$

teorilerden tahmin edildiği gibi $g_R \rightarrow 0$ serbest alan limit durumu yaklaşımını gözlemlemek için $t > 0$ durumunda $\xi_L(t) = cL$ parametresi kullanılmıştır. Burada c kararlı sabittir. Bu parametreler altında renormalize olmuş etkileşme (g_R) sonlu boyutlu renormalize olmuş etkileşmenin büyük L limit durumu göz önüne alınarak çalışılabilir. Büyük L limit durumunda;

$$g_R \propto g_L \quad (4.13)$$

4.8, 4.10 ve 4.12 eşitlikleri kullanılarak sonlu örgü ölçekleme, büyük L limit durumu için;

$$g_L = [Z^{-1}(c)L^{y_T^* - 1/\nu} (\log L)^{1/6} \left| \frac{1}{\nu} \log L - \log Z^{-1}(c) + O(\log L) \right|^{1/3}] \quad (4.14)$$

$$g_L \sim L^{-\omega^*} |\log L|^{-d/2 y_T^*} \quad (4.15)$$

olur. Eğer renormalizasyon grup sonuçları doğruysa $y_T^* = 2$, $\omega^* = 0$ 'dır ve g_L , $d = 4(\text{Log}L)^{-1}$ olduğu zaman sıfıra yaklaşır. Renormalize olmuş etkileşme (g_R), dört boyutta kritik bölgede kaybolur ve renormalize olmuş etkileşme 'bulk' limit durumunda $t^{-1/y_T^*} |\log t|^{-1/6 y_T^*}$ olduğu zaman ikinci bir ölçekleme uzunluğunun varlığını verir. Bu $\xi \sim t^{-\nu} |\log t|^{\nu/3}$ korelasyon uzunluğunun ıraksamasına ilave getirir.

Bu $d > 4$ durumuna benzer olup $\xi \sim t^{-1/2}$ 'dir. Fakat $t^{-2/d}$ olduğu zaman ikinci uzunluk ölçeklenmesi korelasyon uzunluğuna göre daha yavaş ıraksar. $d=4$ için logaritmik düzeltmenin varlığından dolayı manyetik alınganlık ve özısı gibi sonlu örgü serbest enerjisinden türetilen nicelikler ölçekleme değişkeninin bir ölçekleme formuna konulmayabilir. Fakat $d=4$ durumunda ilk en etkin logaritmik düzeltmelerle ilgilenilirse renormalize olmuş ortalama alan hesabı yeterlidir ve ölçekleme formları

yaklaşımın bu seviyesinde elde edilebilir. Özısının sonlu örgü davranışı Rudnick ve arkadaşları (83) tarafından hesaplanmıştır. Benzer teknikler kullanılarak dört boyutta özısı, dördüncü alan türevi ve manyetik alınganlığın sonlu örgü ölçekleme davranışı sonlu örgü ölçekleme teorisi kullanılarak türetilmiştir. ϕ^4 modeli için;

$$\frac{du(\rho)}{d \ln \rho} = \omega(u(\rho)) \quad (4.16)$$

$$\frac{\rho^2 dt(\rho)}{d \ln \rho} = \gamma_{\phi^2}(u(\rho)) \rho^2 t(\rho) \quad (4.17)$$

$$\frac{dm(\rho)}{d \ln \rho} = -\frac{\eta(u(\rho))m(\rho)}{2} \quad (4.18)$$

$d=4$ 'de $\omega(u) = \frac{3}{2} S_d u^2$, $\eta(u) = \frac{1}{24} u^2$ ve $\gamma_{\phi^2}(u) = \frac{1}{2} S_d u$ 'dir.

$S_d^{-1} = 2^{d-1} \pi^{d/2} \Gamma(d/2)$ dir. 4.16 ve 4.17 eşitliklerinin integrali alınırsa;

$$u(\rho) = \frac{u}{1 - \frac{3}{2} S_d u \ln \rho} \quad (4.19)$$

$$\rho^2(t) \rho = t \left[\frac{u(\rho)}{u} \right]^{1/3} \quad (4.20)$$

elde edilir. Burada u , t ve m , $\rho=1$ 'de sırasıyla etkileşme, sıcaklık ve manyetizasyondur. Böylece $\rho \rightarrow 0$ olduğu zaman $u(\rho) \rightarrow 0$ olmakta saçılmanın olmadığı önemsiz alan teorisine yaklaşılmaktadır. ρ detaylı hesaplamalar için ρ^* olarak seçilmelidir. ρ^* ise,

$$\rho^{*2} t(\rho^*) + \frac{1}{2} u(\rho^*) \langle m^2(\rho^*) \rangle + \frac{1}{L^2} = (\kappa \rho^*)^2 \quad (4.21)$$

Renormalize olmuş ortalama alan seviyesinde, $\langle \rangle$ ortalama alan hamilton işlemcisini içermektedir ve serbest enerji sadece z değişkenine bağlıdır. Burada z ;

$$z \equiv L^2 \rho^{*2} t(\rho^*) / [u(\rho^*)]^{1/2} \quad (4.22)$$

Eşitlik 4.19 ve 4.20 kullanılarak;

$$z \equiv \frac{iL^2}{u^{1/3}} \left(1 - \frac{3}{2} S_d u \log \rho^*\right)^{1/6} \quad (4.23)$$

m ölçekleme formuna sahip olup

$$\langle m^{2j}(\rho^*) \rangle = [u(\rho^*) L^4]^{-j/2} D_j(z) \quad (4.24)$$

$$D_j(x) = \frac{\int_0^\infty d\phi \phi^2 \exp(-x\phi^2/2 + \phi^4/4!)}{\int_0^\infty d\phi \exp(-x\phi^2/2 + \phi^4/4!)} \quad (4.25)$$

Sonsuz örgü bölgesinde;

$$\rho^* \equiv (L\kappa)^{-1} \quad (4.26)$$

'Bulk' limitinde $\rho^{*2} t(\rho^*) + \frac{1}{2} u(\rho^*) \langle m^2(\rho^*) \rangle = (\kappa\rho^*)^2$ dir ve böylece

$$\log \rho^* \equiv \log \frac{1}{\kappa^2} O(\log \log t) \quad (4.27)$$

Bu noktada serbest enerjiden türetilen nicelikler $t^{-1/2} (1 - \frac{3}{2} S_d u \log \rho^*)^{-1/12}$ gibi karakteristik ölçekleme uzunluğuna sahiptir. Bu ifade korelasyon uzunluğundan farklıdır ve $d=4$ 'te denenmiş sonlu örgü ölçeklemenin bozulmasına götürür. 'Bulk' limitinde bu serbest enerji uzunluk ölçeklemesi $t^{-1/2} |\log t|^{-1/12}$ gider. Bu ölçekleme korelasyon uzunluğundan daha yavaş ıraksar ve böylece kritik bölgede $\rho \rightarrow 0$ olur. Sonlu örgü alınganlığı aşağıdaki formda verilmektedir.

$$\chi_L(t) = L^4 \langle m^2(\rho^*) \rangle \quad (4.28)$$

$$\chi_L(t) \sim \frac{L^2}{[u(\rho^*)]^{1/2}} D_1(z) \quad (4.29)$$

Böylece $L_K \gg 1$ ölçekleme bölgesinde eşitlik 4.29;

$$\chi_L(t) \sim L^2 \sqrt{\log L_K} D_1(tL^2 (\log L_K)^{1/6}) \quad (4.30)$$

olmaktadır ve $L_K \gg \kappa$ için

$$\chi_L(t) = \chi_L(0) \psi(0), \quad \chi_L(0) \sim L^2 \sqrt{\log L} \quad (4.31)$$

Benzer yolla $\chi_L^{(4)}(t)$ renormalize olmuş ortalama alan seviyesinde sonlu örgü ölçekleme formuna sahip olarak gösterilebilir.

$$\chi_L^{(4)}(t) \sim L^8 (\log L_K) [D_2(tL^2 (\log L_K)^{1/6}) - 3D_1^2(tL^2 (\log L_K)^{1/6})] \quad (4.32)$$

Eşitlik 4.2 ve 4.3 ‘Bulk’ limitinde $x \gg 1$ için

$$D_1(x) \sim x^{-2} \quad (4.33)$$

$$D_2(x) - 3D_1^2(x) \sim x^{-4} \quad (4.34)$$

Renormalize olmuş ortalama alan seviyesinde sonlu boyutlu renormalize olmuş etkileşme aşağıdaki ölçekleme formuna sahiptir.

$$g_L(t) = \frac{D_2(z)}{D_1^2(z)} - 3 \equiv G(z) \quad (4.35)$$

ve $x \gg 1$ için

$$G(x) \sim x^{-2} \quad (4.36)$$

Özısı içinde benzer şekilde yazılırsa;

$$C_L(t) \sim (\log L_K)^{-1/3} \phi(tL^2 (\log L_K)^{1/6}) \quad (4.37)$$

Burada ϕ renormalize olmuş ortalama alan seviyesinde ölçekleme değişkenine göre serbest enerjinin ikinci türevidir.

Tüm bunlardan renormalize olmuş ortalama alan seviyesinde, $h=0$ durumunda özısı, manyetik alınganlığın dördüncü alan türevi, manyetik alınganlık, manyetizasyon,

renormalize olmuş eşleşme sabiti (Binder parametresi)'nin sonlu örgü ölçekleme davranışı;

$$\chi_L(t) = -\frac{\partial^2 f_L}{\partial h^2} = L^{\gamma/\nu} \sqrt{\log L} \psi(x) \quad (4.38)$$

$$\chi_L^{(4)} = -\frac{\partial^4 f_L}{\partial h^4} = L^{(\gamma+2\Delta)/\nu} \log L \quad (4.39)$$

$$C_L(t) = -\frac{\partial^2 f_L}{\partial t^2} = L^{\alpha/\nu} (\log L)^{1/3} \phi(x), \alpha = 0 \quad (4.40)$$

$$m_L(t) = -\frac{\partial f_L}{\partial h} = L^{-\beta/\nu} \sqrt[4]{\log L} \psi(x) \quad (4.41)$$

$$g_L(t) = \frac{\chi_L^{(4)}}{L^4 \chi_L^2} = G(x) \quad (4.42)$$

dır. Burada $x = tL^{y_T^{**}} (\log L)^{1/6}$, $y_T^{**} = \frac{1}{\nu}$ 'dir. d=4 durumunda $\nu = \frac{1}{2}, \gamma = 1, \Delta = \frac{3}{2}$ olduğundan yukarıdaki sonlu örgü ölçekleme davranışı aşağıdaki gibi olmaktadır.

$$\chi_L(t) = \chi_L(0) \psi(x) \quad \chi_L(0) \sim L^2 \sqrt{\log L} \quad (4.43)$$

$$\chi_L^{(4)} = \chi_L^{(4)}(0) \psi(x) \quad \chi_L^{(4)} \sim L^8 \log L \quad (4.44)$$

$$C_L(t) = C_L(0) \phi(x) \quad C_L(0) \sim (\log L)^{1/3} \quad (4.45)$$

$$M_L(t) = M_L(0) \psi(x) \quad M_L(0) \sim L^{-1} \sqrt[4]{\log L} \quad (4.46)$$

$$g_L(t) = \frac{\chi_L^{(4)}}{L^4 \chi_L^2} = G(x) \quad (4.47)$$

Burada $x = tL^2 (\log L)^{1/6}$ 'dır. Bu sonlu boyutlu niceliklerin Rudnick ve arkadaşları (83) tarafından özısının teorik alan hesaplaması ile uyum halinde olduğu $t_{\max}^{-1} \sim$

$L^2(\log L)^{1/6}$ ile t_{\max} pikinde gösterilmiştir. Korelasyon fonksiyonu Binder ve arkadaşları (63) tarafından tartışıldığı gibi tehlikeli ilgisiz değişkenlere sahip olabilir. Bu durumda eşitlik 4.4 aşağıdaki gibi değişebilir.

$$\xi_L(t) = L^{1+q_1 y_1} Z(tL^{y_T^*} |\log|t||^{-1/3}) \quad (4.48)$$

Burada $q_1 y_1 \leq 0$ ve $\nu = (1 + q_1 y_1) / y_T^*$ 'dir. $d_u > d$ için periyodik sınır şartlı L^d hypercubic sonlu bir sistemin serbest enerji yoğunluğunun 'singüler' kısmı $f_L^S(t, h)$ Privman ve Fisher tarafından aşağıdaki şekilde verilmiştir.

$$f_L^{(s)}(t, h) = L^{-d} Y(C_1 t L^{1/\nu}, C_2 h L^{\Delta/\nu}), \quad t \rightarrow 0, h \rightarrow 0, L \rightarrow \infty \quad (4.49)$$

Burada Δ 'gap' üssü, ν sonsuz sistem için korelasyon uzunluğu kritik üssü, $t = (T - T_c) / T_c$ indirgenmiş sıcaklık, h indirgenmiş dış manyetik alandır. C_1 ve C_2 ölçekleme çarpanları (faktörleri) sisteme bağlı evrensel olmayan parametrelerdir. Yani ölçekleme fonksiyonu $Y(x, y)$ evrenseldir. Eşitlik 4.49, $d=4$ boyutlu Ising modeline $T = T_c$ 'deki χ_L ve C_L için mevcut olan ölçekleme bağıntıları göz önüne alınarak, uyarlanırsa periyodik sınır şartlı L^d 'hypercubic' sonlu bir sistemin serbest enerji yoğunluğunun singüler kısmı

$$f_L^{(s)}(t, h) = L^{-4} Y(C_1 t L^2 \log^{1/6} L, C_2 h L^3 \log^{1/4} L), \quad t \rightarrow 0, h \rightarrow 0, L \rightarrow \infty \quad (4.50)$$

olur. Eşitlik 4.50 kullanılarak manyetizasyon $M_L(t, h)$, manyetik alınganlık $\chi_L(t, h)$, özısının singüler kısmı $C_L^S(t, h)$ ve Binder 'cumulant'ı $g_L(t, h)$ için sonlu örgü ölçekleme ifadeleri;

$$M_L(t, h) = -\frac{\partial f_L}{\partial h} = L^{-1} \log^{1/4}(L) C_2 U(C_1 t L^2 \log^{1/6} L, C_2 h L^3 \log^{1/4} L) \quad (4.51)$$

$$\chi_L(t, h) = -\frac{\partial^2 f_L}{\partial h^2} = L^2 \log^{1/2}(L) C_2^2 V(C_1 t L^2 \log^{1/6} L, C_2 h L^3 \log^{1/4} L) \quad (4.52)$$

$$C_L^{(s)}(t, h) = -\frac{\partial^2 f_L}{\partial t^2} = \log^{1/3}(L) C_1^2 W(C_1 t L^2 \log^{1/6} L, C_2 h L^3 \log^{1/4} L) \quad (4.53)$$

$$g_L(t) = \frac{\chi_L^{(4)}}{L^4 \chi_L^2} = G(C_1 t L^2 \log^{1/6} L, C_2 h L^3 \log^{1/4} L) \quad (4.54)$$

$$\chi_L^{(4)} = -\frac{\partial^4 f_L}{\partial h^4}$$

dir. Bu eşitlikler daha genel şekilde aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$M_L(t, h) = L^{-\beta/\nu} \log^{1/4}(L) C_2 U(C_1 t L^2 \log^{1/6} L, C_2 h L^3 \log^{1/4} L) \quad (4.55)$$

$$\chi_L(t, h) = L^{\gamma/\nu} \log^{1/2}(L) C_2^2 V(C_1 t L^2 \log^{1/6} L, C_2 h L^3 \log^{1/4} L) \quad (4.56)$$

$$C_L^{(s)}(t, h) = L^{\alpha/\nu} \log^{1/3}(L) C_1^2 W(C_1 t L^2 \log^{1/6} L, C_2 h L^3 \log^{1/4} L) \quad (4.57)$$

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

5. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Dört Boyutlu Ising modelinin, doğrusal boyutu $L= 4, 6, 8$ olan periyodik sınır şartlı örgülerde ve sonsuz örgü kritik sıcaklığı yakınında dört 'bit'li demonlar ile Creutz 'cellular automaton'ında her bir enerjideki simülasyon sayısı artırılarak simülasyonu yapılmaktadır. Her bir toplam enerji için 7, 14, 21 kez simülasyon sayısı artırılarak simülasyonlar yapılmaktadır. Her bir bağımsız simülasyonda $L= 4, 6$ ve 8 örgüleri için 9.6×10^5 kere örgünün bütün spinlerine ters çevirme kuralı uygulanmaktadır. Sonlu örgü ölçekleme bağıntıları kullanılarak, sonlu örgü kritik sıcaklık değerlerinden $(T_c^X(L), T_c^C(L))$ (Çizelge 5.1., Çizelge 5.3. ve Şekil 5.1., Şekil 5.2.) sonsuz örgü kritik sıcaklık değerleri $(T_c^X(\infty), T_c^C(\infty))$ 7, 14, 21 bağımsız simülasyonlar için hesaplanmıştır. Sonsuz örgü kritik sıcaklığında geçerli olan ölçekleme bağıntıları kullanılarak düzen parametresi (Şekil 5.5., Çizelge 5.6.), manyetik alınganlık (Şekil 5.6., Şekil 5.7., Çizelge 5.6., Çizelge 5.7.), özısı (Şekil 5.8., Çizelge 5.8.) için kritik üsler elde edilmektedir. Sonlu örgü ölçekleme bağıntıları kullanılarak Binder parametresinin sıcaklığa bağlı değişimleri ile bu niceliklerin ölçeklenmiş değerlerinin ölçeklenmiş sıcaklığa bağlı değişimleri incelenip, bu nicelikler için teorinin öngördüğü ölçekleme bağıntılarının doğruluğu denenmektedir. Sonsuz örgü kritik sıcaklığı, 7, 14, 21 bağımsız simülasyonlar için Binder parametresi eğrilerinin kesişme noktasından, manyetik alınganlık ve özısı maksimumlarına karşılık gelen sıcaklık değerlerinden elde edilmektedir.

