

**DİFÜZYON İLE SINIRLI TANECİK KÜMELEŞME MODELİ
KULLANILARAK ELDE EDİLEN FRAKTALLAR İÇİN İKİ
BOYUTLU İSİNG MODELİNİN CREUTZ CELLULAR
AUTOMATON'INDA SİMÜLASYONU**

Mustafa BÜLBÜL

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**Ocak 2010
ANKARA**

Mustafa BÜLBÜL tarafından hazırlanan **Difüzyon İle Sınırlı Tanecik Kümeleşme Modeli Kullanılarak Elde Edilen Fraktallar İçin İki Boyutlu Ising Modelinin Creutz Cellular Automaton'ında Simülasyonu** Adlı bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.

Prof. Dr. Abdullah GÜNEN

.....

Tez Danışmanı, Fizik Anabilim Dalı

Doç. Dr. Ziya MERDAN

.....

Tez Danışmanı, Fizik Anabilim Dalı

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

Yrd. Doç. Dr. Mehmet BAYIRLI

.....

Fizik Anabilim Dalı, Balıkesir Üniversitesi

Prof. Dr. Abdullah GÜNEN

.....

Fizik Anabilim Dalı, Gazi Üniversitesi

Yrd. Doç. Dr. Şükrü ÇAVDAR

.....

Fizik Anabilim Dalı, Gazi Üniversitesi

Tarih: 22/01/2010

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

Prof. Dr. Bilal TOKLU

.....

Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

TEZ BİLDİRİMİ

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

Mustafa BÜLBÜL

**DİFÜZYON İLE SINIRLI TANECİK KÜMELEŞME MODELİ
KULLANILARAK ELDE EDİLEN FRAKTALLAR İÇİN İKİ
BOYUTLU İSİNG MODELİNİN CREUTZ CELLULAR
AUTOMATON'INDA SİMÜLASYONU
(Yüksek Lisans Tezi)**

Mustafa BÜLBÜL

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

Ocak 2010

ÖZET

Fraktallar, $L=40,60,80,100,120,160,200,240$ lineer boyutlu örgüler için difüzyon ile sınırlı tanecik kümeleşme modeli kullanılarak elde edildi. Difüzyon ile sınırlı tanecik kümeleşme modeli kullanılarak elde edilen fraktallar iki "bit"li demonlar kullanılarak Creutz cellular automatonda simüle edildi. Sonlu örgü ölçekleme bağıntıları kullanılarak statik kritik üsler ve kritik sıcaklıklar için hesaplanan değerler teorik değerlerle uyum halindedir.

Bilim Kodu : 202.1.147

Anahtar Kelimeler : Difüzyon ile sınırlı kümeleşme (DLA) modeli, fraktallar, Ising modeli, "cellular automaton"lar, sonlu örgü ölçekleme teorisi, kritik üsler

Sayfa Adedi : 85

Tez Yöneticisi : Prof.Dr.Abdullah GÜNEN
Doç. Dr. Ziya MERDAN

**THE SIMULATION OF THE TWO-DIMENSIONAL ISING MODEL ON
THE CREUTZ CELLULAR AUTOMATON FOR THE FRACTALS
OBTAINED BY USING THE MODEL OF DIFFUSION-LIMITED
AGGREGATION**

(M. Sc. Thesis)

Mustafa BÜLBÜL

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

ABSTRACT

The fractals are obtained by using the model of diffusion-limited aggregation (DLA) for the lattice with $L=40,60,80,100,120,160,200,240$. The fractals obtained by using the model of DLA are simulated on the Creutz cellular automaton by using two-bit demon. The values computed for the critical temperature and the static critical exponent within the framework of the finite size scaling theory are in agreement with theoretical values.

Science code : 202.1.147

Key words : Diffusion-Limited Aggregation (DLA), fractals, Ising model, cellular automata, finite-size scaling theory, critical exponents,

Number of pages : 85

**Adviser : Prof. Dr. Abdullah GÜNEN
Assoc. Prof. Dr. Ziya MERDAN**

TEŞEKKÜR

Bu çalışmayı yürütebilmem için değerli yardımlarını esirgemediğinden ve tez yazım dili hususunda gösterdiği hassasiyet ve düzeltmelerden dolayı tez hocam Sayın Prof.Dr. Abdullah GÜNEN ve Sayın Doç. Dr. Ziya MERDAN'a teşekkür ederim. Ayrıca çalışmalarımın başında bilgisayar programlarının çalıştırılmasında ve kullanılmasında yardımcı olan Sayın Doç. Dr. Ziya MERDAN'a, Yar.Doç.Dr. Mehmet BAYIRLI ve Yar.Doç.Dr. Mustafa Kemal ÖZTÜRK'e, teşvik ve gayret telkinleri ile destek olan Okul Müdürüm Sayın Hasan SELVİ'ye ve mesai arkadaşlarıma, tez çalışması boyunca bana yardımcı olan babam, annem ve eşime, neşe ve güler yüzleriyle moral desteği veren çocuklarıma teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET	iv
ABSTRACT	v
TEŞEKKÜR	vi
İÇİNDEKİLER	vii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ	ix
ŞEKİLLERİN LİSTESİ	xi
SİMGELER VE KISALTMALAR	xiii
1.GİRİŞ	1
2.TEORİ.....	12
2.1.DLA Modelini Temel Alan Kümeleşme Modelleri.....	12
2.1.1.DLA modeline yüzey gerilimi katılması -1.....	12
2.1.2.DLA modeline yüzey gerilimi katılması -2	13
2.1.3.Tanecikler arasında dipol etkileşmesi var iken kümeleşme.....	15
2.1.4.İki boyutlu uzayda uzun menzili çekici etkileşmelerin etkisinde büyüme.....	17
2.2.Çok Boyutlu Uzaylarda DLA Modeli	18
2.3.Difüzyonla Sınırlı Tanecik Kümeleşme Algoritması	18
2.3.1.Difüzyonla sınırlı tanecik kümeleşme algoritması için akış şeması .	21
2.4.Evrensellik	22
2.5.Ising Modelin Teorisi	24
2.5.1.Statik kritik olay ve statik kritik üsler.....	28
2.6.Spin-spin ilgileşim fonksiyonu $g(r)$	30
2.7.Sonlu Örgü Ölçekleme Teorisi	32