5.1.Sonlu Örgü Sıcaklık Değerlerinden Sonsuz Örgü Sıcaklık Değerlerinden

Elde Edilmesi

Sonlu örgü kritik sıcaklık değerleri ile sonsuz örgü kritik sıcaklık değerleri arasındaki bağıntı (83) eşitlik 5.1, 5.2, 5.3, 5.4'deki gibi verilmiştir.

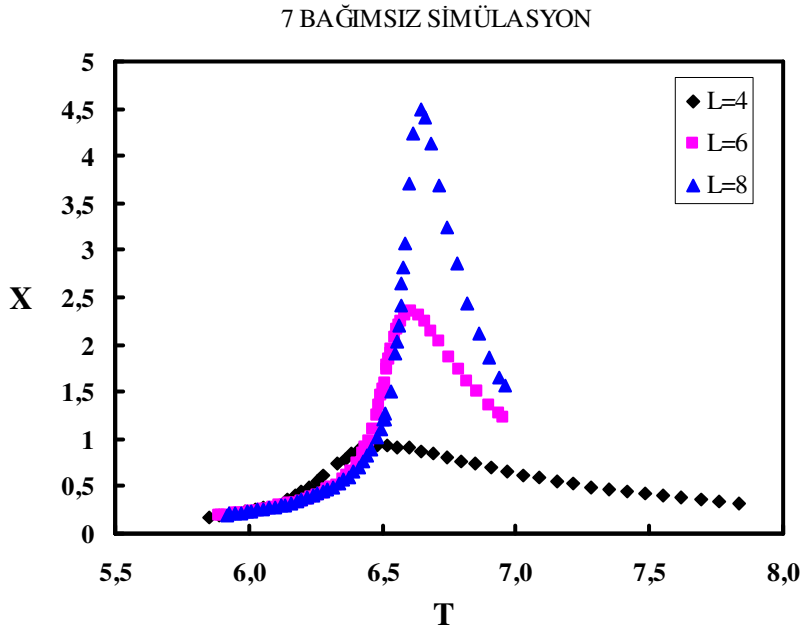
$$T_c^X(\infty) - T_c^X(L) \propto L^{-1/\nu} \quad (5.1)$$

$$T_c^{\chi}(\infty) - T_c^{\chi}(L) \alpha L^{-1/\nu} \text{Log}^{-1/6} L \quad (5.2)$$

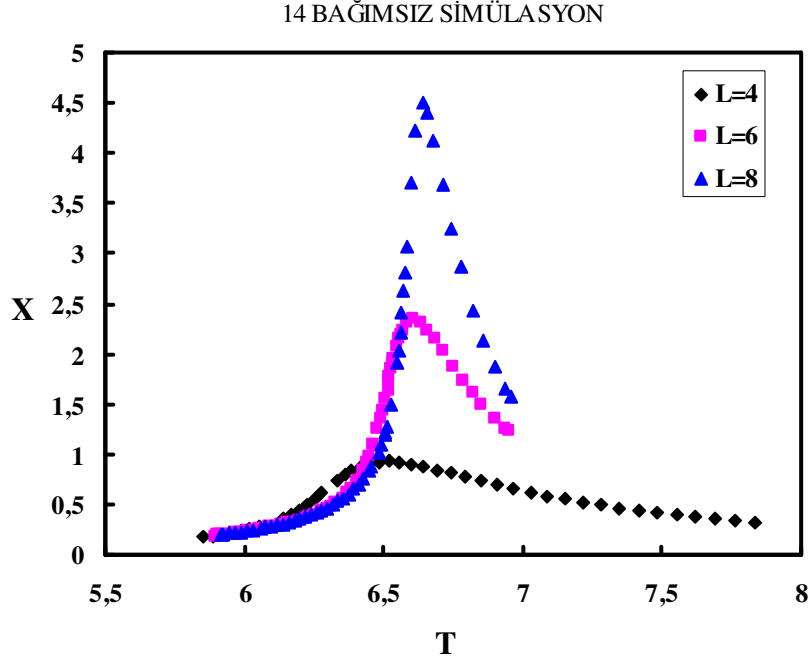
$$T_c^C(\infty) - T_c^C(L) \alpha L^{-1/\nu} \quad (5.3)$$

$$T_c^C(\infty) - T_c^C(L) \alpha L^{-1/\nu} \text{Log}^{-1/6} L \quad (5.4)$$

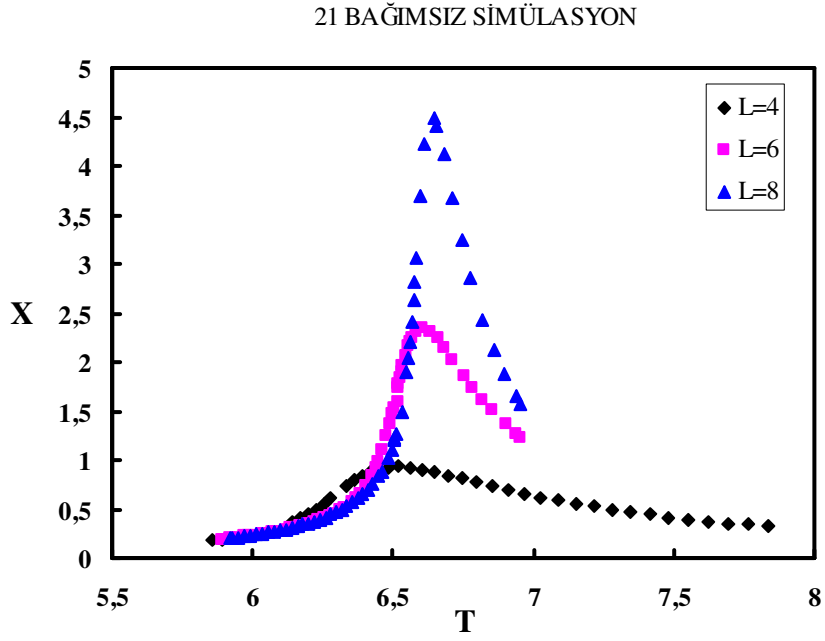
Sonlu örgü sıcaklık değerlerinden sonsuz örgü sıcaklık değerlerinin bulunmasında özısı ve manyetik alınganlığın maksimum olduğu sıcaklık değerleri kullanılabilir. Ancak dört boyutlu Ising modeli için sırası ile Şekil 5.1. ve Şekil 5.2.'dende görüldüğü gibi manyetik alınganlığın maksimumları özısınıninkilere göre daha sivri ve daha yüksek olduğundan $T_c^{\chi}(L)$ değerleri ile elde edilen $T_c(\infty)$ değerleri daha hassas olacaktır. Manyetik alınganlık ve özısı için değerler çizelge 5.1. ve çizelge 5.2.'de verilmektedir.



Şekil 5.1.a. 7 bağımsız simülasyon için manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişimi



Şekil 5.1.b. 14 bağımsız simülasyon için manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişimi



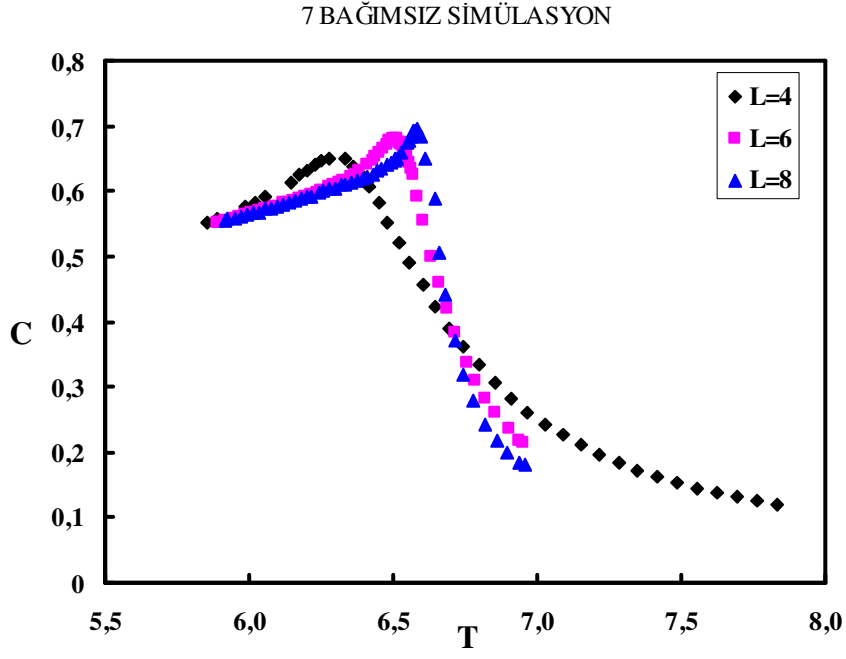
Şekil 5.1.c. 21 bağımsız simülasyon için manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişimi

Çizelge 5.1. $L= 4, 6, 8$ örgüler ve $7, 14, 21$ bağımsız simülasyonlar için manyetik alınganlığın maksimumlarından elde edilen sonlu örgü kritik sıcaklık değerleri

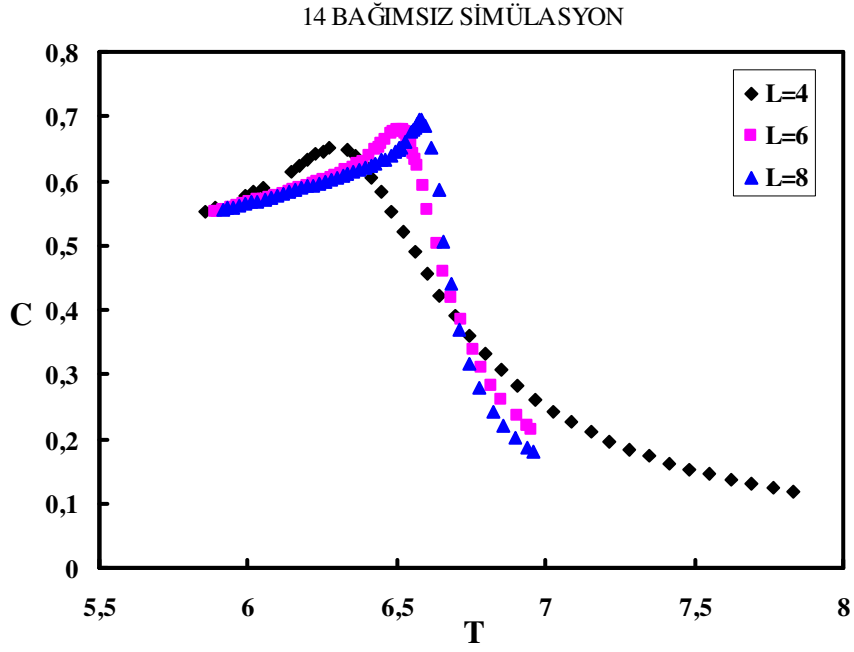
L	$T_c^{\chi}(L)$	χ_{\max}	Simülasyon Sayısı
4	6.5184	0.9296	7
6	6.6041	2.3417	7
8	6.6453	4.4932	7
4	6.5186	0.9293	14
6	6.6045	2.3425	14
8	6.6463	4.4944	14
4	6.5188	0.9290	21
6	6.6048	2.3432	21
8	6.6467	4.4978	21

Çizelge 5.2. Sonsuz örgü kritik sıcaklığından $T_c = 6.6802(2)$ ve $L = 4, 6, 8$ örgülerinde 7, 14, 21 bağımsız simülasyonlar için manyetik alınganlık değerleri

L	χ_c	Simülasyon Sayısı
4	0.8540	7
6	2.1601	7
8	4.1274	7
4	0.8540	14
6	2.1607	14
8	4.1278	14
4	0.8536	21
6	2.1605	21
8	4.1278	21

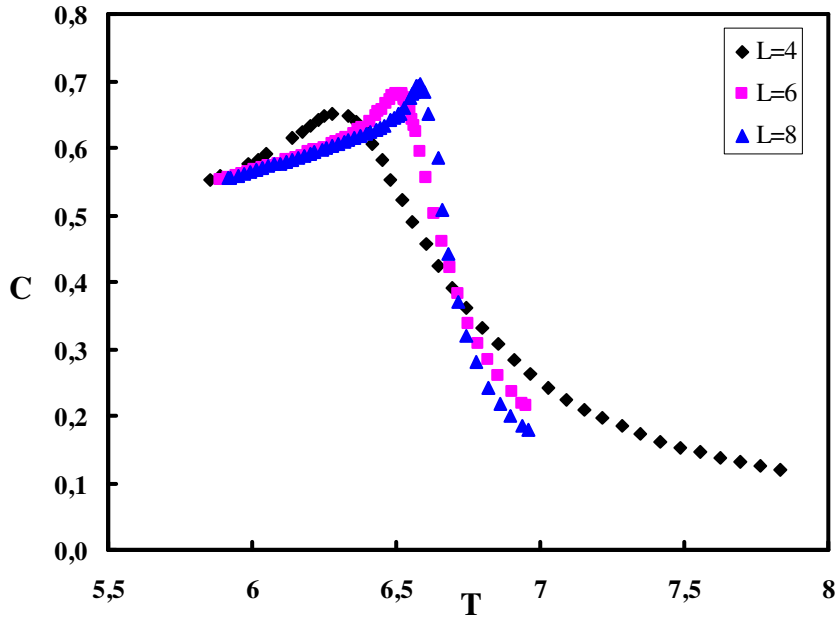


Şekil 5.2.a. 7 bağımsız simülasyon için özısının sıcaklıkla değişimi



Şekil 5.2.b. 14 bağımsız simülasyon için özısının sıcaklıkla değişimi

21 BAĞIMSIZ SİMÜLASYON



Şekil 5.2.c. 21 bağımsız simülasyon için özısının sıcaklıkla değişimi

Şekil 5.2.a., Şekil 5.2.b., Şekil 5.2.c.'den görüldüğü gibi, özısı eğrilerinin kesişmesinden 7, 14, 21 bağımsız simülasyonlar için $T_c(\infty)=6.6967$, $T_c(\infty)=6.6962$, $T_c(\infty)=6.6961$ değerleri elde edilmektedir. Simülasyon sayısı artırıldığı zaman elde edilen $T_c(\infty)=6.6961$ değerinin renormalizasyon grup $T_c = 6.6802$, $T_c = 6.6820$ (68), Monte Carlo $T_c = 6.6800$, $T_c = 6.6803$ (89) değerleri ile daha uyumlu olduğu görülmektedir.

Şekil 5.2.a., Şekil 5.2.b., Şekil 5.2.c'de L= 4, 6, 8 örgüler ve 7, 14, 21 bağımsız simülasyonlar için özısı eğrilerinin maksimumlarından elde sonlu kritik örgü sıcaklık değerleri Çizelge 5.3.'de gösterilmiştir.

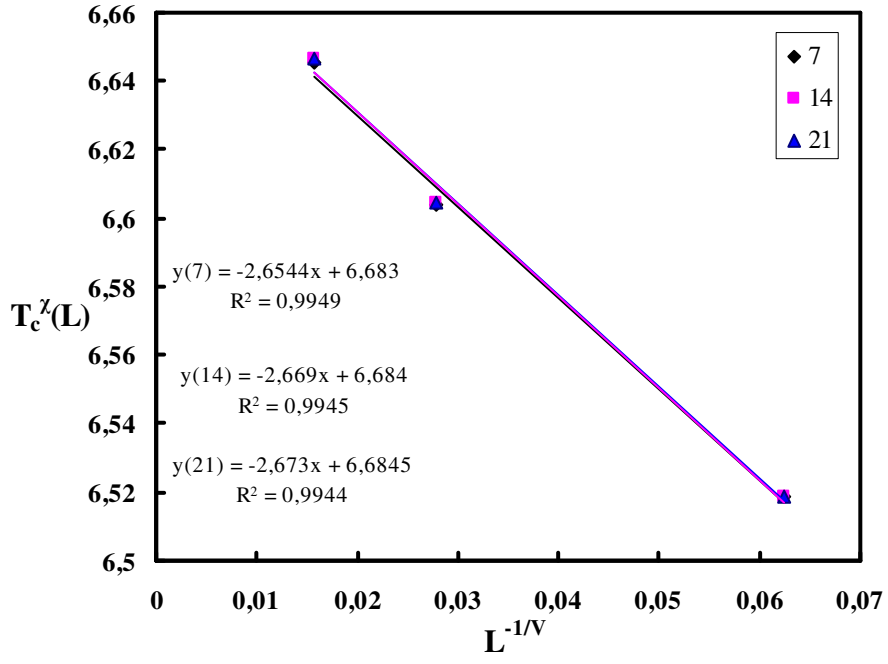
Çizelge 5.3. L= 4, 6, 8 örgüler ve 7, 14, 21 bağımsız simülasyonlar için özısının maksimumlarından elde edilen sonlu örgü kritik sıcaklık değerleri

L	$T_c^C(L)$	C_{\max}	Simülasyon Sayısı
4	6.2748	0.6509	7
6	6.5163	0.6806	7
8	6.5823	0.6952	7
4	6.2758	0.6508	14
6	6.5164	0.6803	14
8	6.5824	0.6951	14
4	6.2792	0.6511	21
6	6.5167	0.6802	21
8	6.5827	0.6949	21

Şekil 5.2.a., Şekil 5.2.b., Şekil 5.2.c'de $L= 4, 6, 8$ örgüler ve 7, 14, 21 bağımsız simülasyonlar için sonsuz örgü kritik sıcaklığında öz ısı değerleri Çizelge 5.4.'te gösterilmektedir. Elde edilen değerlerdende anlaşılacağı üzere simülasyon sayısı arttıkça literatür değerlerine yakın değerler elde edilmiştir.

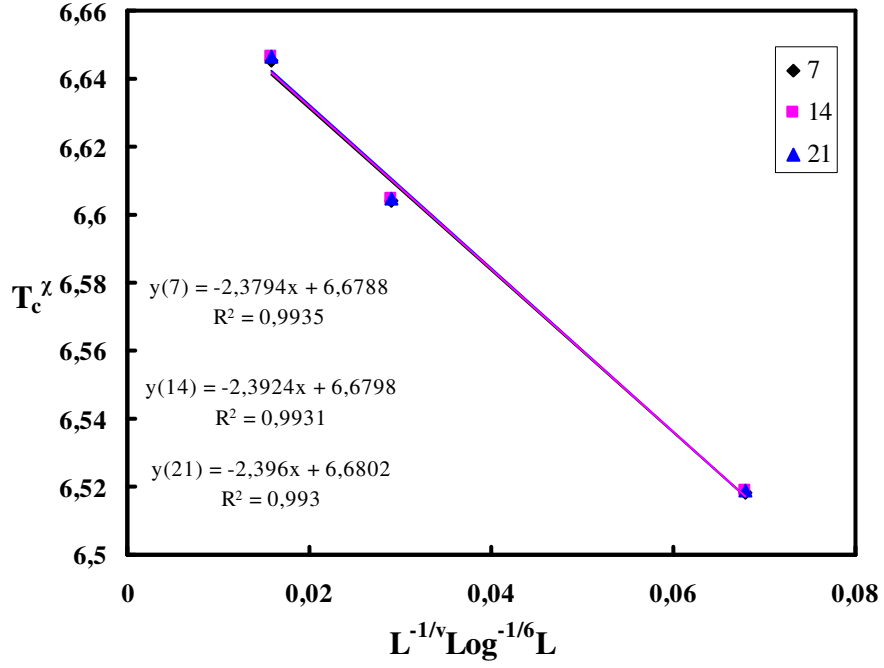
Çizelge 5.4. Sonsuz örgü kritik sıcaklığında $T_c = 6.6802(2)$ ve $L= 4, 6, 8$ örgülerinde 7, 14, 21 bağımsız simülasyonlar için özısı değerleri

L	C_c	Simülasyon Sayısı
4	0.3994	7
6	0.4266	7
8	0.4406	7
4	0.3995	14
6	0.4268	14
8	0.4405	14
4	0.3992	21
6	0.4269	21
8	0.4402	21



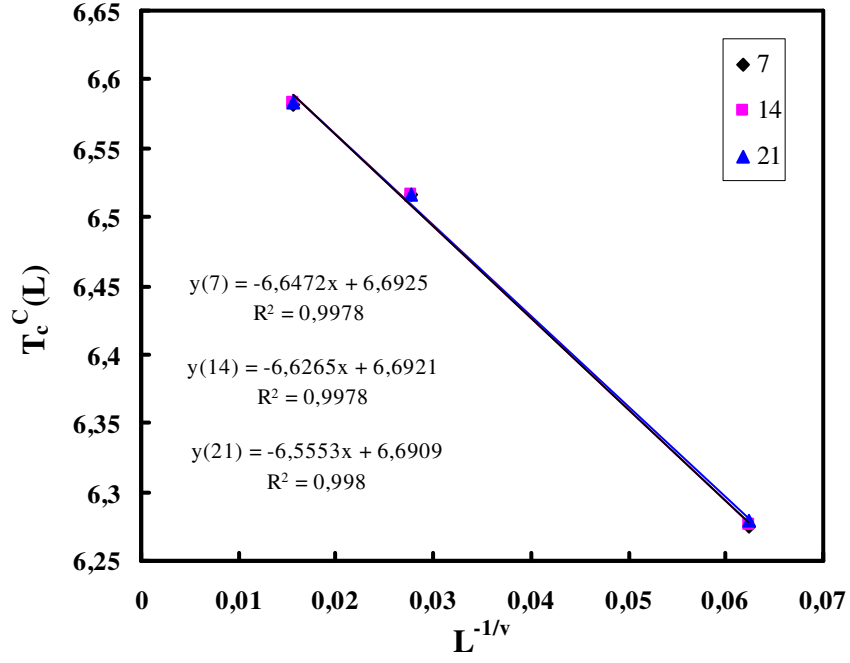
Şekil 5.3.a. $L=4, 6, 8$ örgüler ve $7, 14, 21$ bağımsız simülasyonlar için $L^{-1/v}$ 'ye karşı

$$T_c^z(L) \text{ (Düzeltilmesiz) grafiği } \left(\nu = \frac{1}{2} \right)$$



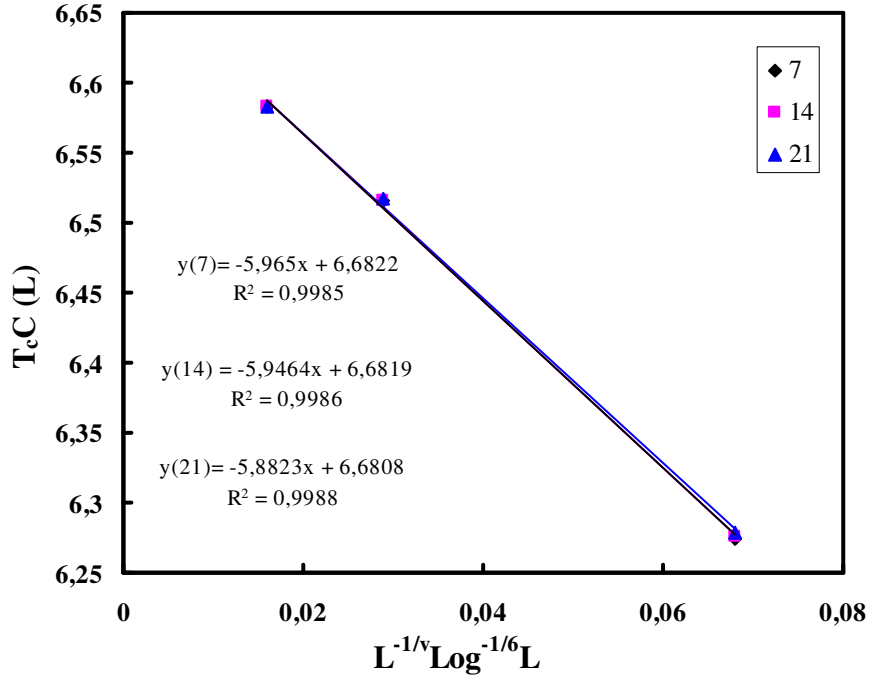
Şekil 5.3.b. $L= 4, 6, 8$ örgüler ve 7, 14, 21 bağımsız simülasyonlar için

$$L^{-1/\nu} \text{Log}^{-1/6} L \text{ 'ye karşı } T_c^z(L) \text{ (Düzeltilmeli) grafiği } \left(\nu = \frac{1}{2} \right)$$



Şekil 5.4.a. $L = 4, 6, 8$ örgüler ve 7, 14, 21 bağımsız simülasyonlar için $L^{-1/\nu}$ 'ye

karşı $T_c^C(L)$ (Düzeltilmesiz) grafiği $\left(\nu = \frac{1}{2}\right)$



Şekil 5.4.b. L= 4, 6, 8 örgüler ve 7, 14, 21 bağımsız simülasyonlar için

$$L^{-1/\nu} \text{Log}^{-1/6} L \text{ 'ye karşı } T_c^C \text{ (Düzeltilmeli) grafiği } \left(\nu = \frac{1}{2} \right)$$

$T_c^Z(L)$ ve $T_c^C(L)$ değerleri eşitlik 5.2, eşitlik 5.3, eşitlik 5.4 formülüne uydurularak Şekil 5.3. ve Şekil 5.4.'te çizilmiştir. Bu grafiklerdeki doğruların kesim noktalarından T_c sonsuz örgü kritik sıcaklık değerleri sırasıyla 7, 14, 21 bağımsız simülasyonlar için;

$$T_c^Z(\infty) = 6.6830 \text{ (7 Bağımsız Simülasyon için, Düzeltilmesiz)}$$

$$T_c^Z(\infty) = 6.6788 \text{ (7 Bağımsız Simülasyon için, Düzeltilmeli)}$$

$$T_c^Z(\infty) = 6.6840 \text{ (14 Bağımsız Simülasyon için Düzeltilmesiz)}$$

$$T_c^Z(\infty) = 6.6798 \text{ (14 Bağımsız Simülasyon için Düzeltilmeli)}$$

$$T_c^Z(\infty) = 6.6845 \text{ (21 Bağımsız Simülasyon için Düzeltmesiz)}$$

$$T_c^Z(\infty) = 6.6802 \text{ (21 Bağımsız Simülasyon için Düzeltmeli)}$$

$$T_c^C(\infty) = 6.6925 \text{ (7 Bağımsız Simülasyon için Düzeltmesiz)}$$

$$T_c^C(\infty) = 6.6822 \text{ (7 Bağımsız Simülasyon için Düzeltmeli)}$$

$$T_c^C(\infty) = 6.6921 \text{ (14 Bağımsız Simülasyon için Düzeltmesiz)}$$

$$T_c^C(\infty) = 6.6819 \text{ (14 Bağımsız Simülasyon için Düzeltmeli)}$$

$$T_c^C(\infty) = 6.6909 \text{ (21 Bağımsız Simülasyon için Düzeltmesiz)}$$

$$T_c^C(\infty) = 6.6908 \text{ (21 Bağımsız Simülasyon için Düzeltmeli)}$$

değerleri elde edilmiştir.

Çizelge 5.5. Dört boyutlu Ising modelinin farklı çalışmalardan elde edilen sonsuz örgü kritik sıcaklık değerleri

T_c			Yöntem
6.6802, 6.6820			Seri Açılımı (89)
6.6800, 6.6803			Monte Carlo (68)
6.6800, 6.6700			Creutz Cellular Automaton (44)
Düzeltilmesiz	Düzeltilmeli	Simülasyon Sayısı	Bu Çalışma
6.6830	6.6788	7	
6.6725	6.6822	7	
6.6840	6.6798	14	
6.6921	6.6819	14	
6.6845	6.6802	21	
6.6909	6.6808	21	

Çizelge 5.5. incelendiğinde simülasyon sayısı arttığı zaman elde edilen sonsuz örgü kritik sıcaklık değerlerinin diğer simülasyon çalışmaları ile daha uyumlu olduğu görülmektedir.

5.2. Statik Kritik Üsler

5.2.1. Düzen Parametresi İçin Kritik Üsler

Renormalizasyon grup teorisine göre sonsuz örgü için düzen parametresinin sıcaklığa bağılılığı (68, 83);

$$M\alpha^\beta \text{Log}^{1/3}t; \quad T \leq T_c, \quad T \rightarrow T_c \quad (5.5)$$

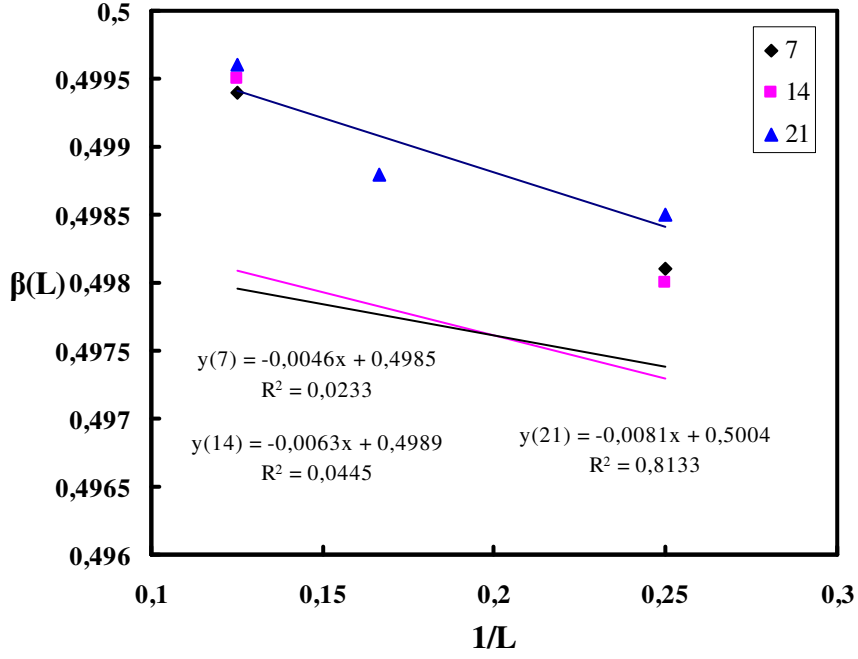
dir. Burada T_c sonsuz örgü için kritik sıcaklık, t ise indirgenmiş sıcaklıktır.

$$\left(t = \frac{T - T_c}{T_c} \right)$$

Kritik üssün etkin değeri $\bar{\beta}$ ise;

$$M\alpha^{\bar{\beta}}; \quad T < T_c, \quad T \rightarrow T_c \quad (5.6)$$

verilmektedir.