	Sayfa
2.8.Boyut Analizi.....	32
2.9.Termodinamik Nicelikler İçin Sonlu Örgü Ölçekleme Bağlıları.....	34
2.10.“Cellular Automaton” Modeli	38
2.10.1Bir Boyutlu cellular automaton kuralları	39
2.10.2İki Boyutlu cellular automaton kuralları	41
2.10.3Cellular Automaton’da tersinirlik ve tersinmezlik	42
2.11.Ising Model İçin Creutz Cellular Automaton	44
2.11.1Creutz algoritması	45
2.11.2Creutz Cellular Automaton’da Termodinamik niceliklerin Hesabı ..	47
3.SONUÇLAR VE TARTIŞMA.....	49
3.1.Bir Tanecik Etrafında Simülasyonla Oluşturulan Kümeler.....	50
3.2.Kritik Sıcaklık.....	52
3.3.Düzen parametresi için kritik \tilde{u} s	55
3.4.Manyetik alınganlık için kritik \tilde{u} s	60
3.5.Özısı için kritik \tilde{u} s	65
3.6.Binder Parametresi.....	72
KAYNAKLAR.....	77
ÖZGEÇMİŞ.....	85

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 3.1. Manyetik alınganlık ve özısının maksimum olduğu sonlu örgü kritik sıcaklık değerleri.....	54
Çizelge 3.2. İki boyutlu Ising modelinin farklı çalışmalarda elde edilen sonsuz örgü kritik sıcaklık değerleri.....	54
Çizelge 3.3. $0,0005 \leq t \leq 0,074$ aralığında $M(L)$ 'nin indirgenmiş sıcaklık $t(L) = T - T_c(L) /T_c(L)$ 'e karşı Log-Log grafiğinin eğiminden elde edilen kritik üs $\beta(L)$ ve $\beta'(L)$ değerleri.....	56
Çizelge 3.4. Sonsuz örgü kritik sıcaklığında $T_c = 2,269$ ve $L=40, 60, 80, 100, 120, 160, 200, 240$ örgülerinde M_c değeri.....	59
Çizelge 3.5. Doğrusal boyut (L) aralığı için M_c 'nin L 'ye karşı Log-Log grafiğinin eğimi.....	59
Çizelge 3.6. $0,0005 \leq t \leq 0,074$ aralığında $\chi(L)$ 'nin indirgenmiş sıcaklık $t(L) = T - T_c(L) /T_c(L)$ 'e karşı Log-Log grafiğinin eğiminden elde edilen kritik üs $\gamma(L)$ ve $\gamma'(L)$ değerleri.....	61
Çizelge 3.7. $L=40, 60, 80, 100, 120, 160, 200, 240$ örgülerinde sonlu örgü maximum değerleri χ_{\max} ve sonsuz örgü kritik sıcaklığında ($T_c = 2,269$) χ_c değerleri.....	64
Çizelge 3.8. Doğrusal boyut (L) aralığı için χ_{\max} ve χ_c 'nin L 'ye karşı Log-Log grafiğinin eğiminden elde edilen $(\frac{\chi}{\nu})_{\max}$ ve $(\frac{\chi}{\nu})_c$ 'nin değerleri....	65
Çizelge 3.9. $0,0005 \leq t \leq 0,074$ aralığında $C(L)$ 'nin indirgenmiş sıcaklık $t(L) = T - T_c(L) /T_c(L)$ 'e karşı Log-Log grafiğinin eğiminden elde edilen kritik üs $\alpha(L)$ ve $\alpha'(L)$ değerleri.....	66
Çizelge 3.10. $L=40, 60, 80, 100, 120, 160, 200, 240$ örgülerinde sonlu örgü maximum değerleri C_{\max} ve sonsuz örgü kritik sıcaklığında ($T_c = 2,269$) C_c değerleri.....	69

Çizelge	Sayfa
Çizelge 3.11.Doğrusal boyut (L) aralığı için C_{max} ve C_c 'nin L 'ye karşı Log-Log grafiğinin eğiminden elde edilen $(\frac{\alpha}{\nu})_{max}$ ve $(\frac{\alpha}{\nu})_c$ değerleri	70
Çizelge 3.12.Sonlu örgü değerleri için Binder parametresi (g_L) ve özısının (C) sıcaklık ile değişim grafiklerinin kesim noktasından elde edilen sonsuz örgü kritik sıcaklık (T_c) değerleri.....	73
Çizelge 3.13.Sonsuz örgü kritik sıcaklık ($T_c = 2,269$) değerine karşılık gelen Binder parametresi (g_L) değerleri	73

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil		Sayfa
Şekil 2.1	Bir taneciğin gidebileceği komşu gözler.....	19
Şekil 2.2	İki boyutlu kare örgüde iki farklı taneciğin rasgele hareket yaparak izledikleri yörüngeler.....	20
Şekil 2.3	Difüzyon ile sınırlı tanecik kümeleşme algoritması için akış şeması.....	21
Şekil 2.4	H=0 da kendiliğinden manyetizasyonun İMI nin sıcaklıkla değişimi.....	24
Şekil 2.5	İki boyutlu kare örgü için en yakın komşu spinler.....	25
Şekil 2.6	Bir boyutlu Örgü için (t+1) zaman adımında i. Hücrenin en yakın komşuları.....	40
Şekil 2.7	Hücre değişkeni iki hale sahip, bir boyutlu basit cellular automaton için kural 90.....	40
Şekil 2.8.	İki boyutlu kare örgüde (a) 5 komşuluk, (b) 9 komşuluk.....	41
Şekil 3.1.	(a) L=40, (b) L=60, (c) L=80, (d) L=100, (e) L=120, (f) L=160, (g) L=200, (h) L=240 örgüleri için Difüzyon ile Sınırlı Kümeleşme (Diffüsson-Limited Aggregation (DLA)) modeli kullanılarak elde edilen fraktalların şekilleri.....	51
Şekil 3.2.	Sonlu örgü için $T_c^z(L)$ 'nin $L^{1/\nu}$ 'ye karşı değişimi.....	52
Şekil 3.3.	Sonlu örgü için $T_c^C(L)$ 'nin $L^{1/\nu}$ 'ye karşı değişimi.....	53
Şekil 3.4.	$\beta(L)$ ve $\beta'(L)$ 'nin $1/L$ 'ye karşı değişimleri.....	56
Şekil 3.5.	Manyetizasyonun sıcaklık ile değişimi.....	57
Şekil 3.6.	Ölçeklenmiş manyetizasyonun ölçeklenmiş sıcaklık ile değişimi.....	58
Şekil 3.7.	Manyetizasyonun sonsuz örgü kritik sıcaklığındaki değeri M_c 'nin sonlu örgü doğrusal boyutuna karşı Log-Log değişimi.....	58
Şekil 3.8.	$\gamma(L)$ ve $\gamma'(L)$ 'nin $1/L$ 'ye karşı değişimleri.....	61