Şekil 5.5. 7, 14, 21 bağımsız simülasyonlar için $1/L$ 'ye karşılık $\beta(L)$ grafiği

Doğruların kesim noktaları $\beta = 0.4985$, $\beta = 0.4989$, $\beta = 0.5004$ değerlerini vermektedir. Eşitlik 5.5 ve eşitlik 5.6'dan yararlanılarak elde edilen kritik üsler çizelge 5.6.'da verilmektedir. Şekil 5.5.'te $1/L$ 'ye karşılık $\beta(L)$ grafikleri çizildiğinde doğruların kesim noktasından 7, 14, 21 bağımsız simülasyonlar için; $\beta = 0.4985$, $\beta = 0.4989$, $\beta = 0.5004$ değerleri elde edilmektedir. Elde edilen bu değerler $\beta = \frac{1}{2}$ teorik değeri ile uyum halindedir. Simülasyon sayısı arttığı zaman elde edilen kritik üs β 'nın değerinin teorik değeri ile daha uyumlu olduğu görülmektedir.

5.3. Manyetik Duyarlılık (Alınganlık) İçin Kritik Üs

Renormalizasyon grup teorisine göre sonsuz örgü için manyetik alınganlığın (χ) sıcaklığa bağımlılığı (68, 83);

$$\chi \alpha^{-\gamma} \text{Log}^{1/3} t; \quad T \rightarrow T_c \quad (5.7)$$

verilmektedir. Kritik üssün etkin değeri;

$$\chi \alpha^{-\bar{\gamma}}; \quad T \rightarrow T_c \quad (5.8)$$

verilmektedir.

Sonlu boyutlu örgülerin (L) manyetik alınganlığa (χ)bağılılığı;

$$\chi(L) \alpha L^{\gamma/\nu} \text{Log}^{1/2} L; \quad T_c(\infty) \quad (5.9)$$

verilmektedir. Eşitlik 5.7 ve 5.8'den yararlanılarak elde edilen kritik üsle çizelge 5.6.'da verilmektedir.

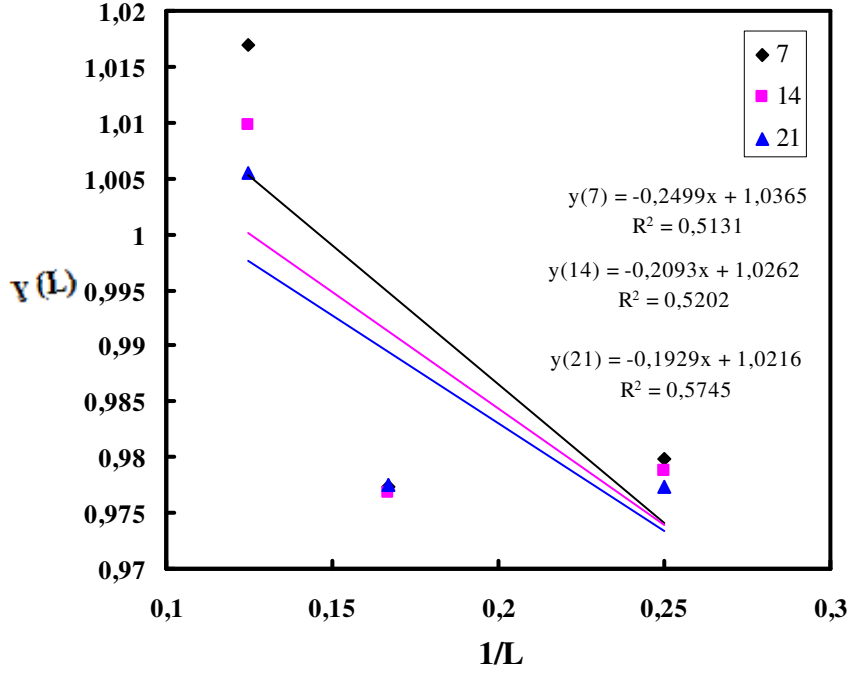
Çizelge 5.6. L= 4, 6, 8 örgüler ve 7, 14, 21 bağımsız simülasyonlar için β , $\bar{\beta}$

$(T \langle T_c = 6.6802, 0.04 \leq t \leq 0.1), \gamma, \bar{\gamma} (T \langle T_c = 6.6802, 0.04 \leq t \leq 0.1)$

ve $\gamma(L), \bar{\gamma}(L) (T \leq T_c^x(L) 0.04 \leq t \leq 0.1), \beta(L), \bar{\beta}(L) (T \leq T_c^x(L)$

$0.04 \leq t \leq 0.1)$ kritik üslerin değerleri

L	$\bar{\beta}(L)$	$\bar{\beta}$	$\bar{\gamma}(L)$	$\bar{\gamma}$	$\beta(L)$	β	(L)	γ	Simülasyon Sayısı
4	0.3977	0.4004	1.0942	1.1560	0.4981	0.4272	0.9799	1.0374	7
6	0.4149	0.4053	1.0662	1.0454	0.4956	0.5053	0.9773	0.9454	7
8	0.3946	0.4190	1.0939	1.1544	0.4994	0.4601	1.0170	1.0554	7
4	0.3977	0.4000	1.0929	1.1545	0.4980	0.4276	0.9787	1.0360	14
6	0.4150	0.4052	1.0657	1.0451	0.4957	0.5052	0.9768	0.9450	14
8	0.3812	0.4188	1.0867	1.1539	0.4995	0.5178	1.0097	1.0549	14
4	0.3982	0.3997	1.0917	1.1539	0.4985	0.4275	0.9774	1.0354	21
6	0.3493	0.4051	1.0664	1.0451	0.4988	0.5051	0.9775	0.9451	21
8	0.3770	0.4190	1.0824	1.1542	0.4996	0.5180	1.0055	1.0552	21



Şekil 5.6. 7, 14, 21 bağımsız simülasyonlar için $1/L$ 'ye karşılık $\gamma(L)$ grafikleri

Şekil 5.6.'da $1/L$ 'ye karşılık $\gamma(L)$ grafikleri çizildiğinde doğruların kesim noktasından 7, 14, 21 bağımsız simülasyonlar için $\gamma = 1.0366$, $\gamma = 1.0262$, $\gamma = 1.0216$ değerleri elde edilmektedir. Elde edilen bu değerler $\gamma = 1$ teorik değeri ile uyum halindedir. Simülasyon sayısı arttığı zaman elde edilen kritik üs γ 'nın değerinin teorik değerle daha uyumlu olduğu görülmektedir.

5.9 eşitliğinden yararlanılarak elde edilen kritik üsler $\left(\frac{\gamma}{v}\right)_c$, $\left(\frac{\gamma}{v}\right)_{\max}$ çizelge 5.7. ve

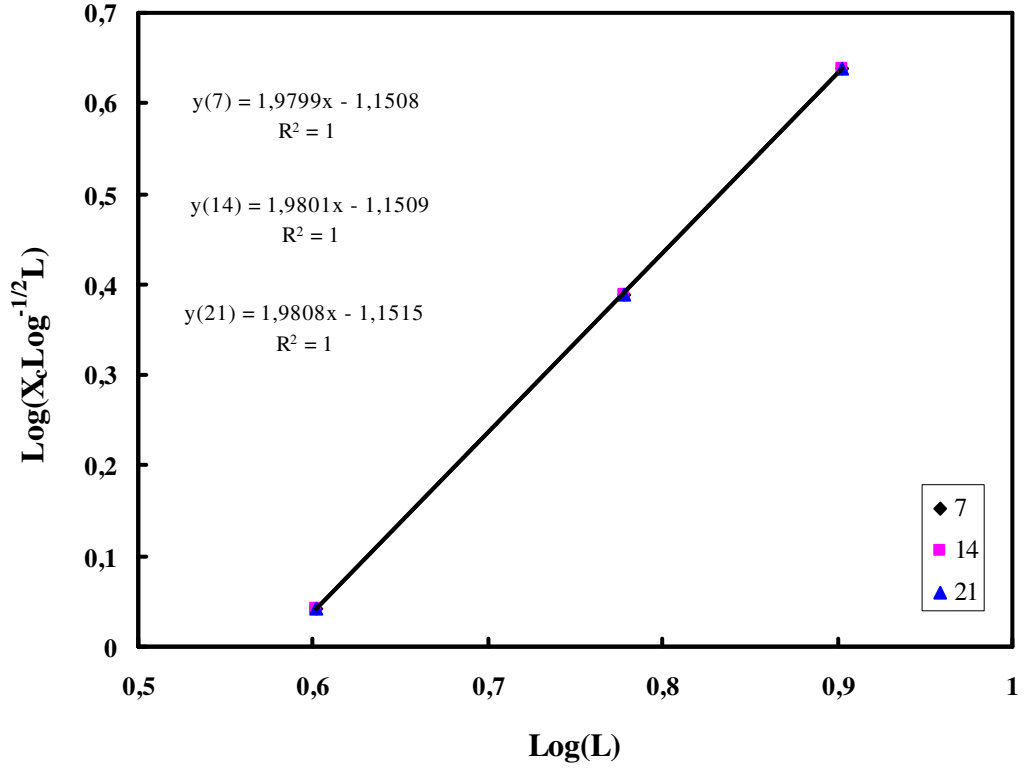
Şekil 5.7.'de verilmektedir.

Çizelge 5.7. Doğrusal boyut (L) aralığı 7, 14, 21 bağımsız simülasyonlar için

$\chi_c \text{Log}^{-1/2} L$ 'nin L 'ye karşı ve $\chi_{\max} \text{Log}^{-1/2} L$ 'nin L 'ye karşı Log –

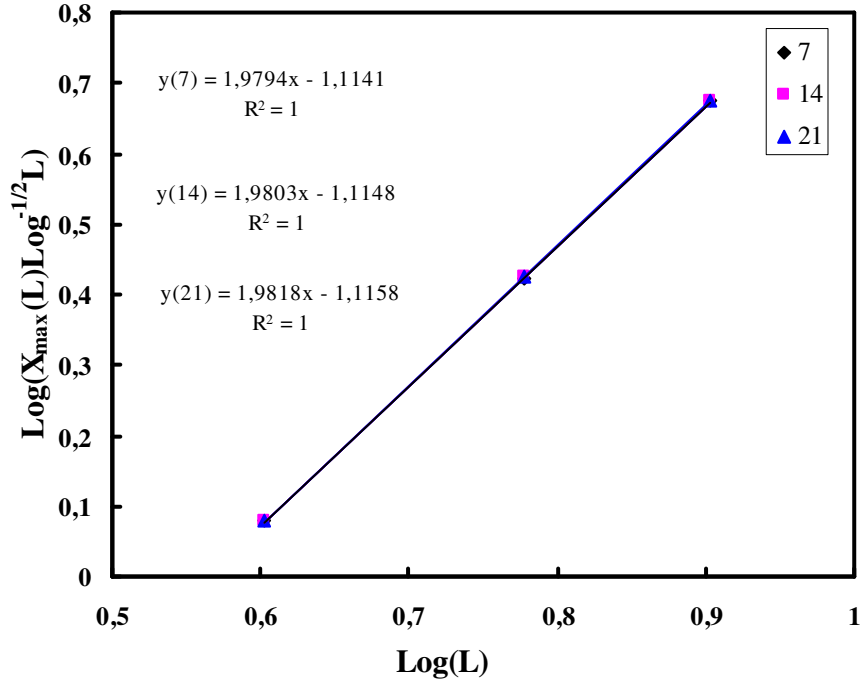
Log grafiklerinin eğimi

L için aralık	$\left(\frac{\gamma}{\nu}\right)_c$	$\left(\frac{\gamma}{\nu}\right)_{\max}$	Simülasyon Sayısı
$4 \leq L \leq 8$	1.9799	1.9794	7
$4 \leq L \leq 8$	1.9801	1.9803	14
$4 \leq L \leq 8$	1.9808	1.9818	21



Şekil 5.7.a. 7, 14, 21 Bağımsız simülasyonlar için manyetik alınganlığın sonsuz örgü kritik sıcaklığındaki değerleri $\chi_c \text{Log}^{-1/2} L$ 'nin sonlu örgü doğrusal boyutuna karşı Log – Log grafiği ($4 \leq L \leq 8$)

Şekil 5.7.a.'daki doğruların eğimi $\left(\frac{\chi}{v}\right)_c = 1.9799$, $\left(\frac{\chi}{v}\right)_c = 1.9801$ ve $\left(\frac{\chi}{v}\right)_c = 1.9808$ değerlerini vermektedir.



Şekil 5.7.b. 7, 14, 21 Bağımsız simülasyonlar için manyetik alınganlığın sonlu örgü kritik sıcaklığındaki değerleri $\chi_{\max} \text{Log}^{-1/2} L$ 'nin sonlu örgü doğrusal boyutuna karşı Log – Log grafiği ($4 \leq L \leq 8$)

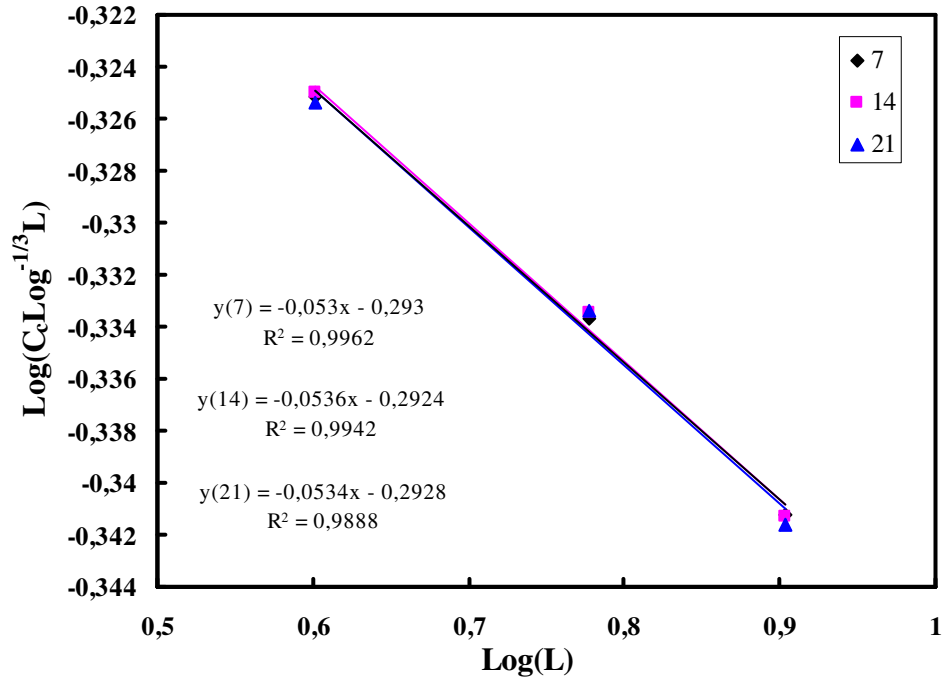
Şekil 5.7.b.'deki doğruların eğimi $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right)_{\max} = 1.9794$, $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right)_{\max} = 1.9803$ ve $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right)_{\max} = 1.9818$ değerlerini vermektedir. 7, 14, 21 bağımsız simülasyonlar için elde edilen $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right)_c = 1.9799$, $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right)_c = 1.9801$, $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right)_c = 1.9808$, $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right)_{\max} = 1.9794$, $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right)_{\max} = 1.9803$, $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right)_{\max} = 1.9818$ değerleri $\frac{\gamma}{\nu} = 2$ teorik değeri ile uyum halindedir. Simülasyon sayısı arttıkça elde edilen $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right)_c = 1.9808$, $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right)_{\max} = 1.9818$ değerleri teorik değeriyle daha iyi uyum halinde olduğu görülmektedir.