Şekil	Sayfa
Şekil 3.9. Manyetik alınganlığın sıcaklık ile değişimi.....	62
Şekil 3.10. Ölçeklenmiş manyetik alınganlığın ölçeklenmiş sıcaklık ile değişimi ($T < T_c$)	62
Şekil 3.11. Ölçeklenmiş manyetik alınganlığın ölçeklenmiş sıcaklık ile değişimi ($T > T_c$)	63
Şekil 3.12. Manyetik alınganlığın sonlu örgü kritik sıcaklığındaki değeri χ_{max} 'nin sonlu örgü doğrusal boyutuna karşı Log-Log değişimi.....	63
Şekil 3.13. Manyetik alınganlığın sonsuz örgü kritik sıcaklığındaki değeri χ_c 'nin sonlu örgü doğrusal boyutuna karşı Log-Log değişimi.....	64
Şekil 3.14. $\alpha(L)$ ve $\alpha'(L)$ 'nin $1/L$ 'ye karşı değişimleri.....	67
Şekil 3.15. Özısının sıcaklık ile değişimi.....	67
Şekil 3.16. Özısının sonlu örgü kritik sıcaklığındaki değeri C_{max} 'nin sonlu örgü doğrusal boyutuna karşı Log-Log değişimi.....	68
Şekil 3.17. Özısının sonsuz örgü kritik sıcaklığındaki değeri C_c 'nin sonlu örgü doğrusal boyutuna karşı Log-Log değişimi.....	69
Şekil 3.18. $\text{Log}((C - b^-)L^{-\alpha/\nu})$ 'nün $\text{Log}(tL^{1/\nu})$ 'e karşı değişimi.....	70
Şekil 3.19. $\text{Log}((C - b^+)L^{-\alpha/\nu})$ 'nün $\text{Log}(tL^{1/\nu})$ 'e karşı değişimi.....	71
Şekil 3.20. $\text{Log}(C - b^\pm)$ 'nin $\text{Log}(t)$ 'e karşı değişimi.....	71
Şekil 3.21. Binder parametresinin sıcaklık ile değişimi	74
Şekil 3.22. Binder parametresinin ölçeklenmiş sıcaklık ile değişimi	75
Şekil 3.23. Binder parametresinin örgü uzunluğu ile değişimi	75

SİMGELER VE KISALTMALAR

Bu çalışmada kullanılan bazı simgeler ve kısaltmalar, açıklamaları ile birlikte aşağıda sunulmaktadır.

Simgeler	Açıklama
T_c	Kritik sıcaklık
d	Uzay boyutu
α, α'	Özısı kritik üssü
β, β'	Manyetizasyon(Mıknatıslanma) kritik üssü
δ	Manyetizasyon(Manyetikleşme) kritik üssü
γ, γ'	Manyetik alınganlık kritik üssü
ξ	Korelasyon(Çaprazlama) uzunluğu
L	Doğrusal boyut
t	İndirgenmiş sıcaklık
C	Özısı
M	Manyetizasyon(Mıknatıslanma)
χ	Manyetik alınganlık
H	Dış manyetik alan
∞	Sonsuz işareti
$g(r)$	Korelasyon fonksiyonu
E_I	Ising enerjisi
J_{ij}	Spinler arası eşleşme sabiti
H_I	Ising spin enerjisi, iç enerji
H_I^i	İlk durum için Ising spin enerjisi
H_I^s	Son durum için Ising spin enerjisi
E_D	“Demon” enerjisi
ΔH_I	Ising enerjisindeki değişim

Kısaltmalar Açıklama

CA	“Cellular automaton”
Q2R	“Quatre 2 reversible”

1. GİRİŞ

Doğadaki yapılar farklı geometrik şekillere (desenlere) sahiptir. Her bir yapı ortamdaki temel yapı taşlarına göre farklı bir tanecikler kümesidir. Heterojen çevre şartları ve düzensizlik olmasına rağmen kümelerin nasıl olup da düzenli, simetrik özellikler taşıdığı temel bilim araştırmalarına konu teşkil etmiştir[1-3]. Difüzyon ile sınırlı kümeleşme (diffusion limited aggregation (DLA)) modeli 1981 yılında T.Witten ve L.M. Sander tarafından takdim edilmiştir[2-3]. Örgünün merkezine bir çekirdek tanecik yerleştirilir. İkinci tanecik merkezden uzakta bulunan gelişigüzel (rasgele) bir örgü gözünden bırakılarak rasgele hareket ettirilir. Bu tanecik çekirdeğin etrafındaki herhangi bir komşu göze ulaştıkça kümenin bir elemanı olur. Eğer tanecik hareketi esnasında kapalı kare örgünün dışına çıkarsa, o tanecik iptal edilir. Daha sonra aynı işlem yeni tanecikler için tekrarlanır. Difüzyon ile sınırlı kümeleşme (DLA) modeline göre oluşturulan tanecik kümeleri, iki boyutlu kapalı-kare örgü içerisinde merkezi taneciğe (çekirdek) bağlı ana dallar ve bu dallara rasgele noktalarından ekli alt dallardan meydana gelen seyrek yapıları kümelerdir[4-8]. DLA modelinin önerilmesinden günümüze kadar geçen süre içerisinde simülasyonlarda oluşturulan kümeler için bir kümedeki tanecik sayısı 10^2 den 10^7 ye kadar ulaşmıştır[10-13]. Böylece kümeleşmeleri daha ayrıntılı incelemek ve özelliklerini berraklaştırmak mümkün hale gelmiştir.

Difüzyon ile sınırlı kümeleşme (DLA) modeli ile yapılan çalışmalar genel olarak taneciklerin Brown hareketi yaparak küme oluşturması üzerinde odaklanmıştır. Ancak daha sonra yapılan çalışmalarda taneciklerin, ısı etkisi ile birlikte diğer koşullarda dikkate alınarak küme oluşturması incelenmektedir[9-22].

DLA modeli, bakteri kolonilerinin büyümesi, elektrolitten ayrılan maddenin bir elektrotta birikerek büyümesi, kristallerin büyümesi, şehirlerin büyümesi, yalıtkan ortamda elektrik boşalması, bitkilerin dallanması, akışkanların gözenekli ortamlarda yer değiştirmesi, canlılarda damarların ve sinirlerin dallanması gibi farklı alanlarda kullanılmaktadır.

Bir maddenin durumunda belirli bir sıcaklıkta olan ani deęişikliğe faz geçişi denir. Faz deęiştirme olayına örnek olarak demiri (Fe) verebiliriz. Demir kritik sıcaklığın (T_c) altında ferromanyetik bir özellik gösteriyor iken kritik sıcaklığın üstünde paramanyetik bir özellik gösterir. Faz geçişlerinin anlaşılması yoğun madde fiziğinin temel araştırma sahalarından biridir. Sıvıdan gaza, normal iletkeniden süper iletkene, paramanyetiklikten ferromanyetikliğe geçişler faz geçişleri için en yaygın olarak bilinen örneklerdendir[23].

Manyetik faz geçişi maddenin mıknatıslanmasındaki deęişmeye dayanmaktadır. Herhangi bir maddenin mıknatıslanması ölçülen manyetik dipol momentinin, maddenin hacmine oranı ile belirlenir. Dipol momentler elektronların hem yörünge hareketlerinden hem de spin denen iç özelliklerinden kaynaklanır.

Mıknatıslanmanın kaynağı atomların tamamlanmamış tabakalarındaki elektronların spinidir. Her elektronun spinini bir Bohr magnetonu kadar manyetik moment taşır. Yörünge açısal momentumundan bir katkı gelmez. Maddenin manyetik (mıknatıslanma) özellikleri bir dış manyetik alana gösterdikleri tepki cinsinden de anlatılabilir. Geniş anlamda maddeler ferromanyetik, paramanyetik veya diyamanyetik olarak gruplandırılabilirler. Ferromanyetizma tek kalmış elektronun spininden kaynaklanır, yani son yörüngesinde elektron çiftlenimi olmayan atomlarda gözlenir. Ferromanyetik maddeler sürekli (kalıcı) mıknatısların yapımında kullanılır. Başlangıçta mıknatıslanma yoktur. Ferromanyetik maddeler zayıf bir dış manyetik alan içinde bile birbirlerine paralel olarak yönelmeye çalışan manyetik dipol momentlere sahiptirler. Bir kere manyetik dipol momentleri paralel hale getirildikten sonra, dış alan ortamdaki kaldırılabilir bile madde mıknatıslanmış olarak kalacaktır. Bu sürekli yönelim komşu olan manyetik momentler arasındaki etkileşimden kaynaklanır. Ferromanyetizmada her dipol komşusuyla aynı yönde olmaya meyyleder. Ferromanyetizma aynı zamanda sıcaklığa baęlı bir özellik olup maddenin mıknatıslanması $T=0$ °K için en büyüktür ve sıcaklık arttıkça maddenin mıknatıslanması azalarak Curie sıcaklığı adı verilen bir T_c sıcaklığında sıfır olur. T_c nin üstündeki sıcaklıklarda madde paramanyetik fazda bulunur. Bu durumda termal sıcaklıktan kaynaklanan hareketler komşu atomlar arası etkileşimlerden ileri gelen

yönlendirici kuvvetleri yenecek kadar büyür. Ancak kritik sıcaklık dışarıdan uygulanan manyetik alanla değiştirilebilir ve dış alanın varlığı kritik sıcaklığın değerini büyütür. Yani madde daha yüksek sıcaklıkta faz değiştirir. Curie sıcaklığı civarında manyetik dipol momentlerin (spinlerin) aşağı ve yukarı yönelimlerinin sayısı hemen hemen eşit olacaktır. Sıcaklık kritik değere T_c ulaştığında ve geçtiğinde tüm manyetik momentler rast gele yönelmiş olur. Böylece madde paramanyetik hale geçer. Paramanyetik madde, manyetik dipol momentli atomların varlığından kaynaklanır. Bu manyetik dipoller birbirleri ile yalnız çok zayıf etkileşimde bulunurlar ve bir dış manyetik alan içerisine konulduğu zaman atomik dipoller alan yönünde yönelmeye zorlanırlar. Bu durumda madde mıknatıslanmış olur. Eğer uygulanan dış manyetik alan kaldırılırsa madde içindeki manyetik dipol momentler eski hallerini alırlar. Atomları sürekli manyetik dipol momente sahip olmayan maddelere ise diyamanyetik maddeler denir. Diyamanyetik bir maddeye bir dış manyetik alan uygulandığında bu alana zıt yönde zayıf bir manyetik dipol moment oluşur. Bu durumda madde mıknatıslanmış olur. Uygulanan dış manyetik alanın kaldırılması durumunda ise madde içindeki manyetik dipol momentler tekrar eski halini alırlar[24].