5.4. Özısı İçin Kritik Üs

Sonlu boyutlu örgülerin (L) özısına bağlılığı (68, 83);

$$C(L) \propto L^{\alpha/\nu} \text{Log}^{1/3} L; \quad T_c(\infty), \quad T_c^C(L) \quad (5.10)$$

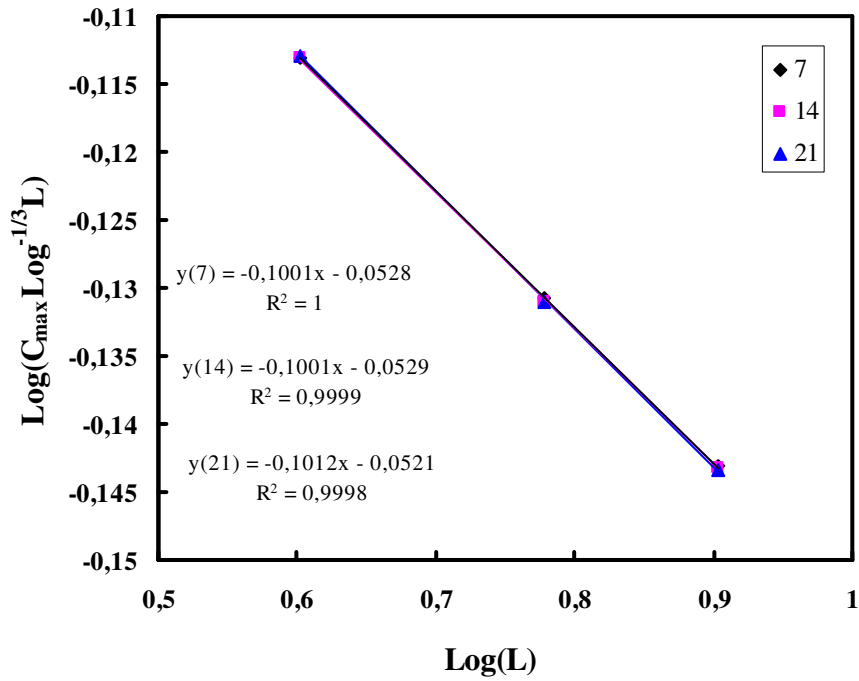
eşitliği ile verilmektedir



Şekil 5.8.a. 7, 14, 21 bağımsız simülasyonlar için özısının sonsuz örgü kritik sıcaklığındaki değerleri $C_c \text{Log}^{-1/3} L$ 'nin sonlu örgü doğrusal boyutuna karşı Log – Log grafiği ($4 \leq L \leq 8$)

Şekil 5.8.a.'daki doğruların eğimi $\left(\frac{\alpha}{\nu}\right)_c = -0.0530$, $\left(\frac{\alpha}{\nu}\right)_c = -0.0536$,

$\left(\frac{\alpha}{\nu}\right)_c = -0.0534$ değerlerini vermektedir.



Şekil 5.8.b. 7, 14, 21 bağımsız simülasyonlar için özısının sonlu örgü kritik sıcaklığındaki değerleri $C_{\max} \text{Log}^{-1/3} L$ 'nin sonlu örgü doğrusal boyutuna karşı Log – Log grafiği ($4 \leq L \leq 8$)

Şekil 5.8.b.'deki doğruların eğimi $\left(\frac{\alpha}{\nu}\right)_{\max} = - 0.1001$, $\left(\frac{\alpha}{\nu}\right)_{\max} = - 0.1001$,

$\left(\frac{\alpha}{\nu}\right)_{\max} = - 0.1012$ değerlerini vermektedir.

Çizelge 5.8. 7, 14, 21 bağımsız simülasyonlar için $C_c \text{Log}^{-1/3} L$ 'nin L'ye karşı ve

$C_{\max} \text{Log}^{-1/3} L$ 'nin L'ye karşı Log – Log grafiklerinin eğimi

L için aralık	$\left(\frac{\alpha}{\nu}\right)_c$	$\left(\frac{\alpha}{\nu}\right)_{\max}$	Simülasyon Sayısı
$4 \leq L \leq 8$	- 0.0530	- 0.1001	7
$4 \leq L \leq 8$	- 0.0536	- 0.1001	14
$4 \leq L \leq 8$	- 0.0534	- 0.1012	21

Çizelge 5.8. ve Şekil 5.8.'den $\left(\frac{\alpha}{\nu}\right)_c = - 0.0530$, $\left(\frac{\alpha}{\nu}\right)_c = - 0.0536$, $\left(\frac{\alpha}{\nu}\right)_c = -$

0.0534 , $\alpha_c = - 0.0273$, $\alpha_c = - 0.0272$, $\alpha_c = - 0.0269$, $\left(\frac{\alpha}{\nu}\right)_{\max} = - 0.1001$, $\left(\frac{\alpha}{\nu}\right)_{\max} =$

$- 0.1001$, $\left(\frac{\alpha}{\nu}\right)_{\max} = - 0.1012$, $\alpha_{\max} = - 0.0530$, $\alpha_{\max} = - 0.0513$, $\alpha_{\max} = - 0.0512$

değerleri elde edilmektedir. Elde edilen bu değerler $\alpha = 0$ 'ın teorik değeri ile uyum

halindedir. Simülasyon sayısı arttıkça elde edilen $\alpha_c = - 0.0269$, $\alpha_{\max} = - 0.0512$

değerleri teorik değere daha yaklaştığı görülmektedir.

5.5. Dört Boyutlu Ising Modelinin Sonlu Örgü Ölçekleme Fonksiyonları

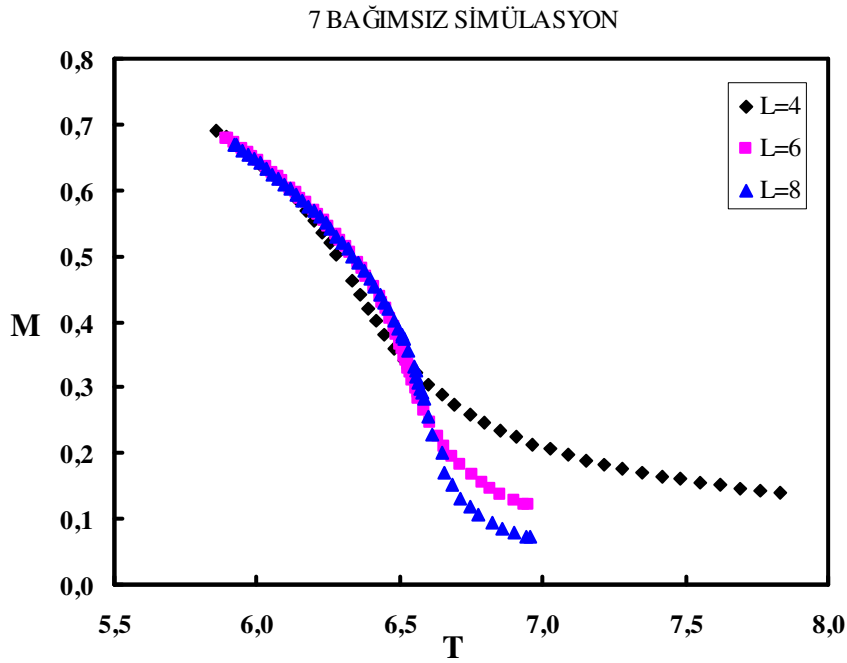
$d=4$ boyut için sonlu örgü ölçekleme bağıntıları Privman ve Fisher (44, 79, 83, 87) tarafından $h=0$ için;

$$M_L(t) = L^{-\beta/\nu} \text{Log}^{1/4} LF(tL^2 \text{Log}^{1/6} L) \quad (5.11)$$

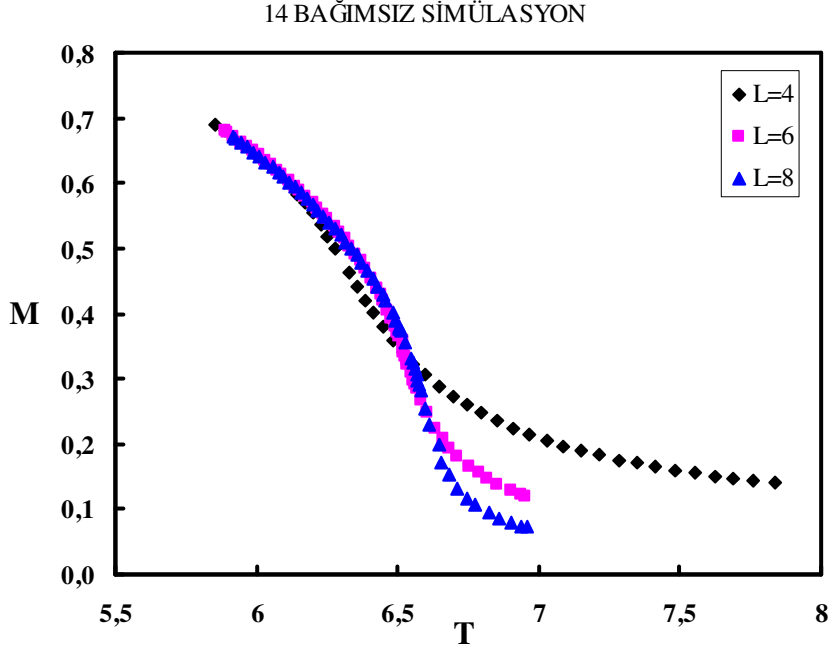
$$\chi_L(t) = L^{\gamma/\nu} \text{Log}^{1/2} LF(tL^2 \text{Log}^{1/6} L) \quad (5.12)$$

$$C_L(t) = L^{\alpha/\nu} \text{Log}^{1/3} LF(tL^2 \text{Log}^{1/6} L) \quad (5.13)$$

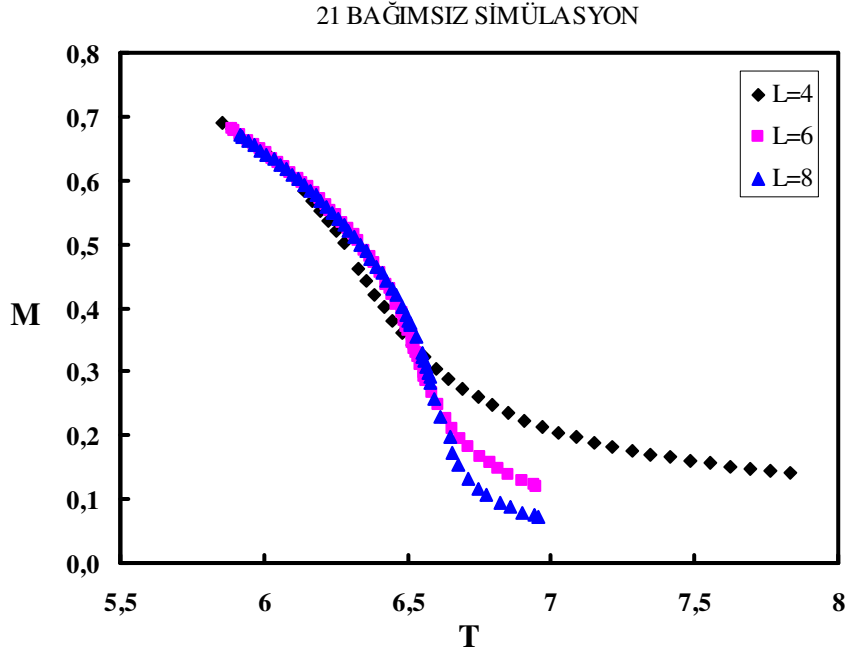
eşitlikleri ile verilmektedir.



Şekil 5.9.a. 7 bağımsız simülasyon için Manyetizasyonun (M) sıcaklığa (T) göre değişimi ($4 \leq L \leq 8$)

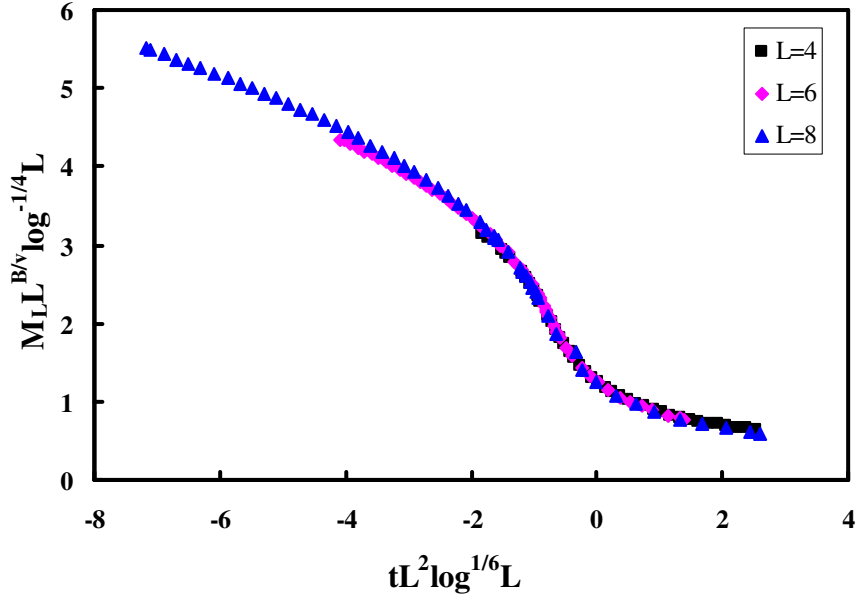


Şekil 5.9.b. 14 bağımsız simülasyon için Manyetizasyonun (M) sıcaklığa (T) göre değişimi ($4 \leq L \leq 8$)



Şekil 5.9.c. 21 bağımsız simülasyon için Manyetizasyonun (M) sıcaklığa (T) göre değişimi ($4 \leq L \leq 8$)

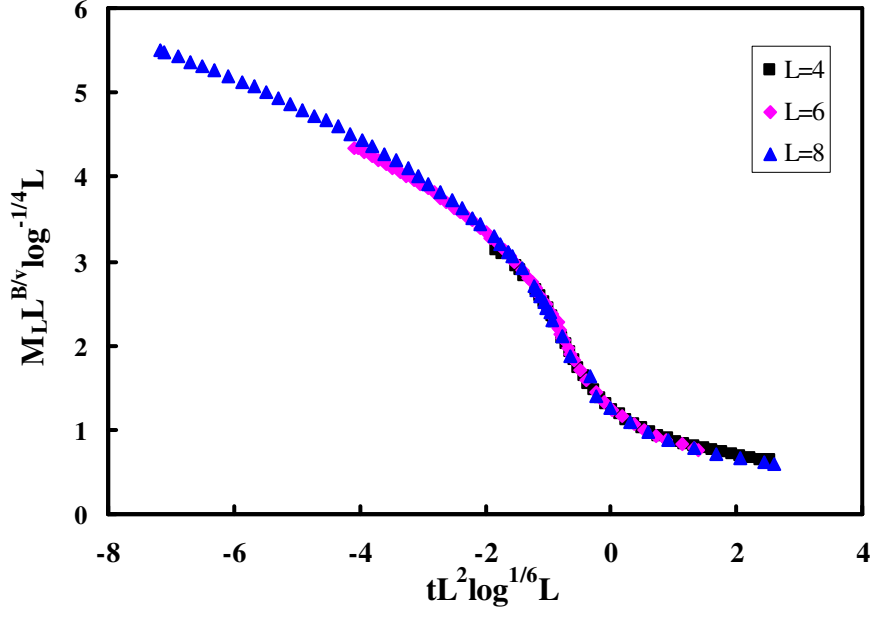
7 BAĞIMSIZ SİMÜLASYON



Şekil 5.10.a. 7 bağımsız simülasyon için ölçeklenmiş manyetizasyonun ölçeklenmiş

sıcaklığa göre grafiği ($4 \leq L \leq 8$), ($T_c = 6.6802$), $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right) = 2$

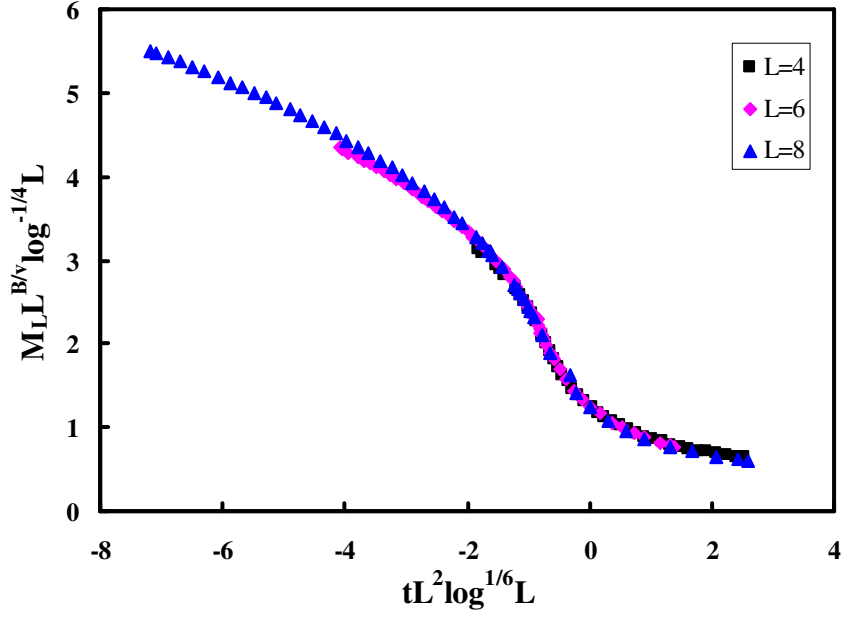
14 BAĞIMSIZ SİMÜLASYON



Şekil 5.10.b. 14 bağımsız simülasyon için ölçeklenmiş manyetizasyonun ölçeklenmiş

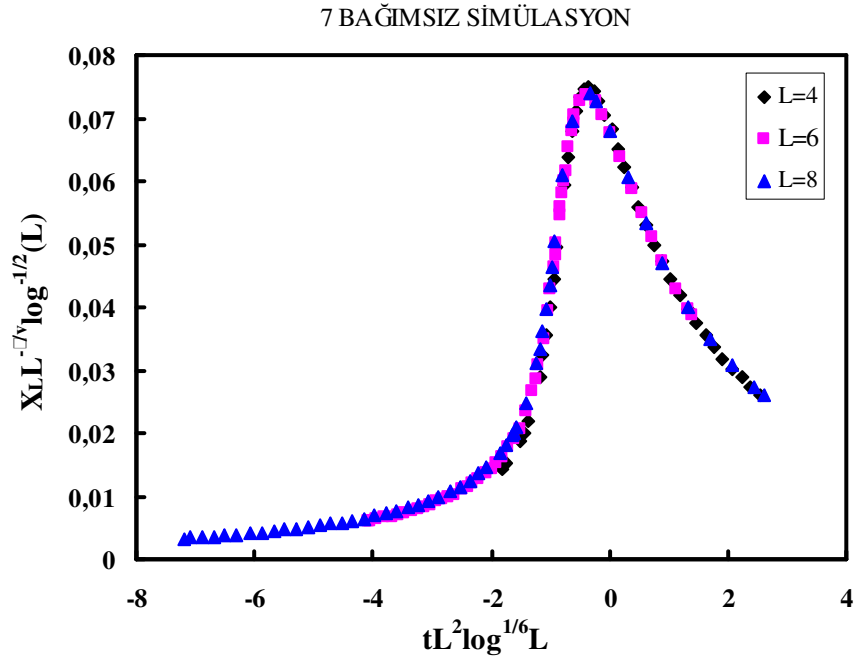
sıcaklığa göre grafiği ($4 \leq L \leq 8$), ($T_c = 6.6802$), $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right) = 2$

21 BAĞIMSIZ SİMÜLASYON



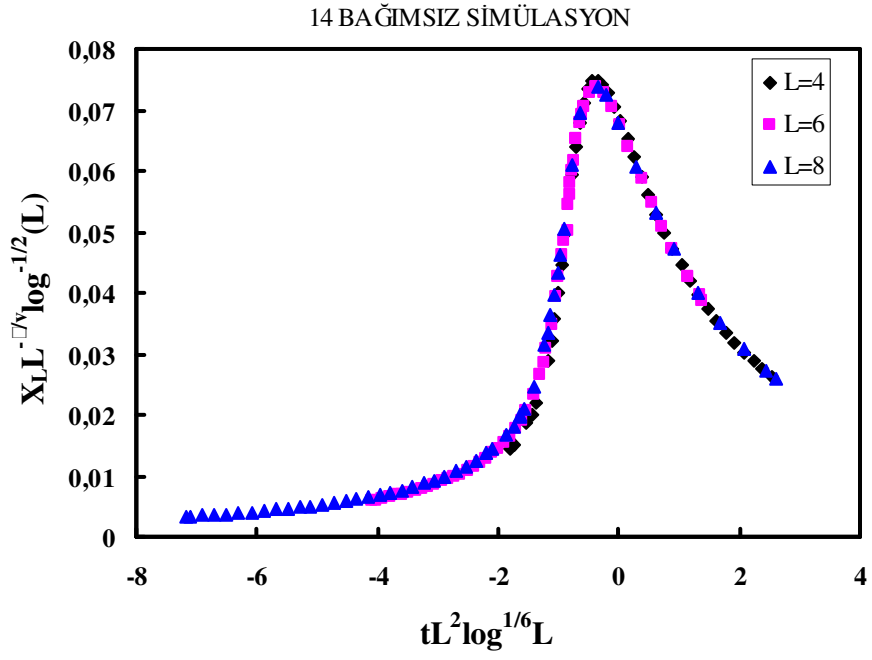
Şekil 5.10.c. 21 bağımsız simülasyon için ölçeklenmiş manyetizasyonun ölçeklenmiş

sıcaklığa göre grafiği ($4 \leq L \leq 8$), ($T_c = 6.6802$), $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right) = 2$



Şekil 5.11.a. 7 bağımsız simülasyon için ölçeklenmiş manyetik alınganlığın,

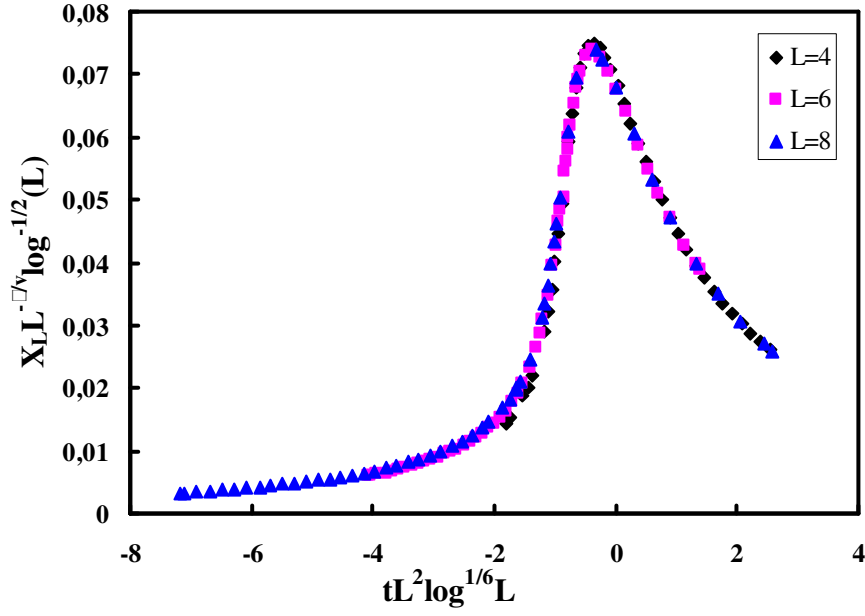
ölçeklenmiş sıcaklığa karşı grafiği ($4 \leq L \leq 8$), ($T_c = 6.6802$), $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right) = 2$



Şekil 5.11.b. 14 bağımsız simülasyon için ölçeklenmiş manyetik alınganlığın,

ölçeklenmiş sıcaklığa karşı grafiği ($4 \leq L \leq 8$), ($T_c = 6.6802$), $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right) = 2$

21 BAĞIMSIZ SİMÜLASYON

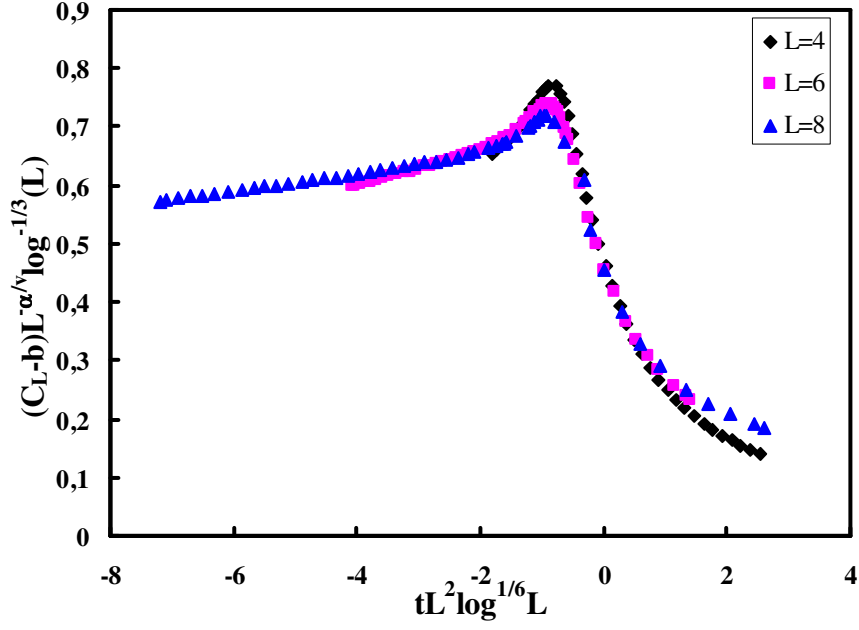


Şekil 5.11.c. 21 bağımsız simülasyon için ölçeklenmiş manyetik alınganlığın,

ölçeklenmiş sıcaklığa karşı grafiği ($4 \leq L \leq 8$), ($T_c = 6.6802$), $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right) = 2$

Şekil 5.10. ve Şekil 5.11. grafikleri incelendiğinde dataların üst üste geldiği görülmektedir. Simülasyon sayısı arttığı zaman dataların daha iyi üst üste geldiği görülmektedir. Buda ölçekleme bağıntılarının geçerli olduğunu göstermektedir.

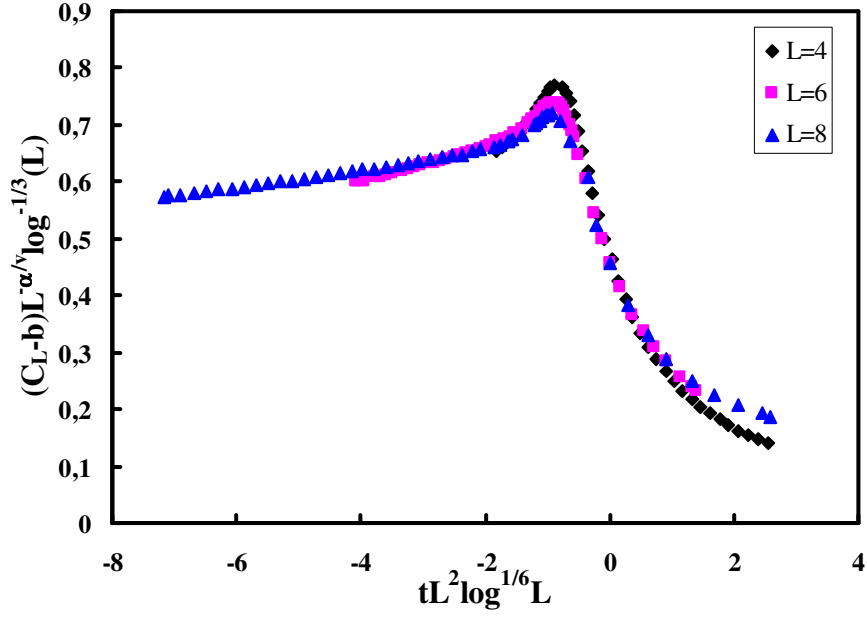
7 BAĞIMSIZ SİMÜLASYON



Şekil 5.12.a. 7 bağımsız simülasyon için ölçeklenmiş manyetik alınganlığın,

ölçeklenmiş sıcaklığa karşı grafiği ($4 \leq L \leq 8$), ($T_c = 6.6802$), $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right) = 2$

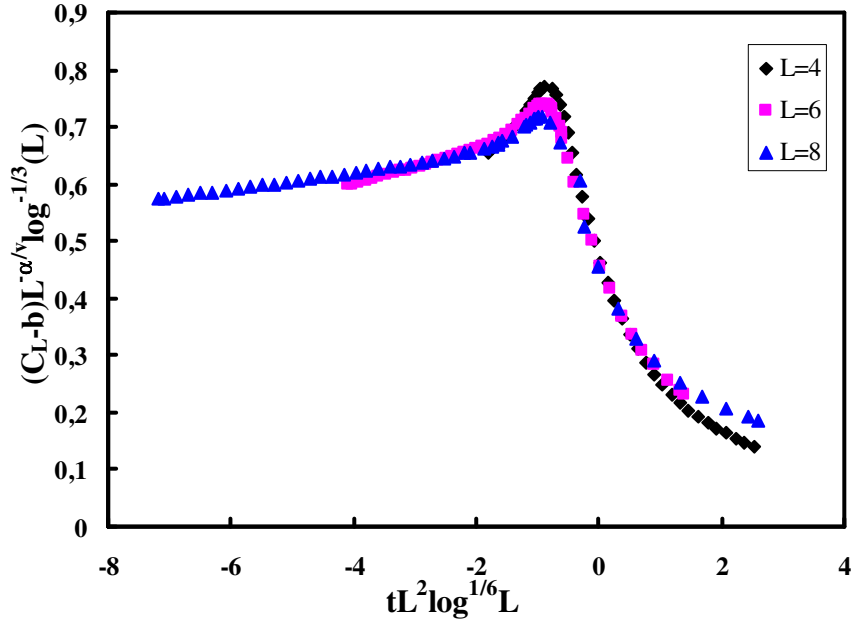
14 BAĞIMSIZ SİMÜLASYON



Şekil 5.12.b. 14 bağımsız simülasyon için ölçeklenmiş manyetik alınganlığın,

ölçeklenmiş sıcaklığa karşı grafiği ($4 \leq L \leq 8$), $(T_c = 6.6802)$, $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right) = 2$

21 BAĞIMSIZ SİMÜLASYON



Şekil 5.12.c. 21 bağımsız simülasyon için ölçeklenmiş manyetik alınganlığın,

ölçeklenmiş sıcaklığa karşı grafiği ($4 \leq L \leq 8$), ($T_c = 6.6802$), $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right) = 2$

Şekil 5.12. incelendiğinde kritik bölgede ölçeklemenin geçerli olduğu diğer bölgelerde ise ölçeklemenin geçerli olmadığı görülmektedir. En iyi ölçekleme simülasyon sayısı arttıkça görülmektedir.