Ising modeli spinler arası basit etkileşimleri içerir ve ferromanyetik maddelerin gösterdiği termodinamik davranışların anlaşılmasını sağlayan basit bir model oluşturur. Ferromanyetik metallerde (Fe, Ni gibi) dış alanın olmadığı durumda bile Curie sıcaklığından düşük sıcaklıklarda kendiliğinden mıknatıslanma oluşmaktadır. Metalin sıcaklığı Curie sıcaklığına yaklaştığında kendiliğinden mıknatıslanma sıfıra gitmekte ve Curie sıcaklığının üstünde ise sıfır olmaktadır. Ising modelinin en basit hali iki durumlu bir tane düzen parametrelili bir sistem olan spin $\frac{1}{2}$ Ising modelidir[25]. Bundan başka üç durumlu ve iki düzen parametrelili bir sistem olan spin-1 Ising modeli de araştırmacılar tarafından incelenmektedir[23,26-32]. Spin-1 Ising modeli Blume-Emery-Griffiths modeli olarak da adlandırılır. En genel hamiltoniyen

$$\begin{aligned}
H = & -H_s \sum_{j=1}^N S_j - H_Q \sum_{j=1}^N Q_j + \Delta \sum_{j=1}^N S_j^2 - J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - H_3 \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j (S_i + S_j) \\
& - K \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 S_j^2
\end{aligned} \tag{1.1}$$

şeklinde verilir. Burada $\langle ij \rangle$ sembolü en yakın komşu spin çifti, H_s : Dipol(iki kutuplu) momentinden dolayı meydana gelen manyetik alan, H_Q :Kuadrupol (dört kutuplu) momentinden dolayı meydana gelen manyetik alan, N : Örgü noktası sayısı, Δ : Kristal alan etkileşme sabiti, J : Spinler arası eşleşme sabiti K : Bikuadratik değişme için etkileşme sabiti ve H_3 de üçüncü dereceden magnetik pertürbasyonu (tedirginliği) göstermektedir. Eğer $H_3=K=0$ alınırsa model, Blume-Capel Modeli olarak adlandırılır[26-31].

Bu tez çalışmasında Ising modeli denildiğinde spin $\frac{1}{2}$ Ising modeli anlaşılmaktadır. En basit spin $\frac{1}{2}$ Ising modelinin bir boyutlu durumu E.Ising tarafından 1925'teki tezinde çözülmüştür. Ising modelinde incelenen sistem örgü konumları adı verilen N tane sabit noktadan oluşan d -boyutlu periyodik bir örgüdür. Örgünün geometrik yapısı iki boyutlu uzayda kare, üçgen vb., üç boyutlu uzayda küp vb. daha yüksek boyutlu uzaylarda genel olarak soyut küp(hypercube) olabilir. Her bir örgü konumuna, $+1$ veya -1 değerlerinden birisini alabilen N tane spin değişkeni takılmıştır. Sistemde bundan başka değişken yoktur. Eğer $s_i=+1$ ise i -nci örgü konumunun spin yukarı durumda olduğu ve $s_i=-1$ ise spin aşağı durumda olduğu söylenir. Verilen bir $\{s_i\}$ kümesi bütün sistemin konfigürasyonunu belirtmekte ve $\{s_i\}$ ile belirtilen konfigürasyona sahip olan bir sistemin enerjisi aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır[23,33].

$$H_I = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - H \sum_{i=1}^N S_i \tag{1.2}$$

Burada I alt indisi Ising enerjisini, $\langle ij \rangle$ de en yakın komşu spin çiftleri üzerinden toplamı göstermektedir. Sistem düzgün bir H dış manyetik alanı ile ya aynı ya da zıt

yönlü olmaya zorlanan mıknatıslar şeklinde düşünülebilir. Spinler arası eşleşme sabitleri J_{ij} için, en sade durumda, tek bir değer J kullanılır; $J_{ij} = J$. Eğer $J > 0$ ise, komşu spinler hem birbirleriyle hem de H ile aynı yönde olmaya çalışırlar, böylece model ferromanyetik olur. Eğer $J < 0$ ise, komşu spinler hem birbirlerine hem de H ya zıt yönde olmaya çalışırlar, böylece model antiferromanyetik olur. Ising modelinde bütün termodinamik fonksiyonlar, E_I enerjili bütün konfigürasyonlar üzerinden hesaplanmaktadır. E_I enerjili bir sistemin ağırlık fonksiyonu aşağıdaki gibidir.

$$Z_I(H, T) = \sum_{S_1} \sum_{S_2} \dots \sum_{S_N} e^{-\beta E_I(S_i)} \quad (1.3)$$

Burada her bir s_i spin değişkeni bağımsız olarak ± 1 değerlerini alabildiğinden, yukarıdaki toplam 2^N terimden oluşmaktadır. Termodinamik nicelikler genel olarak spin başına serbest enerjiden elde edilmektedir. Serbest enerji Boltzman dağılımına uyan sistemlerin serbestlik derecesi başına enerjisi olup

$$f(H, T) = -kTN^{-1} \log Z_I(H, T) \quad (1.4)$$

şeklinde ifade edilir. Serbest enerjiye bağlı olarak spin başına termodinamik nicelikler aşağıdaki şekilde tanımlanmaktadır[25,34].

$$U_I(H, T) = -kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{f}{kT} \right) \quad (1.5)$$

$$C_I(H, T) = \frac{\partial U_I}{\partial T} \quad (1.6)$$

$$M(H, T) = -\frac{\partial}{\partial H} \left(\frac{f}{T} \right) \quad (1.7)$$

$$\chi(H, T) = \frac{\partial M}{\partial H} \quad (1.8)$$

Burada U_i iç enerji, C_i özısı, M düzen(manyetikleşme) parametresi ve χ manyetik alınganlıktır. Dış alanın değeri $H = 0$ olduğunda $M(0,T)$ niceliği kendiliğinden mıknatıslanma (manyetizasyon, düzen parametresi) olarak adlandırılmaktadır. Ferromanyetik sistemlerde $M(0,T)$ sıfırdan farklıdır. Bu çalışmada $J > 0$ hali yani ferromanyetizma ve dış manyetik alan H 'nın sıfır olduğu durum göz önüne alınmaktadır. Ising modeli faz geçişi yapabilen sistemleri temsil eden modeldir. Faz geçişi serbest enerji veya onun türevlerinde singülerlik(ıraksama) oluştuğunda ortaya çıkar. Faz değişimi sırasında maddenin özelliğinde ani bir değişim gözlenir. Faz geçişi gösteren sistemler için geliştirilen Ising modeli sadece iki boyutta tam olarak çözülmüştür. Faz geçişleri ve kritik olayların anlaşılmasında ilerlemenin büyük bir bölümü tamamen ya da kısmen bilgisayar simülasyon sonuçlarına dayanır. Simülasyon, gerçek bir sistemin modelini tasarlama süreci ve sistemin işlemesi için sistemin davranışını anlamak veya değişik görüşleri değerlendirmek amacıyla bu model üzerinde denemeler yapmaktır. Simülasyon yöntemi, serbestlik derecesi büyük olan karmaşık sistemlerin laboratuvar ortamında incelenmesi hem teknik açıdan(teknik eleman,araç ve gereç) çok zor hem de ekonomik açıdan pahalı ve çok zaman alması sebebiyle deneysel çalışmaların bilgisayar ortamında yapılabilmesini mümkün kılmakta ve sistemin termodinamik özelliklerinin, anlaşılmasını sağlamaktadır. İstatistik mekanikte bazı problemlerin tam çözümü yapılamazken, yaklaşık çözüm bulmak mümkün olabilir. Bu yaklaşık çözümlerin doğruluğunu denemek ve desteklemek açısından simülasyon önemlidir. Bilgisayar simülasyonu ile teorileri test etmek de mümkündür. Simülasyon sonuçları, teorik sonuçların yanı sıra gerçek deney sonuçları ile de test edilebilir. Yani bilgisayar simülasyonu teori ve gerçek madde ve malzemeler ile yapılan deney arasında köprü vazifesi görmektedir. Simülasyon için kullanılan bilgisayar sisteminin kapasitesine bağlı olarak, simülasyonunun tamamlanma süresi gerçek deneylerin yapılabilme süresinden çok daha kısa olabilir[35].

Ferromanyetik maddelerin yapısını anlamak için önerilen Ising modelinin tam çözümü 1944 yılında Onsager tarafından iki boyutlu uzayda[36] ve dış manyetik alanın yokluğunda analitik olarak gerçekleştirilmiştir. Onsager'ın bu çözümü

modelin kritik üstlerinin, Landau teorisinin o ana kadar doğru verdiği düşünülen sonuçlarından oldukça farklı olduğunu göstermiştir. Ancak gösterilen yoğun çabalara rağmen ne manyetik alanın varlığında iki boyutlu Ising modelinin, ne de üç ve daha yüksek boyutlu Ising modelinin analitik çözümü henüz yapılamamıştır. Monte Carlo ve Molekül Dinamiği istatistik sistemlerin sayısal simülasyonu, dolayısı ile faz geçişi ve kritik olay çalışmalarında kullanılan en temel araçlardandır. Metropolis ve arkadaşlarının algoritması ile Molekül Dinamiği arasında yer alan bir simülasyon yöntemi 1983’de M.Creutz[37] tarafından geliştirilmiştir. Öncelikle “demon”(spine eşlenik momentum) denilen yeni bir serbestlik derecesi tanımlanmaktadır. Molekül dinamiğinde eşlenik momentumun kinetik enerji hesaplamada kullanılmasına benzer şekilde, bu yeni değişken (“demon”) de kinetik enerji taşır. Sistemin toplam enerjisi korunacak şekilde bu “demon” rast gele olarak spinleri ziyaret eder. Onun için bu algoritmaya Creutz’un gezgin “demon” algoritması denir. Bu algoritmada tek bir gezgin “demon” kullanılabilceği gibi birden fazla gezgin “demon” da kullanılabilir. 1986’da M.Creutz[38] Ising modelinin deterministik bir “cellular automaton” ile simülasyonunu iki boyutlu uzayda (d=2) gerçekleştirmiştir; Creutz bu modelinde kare hücreli örgü kullanmıştır. Kare örgüdeki her bir hücreye dört ikili “bit” karşılık getirilmekte ve bir hücredeki değişkenlerin alacağı değer bir önceki zaman adımındaki kendi değeri ile ona en yakın komşularındaki değişkenlerin değerlerinden aşağıda verilen kurala göre tayin edilmektedir. Bu modeldeki dört ikili “bit” den ilki, B_i Ising spinidir; “0” veya “1” değerlerini alabilir. Dış manyetik alanın olmadığı ($H=0$) durumda $S_i=2B_i-1$ olmak üzere, Ising spin enerjisi H_I aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır.

$$H_I = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad (1.9)$$

Burada $\langle ij \rangle$ bütün en yakın komşu hücre çiftleri üzerinden toplamı göstermektedir. Her bir hücredeki ikinci ve üçüncü “bit” spine eşlik eden momentuma (“demon”) karşılık gelmektedir. $D_{1,i}$ ve $D_{2,i}$ ile gösterilen bu bitler “0” veya “1” değerlerini alabilmekte ve $(D_{1,i}x2^0 + D_{2,i}x2^1)$ şeklinde 0,1,2 ve 3 değerlerini alabilen bir tam

sayı oluşturmaktadır. Momentum değişkenine karşılık gelen kinetik enerji H_K bu tam sayı değerlerinin dört katını almaktadır.

$$H_K = 4 \sum_i (D_{1,i} x 2^0 + D_{2,i} x 2^1) \quad (1.10)$$

Kinetik enerji bu değerleri aldığı anda, bir spin ters çevrildiğinde sistemin Ising enerjisinde oluşabilecek en büyük enerji değişimi ($|\Delta E_I| = 8$) karşılanabilmektedir. Bu sırada toplam enerji $H = H_I + H_K$ korunmaktadır. Dördüncü “bit” “cellular automaton”ın zamanla dama tahtası düzeninde gelişimini sağlamakta, ve böylece Ising modelinin “Cellular Automaton” ile simülasyonunu mümkün kılmaktadır.