5.6. Binder Parametresi

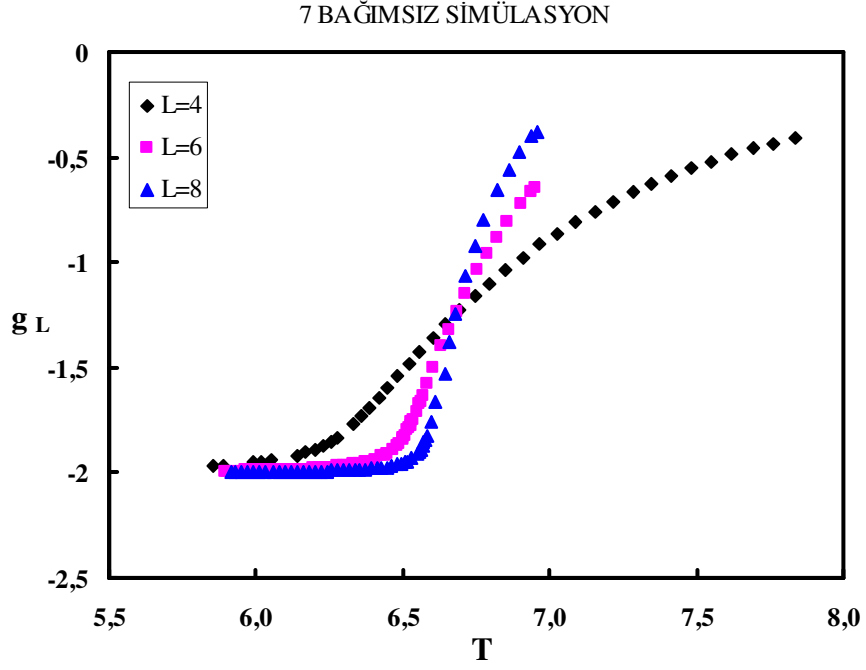
$h=0$ ve $d=4$ için Binder parametresi Binder tarafından (62, 79);

$$g_L = \frac{\langle S^4 \rangle_L}{\langle S^2 \rangle_L^2} - 3 = \left[\frac{\chi_L^4}{L^4 \chi_L^4} \right]_{h=0} \quad (5.14)$$

verilmektedir. Binder parametresi için ölçekleme ifadesi ise (44, 62, 79);

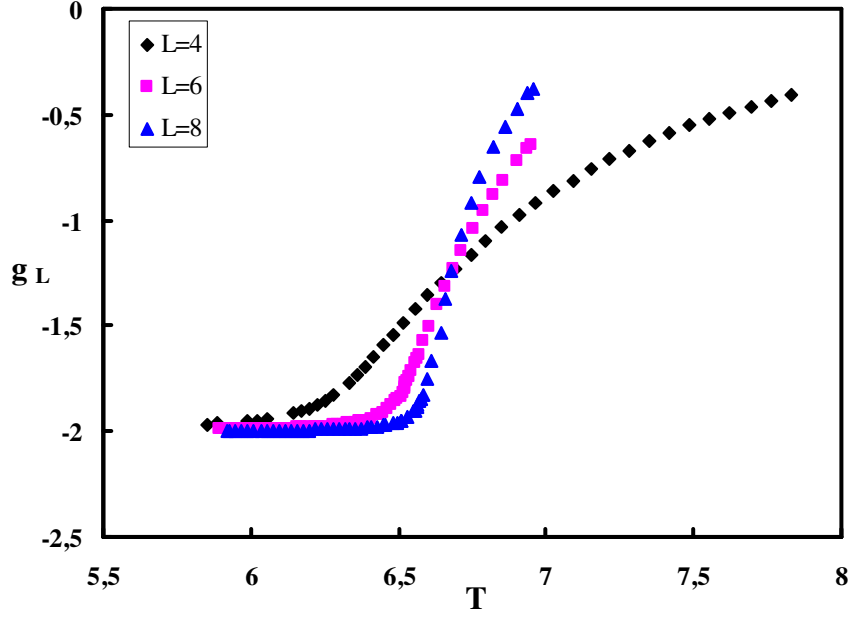
$$g_L(t) = F(tL^2 \text{Log}^{1/6} L) \quad (5.15)$$

verilmektedir.



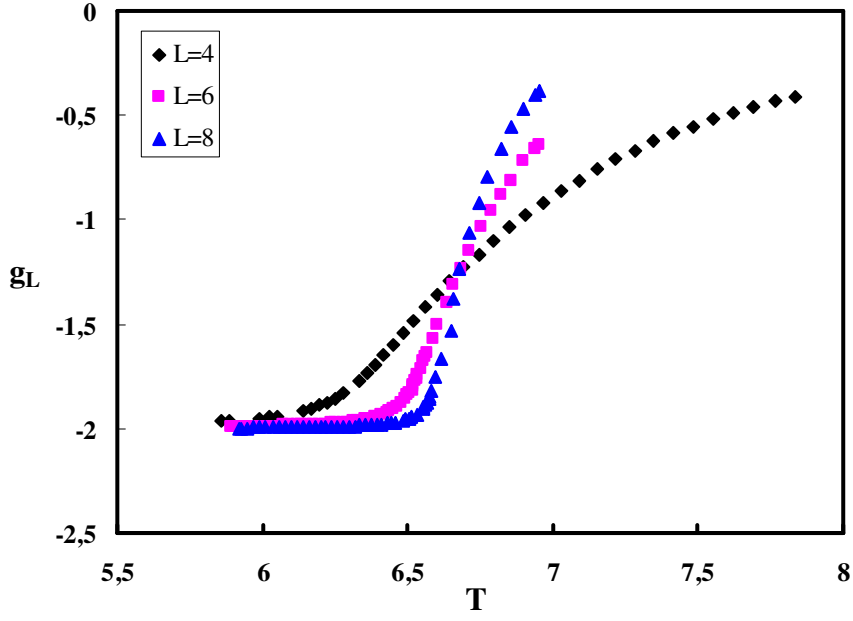
Şekil 5.13.a. 7 bağımsız simülasyon için Binder Parametresinin (g_L) sıcaklık T'ye göre değişimi

14 BAĞIMSIZ SİMÜLASYON



Şekil 5.13.b. 14 bağımsız simülasyon için Binder Parametresinin (g_L) sıcaklık T 'ye göre değişimi

21 BAĞIMSIZ SİMÜLASYON



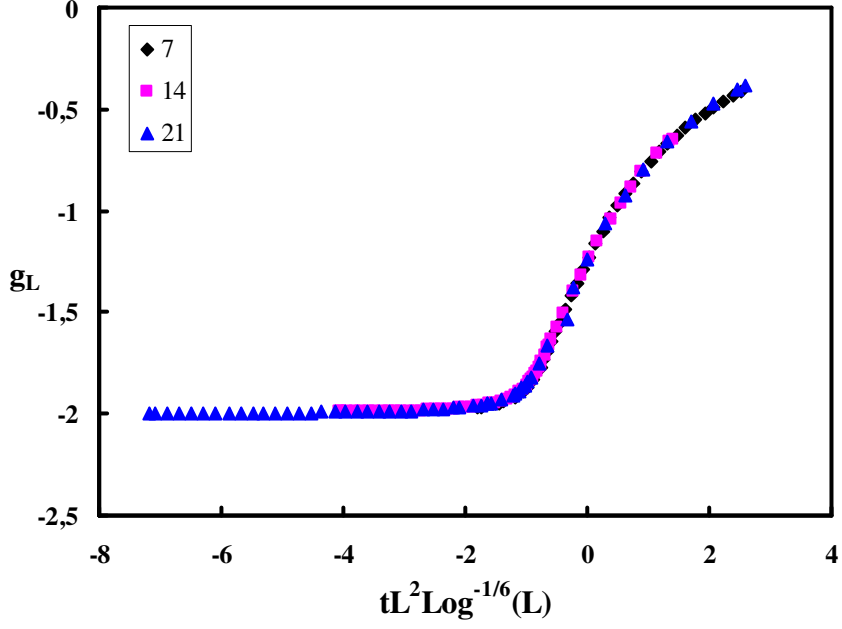
Şekil 5.13.c. 21 bağımsız simülasyon için Binder Parametresinin (g_L) sıcaklık T'ye göre değişimi

Şekil 5.13.'deki eğrilerin kesim noktasından çizelge 5.9.'daki değerler elde edilmiştir.

Çizelge 5.9. 7, 14, 21 bağımsız simülasyonlar için Binder Parametresi eğrilerinin kesişmesinden elde edilen $T_c(\infty)$ ve (g_L) değerleri

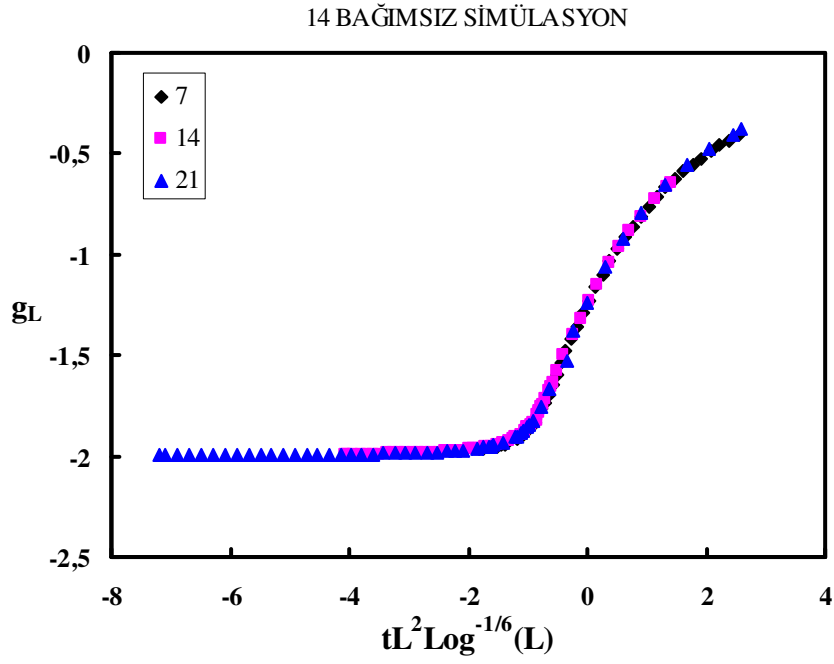
BİNDER PARAMETRESİ EĞRİLERİNİN KESİŞMESİNDEN		
$T_c(\infty)$	(g_L)	Simülasyon Sayısı
6.6800	- 1.2421	7
6.6801	- 1.2404	14
6.6802	- 1.2394	21

7 BAĞIMSIZ SİMÜLASYON



Şekil 5.14.a. 7 bağımsız simülasyon için Binder Parametresinin ölçeklenmiş

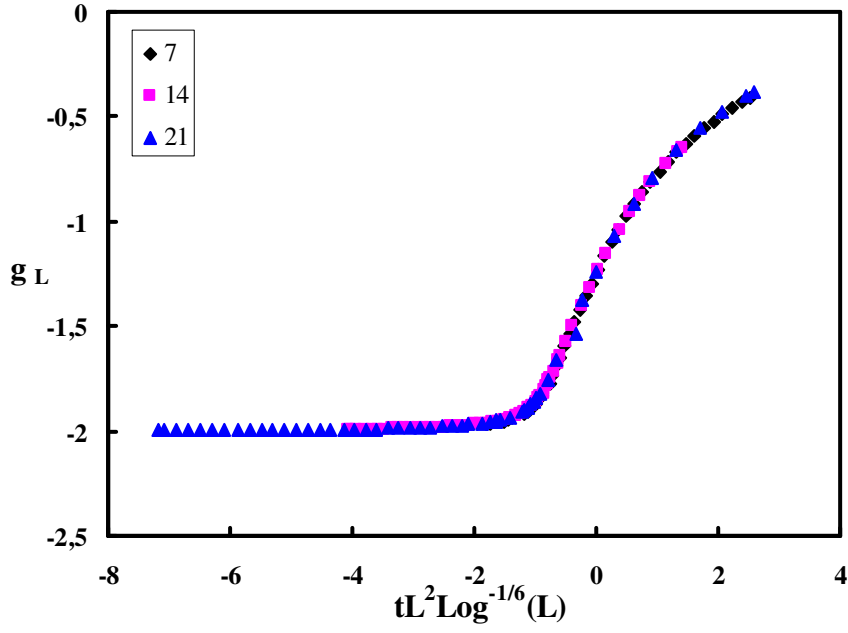
sıcaklığa karşı grafiği ($4 \leq L \leq 8$), ($T_c = 6.6802$), $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right) = 2$



Şekil 5.14.b. 14 bağımsız simülasyon için Binder Parametresinin ölçeklenmiş

sıcaklığa karşı grafiği ($4 \leq L \leq 8$), ($T_c = 6.6802$), $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right) = 2$

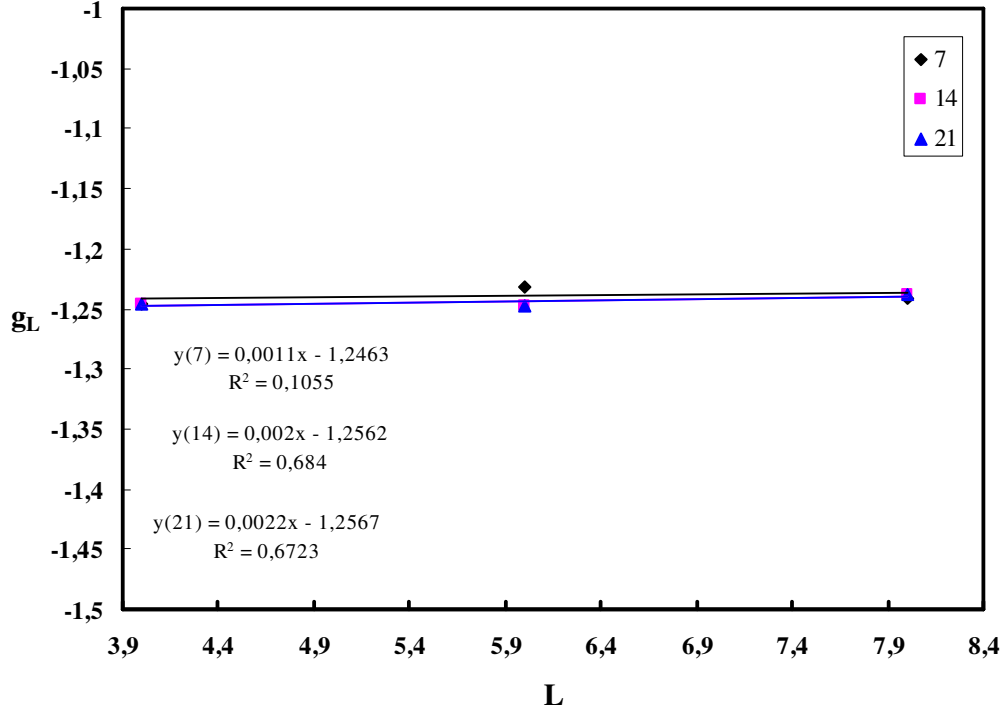
21 BAĞIMSIZ SİMÜLASYON



Şekil 5.14.c. 21 bağımsız simülasyon için Binder Parametresinin ölçeklenmiş

$$\text{sıcaklığa karşı grafiği } (4 \leq L \leq 8), (T_c = 6.6802), \left(\frac{\gamma}{\nu}\right) = 2$$

Şekil 5.14.'te ise Binder parametresinin 5.15 eşitliğine göre ölçeklenmiş sıcaklıkla değişimi çizilmiş olup dataların üst üste geldiği görülmektedir. Simülasyon sayısı arttıkça datalar daha iyi üst üste gelmektedir. Şekil 5.15.'de ise; 7, 14, 21 bağımsız simülasyonlar için Binder parametresinin (g_L) örgü uzunluğuna (L) göre grafiği çizilmiştir.



Şekil 5.15. 7, 14, 21 bağımsız simülasyonlar için Binder parametresi (g_L)'nin örgü uzunluğu (L)'ye bağlı grafiği

Şekil 5.15.'deki eğrilerin kesim noktasından sırasıyla 7, 14, 21 bağımsız simülasyonlar için; $g_L = -1.2463$, $g_L = -1.2562$, $g_L = -1.2567$ değerleri elde edilmiştir. Elde edilen bu değerler ; $g_L(T_c) \cong 0.81156$ (81), $g_L(T_c) = -0.958 \pm 0.050$ (63–64), $g_L(T_c) = -0.967 \pm 0.016$ (53) ile uyum halindedir.

KAYNAKLAR

- (1) Yeomans, J. M., Statistical Mechanics of Phase Transitions. 1–153. Clarendon Press, Oxford, 1992.
- (2) Serway, A. R., Fen ve Mühendislik için Fizik Modern Fizik ilaveli. 855–863. Çeviri Editörü: Kemal Çolakoğlu, Palme Yayıncılık, Ankara, 1996.
- (3) Huang, K., Statistical Mechanics. 341–398. John Wiley and Sons, Inc., 1987.
- (4) Ising, E., Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus, *Z.Physik.* 31: 253–258, 1925.
- (5) Onsager, L., Crystal Statistics I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition, *Phys. Rev.* 65: 117, 1944.
- (6) Blume, M., Emery, V.J., Griffiths, R.B., Ising Model for the λ transition and phase separation in He₃-He₄ mixtures, *Phys. Rev. A.* 4: 1071–1077, 1971.
- (7) Rosengren, A., Häggkvist, R., Rigorous solution of a two-dimensional Blume-Emery-Griffiths model, *Phys.Rev.Lett.* 63: 660–663, 1989.
- (8) Lapinskas, S., Rosengren, A., Blume-Emery-Griffiths model on three dimensional lattices: Consequences for the antiferromagnetic Potts model, *Phys. Rev. B.* 49: 15190–15196, 1994.
- (9) Shick, M., Shih, W.H., Spin–1 model of a microemulsion, *Phys. Rev. B.* 34: 1797– 1801, 1986.
- (10) Kutlu, B., The Simulation of 2D Spin–1 Ising Model with the bilinear and positive Biquadratic Interaction on a Cellular Automaton, *Int. J. of Mod. Phys. C.* 10: 1305–1320, 2003.
- (11) Solak, A., Kutlu, B., The Critical Behavior of the 2D Ising Model with the Bilinear and Positive Biquadratic nearest neighbor interactions on a Cellular Automaton, *Int. J. Mod. Phys. C.* 15: 1425–1438, 2004.
- (12) Kutlu, B., Özkan, A., Seferoğlu, N., Solak, A. and Binal, B., The Tricritical Behavior of the 3D Blume-Capel Model on a Cellular Automaton, *Int. J. Mod. Phys. C.* 16: 933–950, 2005.
- (13) Özkan, A., Seferoğlu, N. and Kutlu, B., Critical Exponents of the Three Dimensional Blume-Capel Model on a Cellular Automaton, *Physica A.* 362: 327–337, 2006.

- (14) Seferoğlu, N., Özkan, A. and Kutlu, B., Finite Size Effect for the First-Order Phase Transition of the Three Dimensional Blume-Capel Model on a Cellular Automaton, *Chinese Phys.Lett.* 23: 2526–2529, 2006.
- (15) Seferoğlu, N., Kutlu, B., Reentrant Phase Transition of the Blume-Emery-Griffiths Model for a Simple Cubic Lattice on a CellularAutomaton, *Physica A.* 374: 165–172, 2007.
- (16) Z. Merdan, Altı Boyutlu Ising Modelin Creutz "Cellular Automaton"ında İncelenmesi. Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi, Ankara, 2003.
- (17) Frenkel, D., Smit, B., Understanding Molecular Simulation: from Algorithms to Applications. 204. Academic Press, 1996.
- (18) Hermann, D. W., Computer Simulation Methods in Theoretical Physics. 1-148. Springer-Verlag, 1989.
- (19) Binney, J. J., Dowrick, N. J., Fisher, A. J., and Newman, M. E. J., The Theory of Critical Phenomena An Introduction to the Renormalization Group. 1-453. Oxford University Press, Oxford, 1992.
- (20) Metropolis, N., Rosenbluth, A. W., Rosenbluth, M. N., Teller, E., Equation of State Calculations by Fast Computing Machines, *J. Chem. Phys.* 21: 1087, 1953.
- (21) Creutz, M., Microcanonical Monte Carlo Simulation, *Phys. Rev. Lett.* 50: 1411, 1983.
- (22) Creutz, M., Deterministic Ising Dynamics, *Ann. of Physics.* 167: 62–73, 1986.
- (23) Wolfram, S., Theory and Applications of Cellular Automaton. 1–50, 91–125, 343–357. World Scientific, 1986.
- (24) Wolfram, S., Universality and Complexity in Cellular Automata, *Physica D.* 10: 1–35, 1984.
- (25) Wolfram, S., Statistical Mechanics of Cellular Automaton, *Rev. Mod. Phys.* 55: 601–651, 1983.
- (26) Vichniac, G.Y., Simulating Physics with Cellular Automata, *Physica D.* 10: 96-116, 1984.
- (27) Pomeau, Y., Invariant in Cellular Automata, *J. Phys.A: Math. Gen.* 17: 415–418, 1984.
- (28) Herrmann, H.J., Fast Algorithm for The Simulation of Ising Model, *J. of Stat. Phys.* 45: 145–151, 1986.

- (29) Aktekin, N., The Simulation of the Ising Model on the Creutz Cellular Automaton Annual Reviews of Computational Physics VII. 1–23. Ed: by D. Stauffer, World Scientific, Singapore, 2000.
- (30) Aktekin, N., Simulation of the Two-Dimensional Ising Model on the Creutz Cellular Automaton *Physica A*. 219: 436–446, 1995.
- (31) B. Kutlu, İki Boyutlu Ising Modelin Creutz Cellular Automaton’da İncelenmesi. Doktora Tezi. Gazi Üniversitesi, Ankara, 1996.
- (32) Kutlu, B., Critical Behavior of the Two-dimensional Ising Model with Next-Nearest Neighbor Antiferromagnetic Interaction on the Creutz Cellular Automaton, *Physica A*. 234: 807–818, 1996.
- (33) Kutlu, B., Critical Exponents of the Two-Dimensional Ising Model with Next-Nearest-Neighbor and Four-Spin Interactions on the Creutz Cellular Automaton, *Physica A*. 243: 199–212, 1997.
- (34) Kutlu B., Aktekin N., Critical Slowing Down in Ising Model for Creutz Algoritmi, *Physica A*. 208: 423–430, 1994.
- (35) A. Özkan, İki Boyutlu Ising Model İçin Şekil Etkisinin Creutz Cellular Automaton ile İncelenmesi. Doktora Tezi. Gazi Üniversitesi, Ankara, 2001.
- (36) Aktekin, N., Simulation of the 3-Dimensional Ising Model on the Creutz Cellular Automaton, *Physica A*. 219: 436–446, 1995.
- (37) G. Mülazımoğlu Kızılırmak, Dört Boyutlu Ising Modelinin $(18,20,22)_3^4$ ve $(18,20,22)_4^4$ Örgülerinde Creutz Cellular Automaton ile İncelenmesi. Doktora Tezi. Gazi Üniversitesi, Ankara, 2009.
- (39) Aktekin, N., The finite-size scaling functions of the four-dimensional Ising model, *Journal Of Statistical Physics*. 104: 1397–1406, 2001.
- (40) Aktekin N., Gunen A., Sağlam Z., A finite-size scaling study of the four-dimensional Ising model on the Creutz cellular automation, *Int. J. Mod. Phys. C*. 10: 621-633, 1999.
- (41) 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*. 22 (2): 95-100, 2003.

- (42) Merdan, Z., Gunen, A., Mulazimoglu, G., Effect of the number of energy levels of a demon for the simulation of the four-dimensional Ising model on the Creutz cellular automaton, *Int. J. Mod. Phys. C.* 16: 1269-1278, 2005.
- (43) Mülazımođlu, G., Duran, A., Merdan Z. and Günen A., The effect of the increase of linear dimensions on exponents obtained by finite-size scaling relations for the four-dimensional Ising model on the creutz cellular automaton, *Modern Physics Letters B.* 22: 1329–1341, 2008.
- (44) Aktekin, N., Simulation of the Four Dimensional Ising Model on the Cellular Automaton, *Physica A.* 232: 397–407, 1996.
- (45) Aktekin, N., The finite-size scaling functions of the four-dimensional Ising model, *G.Ü. Fen Bil. Der.* 17(3): 59–70, 2004.
- (46) Merdan, Z., Gunen A., Cavdar S., Dynamical finite-size scaling function of the four dimensional Ising model for Creutz algorithm, *Physica A-Statistical Mechanics And Its Applications.* 359: 415–422, 2006.
- (47) M. Kalay, Beş Boyutlu Ising Modelin “Creutz Cellular Automaton”ında İncelenmesi. Doktora Tezi. Gazi Üniversitesi, Ankara, 2001.
- (48) Aktekin N., Erkoc S., Kalay M., The test of the finite-size scaling relations for the five-dimensional Ising model on the Creutz cellular automaton, *International Journal Of Modern Physics C.* 10: 1237–1245, 1999.
- (49) Kalay, M., Merdan Z., The finite-size scaling study of the specific heat and the binder parameter for the five-dimensional Ising model, *Modern Physics Letters B.* 21: 1923–1931, 2007.
- (50) Aktekin, N., Erkoc S., Kalay M., The test of the finite-size scaling relations for the five-dimensional Ising model on the Creutz cellular automaton, *International Journal Of Modern Physics C.* 10: 1237–1245, 1999.
- (51) Merdan, Z., Bayirli M., The effect of the increase of linear dimensions on exponents obtained by finite-size scaling relations for the six-dimensional Ising model on the Creutz cellular automaton, *Applied Mathematics And Computaion.* 167: 212–224, 2005.
- (52) Merdan, Z., Aktekin, N., The Simulation of the Six-Dimensional Ising Model on the Creutz Cellular Automaton, *Balkan Physics Letters.* 10: 95-101, 2002.

- (53) Merdan, Z., Erdem, R., The finite-size scaling study of the specific heat and the Binder parameter for the six-dimensional Ising model, *Physics Letters A*. 330: 403–407, 2004.
- (54) Aktekin, N., Erkoc S., The test of the finite-size scaling relations for the six-dimensional Ising model on the Creutz cellular automaton, *Physica A*. 284: 206–214, 2000.
- (55) Merdan, Z., Bayirli M., The effect of the increase of linear dimensions on exponents obtained by finite-size scaling relations for the six-dimensional Ising model on the Creutz cellular automaton, *Applied Mathematics And Computation*. 167: 212–224, 2005.
- (56) Aktekin, N., Effect of the number of energy levels of a demon on the simulation of the Ising models in five to seven dimensions on the Creutz cellular automaton, *International Journal of Modern Physisc C*. 10: 621–633, 1999.
- (57) Merdan, Z., Atille, D., The finite-size scaling study of the specific heat and the Binder parameter for the 7-dimensional Ising model, *Modern Physics Letters B*. 21: 215–224, 2007.
- (58) Merdan, Z., Atille, D., The effect of the number of simulations on the exponents obtained by finite-size scaling relations for the seven-dimensional Ising model on the Creutz cellular automaton, *Physica A-Statistical Mechanics And Its Applications*. 376: 327–336, 2007.
- (59) Merdan Z., Duran A., Atille D., Mülazimoglu G. and Günen A., The test of the finite-size scaling relations of the Ising models in seven and eight dimensions on the Creutz cellular automaton, *Physica A-Statistical Mechanics And Its Applications*. 366: 265–272, 2006.
- (60) Aktekin, N., Simulation of the eight-dimensional Ising model on the Creutz cellular automaton, *Internaional Journal Of Modern Physics C*. 8: 287–292, 1997.
- (61) Privman, V. (Ed.), Finite-Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems. 1–98. World Scientific, Singapore, 1990.
- (62) Binder, K., Nauenberg, M., Privman, V. and Young, A. P., Finite-Size Tests Of Hyperscaling, *Phys. Rev. B*. 31: 1498, 1985.
- (63) Rickwardt, Ch., Nielaba, P. and Binder, K., A Finite-Size-Scaling Study Of The 5-Dimensional Ising-Model, *Ann. Phys., (Leipzig)*. 3: 483, 1994.

- (64) Mon, K. K., Finite-size scaling of the 5D Ising model, *Europhys. Lett.* 34: 399, 1996.
- (65) Blöte, H. W. J., and Luijten, E., Universality And The Five-Dimensional Ising Model, *Europhys. Lett.* 38: 565, 1997.
- (66) Cheon, M., Chang, I. and Stauffer, D., Monte Carlo investigation of three-Exponent Scaling in the 5D Ising Model, *Int. J. Mod. Phys. C.* 10: 131, 1999.
- (67) Singh, S., and Pathria, R. K., Finite-Size Scaling Of $O(N)$ Models In Higher Dimensions, *Phys. Rev. B.* 38: 2740, 1988.
- (68) Kenna, R. and Lang, C. B., Finite-size scaling and the zeroes of the partition function in the ϕ_4^4 Model, *Phys. Lett. B.* 264: 396-400, 1991; Kenna, R. and Lang, C. B., Renormalization-Group Analysis Of Finite-Size Scaling In The ϕ_4^4 Model, *Nucl. Phys. B.* 393: 461–479, 1993.
- (69) Brezin, E., Finite Size Effects In Phase-Transitions, *J. Phys.* 43: 15, 1982.
- (70) Singh, S. and Pathria, R. K., Exact Results For A Finite-Sized Spherical Model Of Ferromagnetism At The Borderline Dimensionality–4, *Phys. Rev. B.* 45: 9759, 1992.
- (71) Luijten, E. and H. Blöte, W. J., Classical critical behavior of spin models with long-rangeinteractions, *Phys. Rev. B.* 56: 8945, 1997.
- (72) Shapiro, J. and Rudnick, J., The Fully Finite Spherical Model, *J. Stat. Phys.* 43: 51, 1986.
- (73) Baxter, R. B., Exactly Solved Modern Statistical Mechanics. 1-121. Oxford University Press, Oxford, 1989.
- (74) Challa, M.s.s., Landau, D.P., Binder, K., Finite Size effects at temperature driven first order transitions, *Phys. Rev. B.* 34: 1841–1852, 1984.
- (75) Binder, K., Landau,D.P., Finite-size scaling at first order phase transitions, *Phys. Rev. B.* 30: 1477–1485, 1984.
- (76) Mouritsen, O., G., Computer Studies of Phase Transitions and Critical Phenomena. 22-26. Springer, Berlin, 1984.
- (77) Swendsen, R. H., Wang, J-S., Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations, *Phys. Rev. Lett.* 58: 86–88, 1987.
- (78) Binder, K., Finite-size scaling analysis of Ising model block distribution functions, *Z. Phys. B.* 43: 119–140, 1981.

- (79) Binder, K., Critical properties from Monte Carlo coarse graining and renormalization, *Phys. Rev. Lett.* 47: 696, 1981.
- (80) Binder, K., Nauenberg, M., Privman, V. and Young, A.P., Finite-size tests of hyperscaling, *Phys. Rev. B.* 31: 1502, 1985.
- (81) Brezin, E. and Zinn-Justin, J., Finite-size effects in phase transitions, *Nucl. Phys. B.* 257: 867- 893, 1985.
- (82) Luijten, E., Binder, K. and Blöte H.W.J., Finite-size scaling above the upper critical dimension revisited: The case of the five-dimensional Ising model, *Eur. Phys. J B.* 9: 289–297, 1999.
- (83) Rudnick, J., Guo, H. and Jasnow, D., Finite-size scaling and the renormalization group, *J. Stat. Phys.* 41: 353–373, 1985.
- (84) Binder, K., Some recent progress in the phenomenological theory of finite-size scaling and Application to Monte Carlo studies of critical phenomena, in *Finite-Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems.* 173–221. Edited by V. Privman. World Scientific, Singapore, 1990.
- (85) Jasnow, D., Finite-size scaling, hyperscaling and the renormalization group, in *Finite-Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems.* 99–140. Edited by V. Privman. World Scientific, Singapore, 1990.
- (86) Parisi, G. and Ruiz-Lorenzo, J.J., Scaling above the upper critical dimension in Ising models, *Phys. Rev. B.* 54: 3698–3701, 1996.
- (87) Lai, P.-Y. and Mon, K.K., Finite-size scaling of the Ising model in four dimensions, *Phys. Rev. B.* 41: 9257–9263, 1990.
- (88) Privman, V. and Fisher, M.E., Universal critical amplitudes in finite-size scaling, *Phys. Rev. B.* 30: 322–327, 1984.
- (89) Gaunt, D.S., Sykes, M.F. and McKenzie, S., Susceptibility and fourth-field derivative of the spin 1/2 Ising model for $T > T_c$ and $d=4$, *J. Phys. A.* 12: 871-877, 1979.
- (90) Stauffer, D. and Adler, J., Logarithmic factors, critical temperature, and zero temperature flipping in the 4D kinetic Ising model, *Int. J. Mod. Phys. C.* 8: 263–267, 1997.