Gelişim süresince dama tahtasının siyah(=1) hücrelerine ait spinlere kural uygulanarak ters çevirme girişiminde bulunulur ve rengi beyaza(=0) çevrilir; beyaz hücrelerin ise sadece rengi siyaha çevrilir. Rengi beyaza çevrilen siyah hücrelerin spini ters çevrilerek (1→0 veya 0→1) Ising enerjisindeki ΔH_I değişimi hesaplanır. Eğer bu enerji değişimi, bu hücrenin momentum değişkenine aktarılabilir veya momentum değişkeninden alınabilecek bir değerde ise ve toplam enerji korunuyor ise spin ters çevrilir. Buna uygun olarak momentum da değiştirilir; aksi halde spin de momentum da değiştirilmez. Bu işlem örgüdeki bütün siyah hücrelere aynı zaman adımında uygulanmakta ve gelişim süresince periyodik sınır şartı kullanılmaktadır. Bu model, sistemin toplam enerjisi korunduğundan dolayı mikrokantoniktir; ancak sistemin kinetik ve iç enerjileri simülasyon süresince dalgalanmaktadır. Bu yüzden $T = \gamma/\beta$ sıcaklığında bir sistemde E_i kinetik enerjili bir konfigürasyona rastlama ihtimali Boltzman ağırlıklı üstel bir dağılıma uymaktadır. $P(E_i) \sim \exp(-4\beta E_i)$. Burada $H_K = 4E_i$ ve $E_i = D_{1,i} + 2D_{2,i}$ dir. Bu dağılıma uygun olarak kinetik enerjinin beklenen değeri aşağıdaki şekilde ifade edilmektedir.

$$\langle E_i \rangle = \left(\sum_{n=0}^3 4n e^{-4n\beta} \right) / \left(\sum_{n=0}^3 e^{-4n\beta} \right) \quad (1.11)$$

Bu denklem sistemin sıcaklığını ($T = 1/\beta$) sayısal(nümerik) yöntemle çözerek elde etmek için kullanılmaktadır.

“Cellular Automaton” ilk olarak Neuman ve Ulam tarafından “cellular space” adı ile biyolojik sistemlerin simülasyonu için[39-41] önerilmiştir. En basit durumda “cellular automaton” 0 veya 1 değerini alabilen bir hücre veya örgü noktaları satırından oluşur. Bu değerler belirli sabit bir kurala göre her bir zaman adımında(zaman kesikli değerlere sahiptir) yenilenir. “Cellular automaton” hücreleri sadece bir çizgi üzerinde değil, herhangi bir boyutta düzenli bir örgü üzerinde sıralanabilir. Yapısının basitliğine rağmen çoğu “cellular automaton”lar hayli karmaşık davranışlar üretir. Böylece cellular automatonlar bir çok karmaşık olayın genel özelliklerini kapsar. Daha detaylı(ayrıntılı) ve gerçekçi modeller çoğu zaman biraz daha karmaşık “cellular automaton”ları içerir.

“Cellular automaton” fiziksel sistemler için matematiksel bir modeldir. Bu model için ilk temel teoriler 1983 yılında Wolfram tarafından verilmiştir[39-41]. Fizik, Kimya ve Biyolojideki dinamik sistemler için bir çok uygulamaları vardır[45]. Bölgesel iç etkileşmeye sahip çok sayıda farklı elemanlar içeren fiziksel sistemler sıklıkla “cellular automaton” olarak modellenmiştir. Daha genel olarak makroskopik seviyede bir “cellular automaton” da her bir hücre bir çok molekül ihtiva eden bir bölgeyi temsil edebilir. “Cellular automaton”larda uzay ve zaman kesikli değerlere sahiptir. Sonsuza kadar genişletilebilen düzenli hücreler örgüsünden oluşur. Örgünün her bir hücresinde kesikli değerler alabilen değişkenler yer almaktadır. Bir “cellular automaton”da hücrelerdeki değişkenlerin bir zaman adımında alacağı değerler, bir kural ile bir önceki zaman adımında aldıkları değerlerden belirlenir. Genel olarak bir “cellular automaton”ın gelişiminin yapıldığı örgüde periyodik sınır şartları kullanılır.

Ising modelinin ve çeşitli problemlerin bir “cellular automaton” olarak simülasyonu Vichniac tarafından önerilmiştir[43]. İki boyutlu kare örgüler için komşu hücrelerin sayısına ve konumuna bağlı olarak bir çok “cellular automaton” tanımlanmıştır. Ising modelinin simülasyonu için iki farklı “cellular automaton” algoritması vardır. Bu

algoritmalarından ilki Vichniac[43,44] tarafından Q2R algoritması adı altında ortaya konulmuş, Pomeau ve Hermann tarafından geliştirilmiştir. İkincisi ise Creutz tarafından ortaya atılmış olup Creutz “cellular automaton”ı adı ile anılmaktadır[45]. Q2R algoritmasında spin-spin etkileşme enerjisi(ising enerjisi veya iç enerji) sistemin toplam enerjisine karşılık gelmektedir.Q2R algoritması ile toplam enerjinin korunduğu mikrokantonik bir küme oluşmaktadır. Simülasyon süresince herhangi bir spin değişiminde iç enerjinin korunduğu konfigürasyonlar (spin konumları) üretilmektedir. İç enerji simülasyon süresince sabit kaldığından özısı enerji dalgalanmaları kullanılarak hesaplanamamaktadır[43,44,46-51]. Bu kısıtlama, sistemin iç enerji ve spine eşlenik momentuma karşılık gelen kinetik enerjinin toplamının korunduğu Creutz “cellular automaton” ile ortadan kalkmaktadır. Creutz “cellular automaton”ı geleneksel(alışıl gelmiş) Monte Carlo yöntemine göre iki avantaja sahiptir(iki bakımdan tercih edilmektedir). Bunlardan biri, geleneksel Monte Carlo metodundan daha hızlı olması ve diğeri yüksek kalitede rast gele sayılar gerektirmemesidir.

Ising modeli Onsager tarafından iki boyutlu uzayda analitik olarak çözülmüş[36] ve özellikleri elde edilmiştir. Sonlu örgü ölçekleme teorisi iki boyutlu Ising modeli için termodinamik niceliklerin sonlu örgülerdeki davranışlarından sonsuz örgü davranışını belirleme imkânı verir. Monte Carlo metodları istatistik fiziğinde dengede ve dengede olmayan problemlerin çalışılmasında önemli rol oynar[52]. Monte Carlo simülasyonları sonlu örgü ölçekleme teorisinin çeşitli yönlerini doğrulamak ve test etmek için kullanılır. Renormalizasyon teorisi ise, “Critical Phenomena” ve faz geçişinin anlaşılmasının temelini oluşturur[53]. Renormalizasyon grup teorisi “hyperscaling” bağıntısının niçin genel bir bağıntı olduğunu ve $d \leq 4$ için sağlayıp $d > 4$ için başarısız olduğunu açıklamaktadır. Faz geçişi sadece termodinamik limitte olur. Faz geçişi durumunda sistemde enerji dalgalanmaları olur. Enerji dalgalanmasının fazla olması daha fazla ve güvenilir “data”lar(veriler) elde edilmesini sağlar. Bugüne kadar Creutz “cellular automaton” ında termodinamik nicelikler üzerinde boyut etkisini ve teorik çalışmaların öngördüğü sonuçların doğruluğunu araştırmak için $d=2$ [6,54,55], $d=3$ [56], $d=4$ [57-65], $d=5$ [66-68],

$d=6$ [69-74], $d=7$ [69,75-78], $d=8$ [79,80] boyutlu Ising modellerinin simülasyonları yapılmıştır. Geleneksel sonlu örgü ölçekleme teorisi $d < 4$ için uygulanmaktadır.

Bu tez çalışmasının amacı Difüzyon ile Sınırlı Kümeleşme (Diffusion-Limited Aggregation (DLA)) modeli kullanılarak $L=40, 60, 80, 100, 120, 160, 200, 240$ boyutlu kare örgülerde elde edilen fraktallar, $d=2$ boyutlu Ising modeli için creutz cellular algoritması kullanılarak simülasyonu gerçekleştirmek ve elde edilen sonuçlardan yararlanarak sonlu örgü ölçekleme bağıntılarının doğruluğunu test etmektir. Creutz “cellular automaton”ı ile yapılan diğer çalışmalarda demon sayısı[81], “demon”un “bit” sayısı (“demon” enerji seviyesi sayısı)[56,69] ve sistemin dengeye ulaşması için geçen adım sayısının etkisi araştırılmıştır. Bu çalışmalarda en yakın komşu spin etkileşmeleri dikkate alınmıştır. Daha uzak komşu spinler dikkate alınarak ve dış manyetik alan uygulanarak da[82] iki boyutlu Creutz “cellular automaton” ında simülasyonlar gerçekleştirilmiştir[83].

2. TEORİ

2.1. DLA Modelini Temel Alan Kümeleşme Modelleri

2.1.1. DLA modeline yüzey gerilimi katılması -1

Yüzey gerilimi ve difüzyon kontrolünde büyüme örnekleri şunlardır: aşırı soğumuş eriyikten büyüme, aşırı doymuş çözeltiden büyüme, besinli ortamda hücre topluluklarının büyümesi. Yüzey gerilimi, küre yüzeyinin küre hacmine oranını küçülterek yoğun küme oluşturma eğiliminde iken, difüzyon ağaç görünümlü küme oluşturma eğilimindedir. Oluşmakta olan kümenin ne şekil alacağını bu iki zıt eğilimin farkı belirlemektedir. Sadece difüzyon göz önüne alınır ve yüzey gerilimi ihmal edilirse, oluşan küme çok dallı ve çok seyrek görünümlü olur. Model, bir x gözünün dolma hızının $V(x)$ aşağıdaki ifadeye uygun olduğunu kabul etmektedir.

$$V(\underline{x}) = A[1 - s(\underline{x})]n(\underline{x})D(\underline{x}, l_D) \quad (2.1)$$

Bu ifadedeki terimlerin anlamları şöyledir:

$$S(\underline{x}) = \begin{cases} 1, & \underline{x} \text{ dolu ise} \\ 0, & \underline{x} \text{ boş ise} \end{cases} \quad (2.2)$$

$n(\underline{x})$: en yakın dolu komşularının sayısı

$-n(\underline{x})$: [84-87] daki yüzey geriliminin karşılığıdır; yüzeyin eğriliği ile orantılıdır ve sadece yüzeydeki gözlerden büyümeye imkan verir.

$D(\underline{x}, l_D)$: etkin difüzyon sabitidir. x merkezli, l_D yarıçaplı bir bölgedeki dolu gözlerin, x de sebep oldukları perdeleme etkisini belirtir.

A : birleme sabitidir. Kümenin geometrisine etkisi yoktur.

$n(x)$ in kararlı hale getirme etkisi ile $D(\underline{x}; l_D)$ nin kararsız hale getirme (kararlı hali bozma) etkisi arasındaki çekişme (zıtlık), yüzey gerilimi ve difüzyon kontrolündeki küme büyümesinde var olan zıtlığın benzeridir. $0,06 \leq l_D \leq 10,0$ (örgü sabiti cinsinden) ve $5000 \geq N \geq 1500$ tanecikli kümeler için simülasyonlar yapılmıştır.

Tek bir çekirdekten büyüyen kümelerde, l_D nin aldığı değerlere göre kümelerin şekilleri farklılaşmakta ve $l_D \approx 8$ için ağaç görünümlü kümeler oluşmaktadır. Ancak fraktal boyut $df \approx 2$ olup, DLA kümeleri için hesaplanmış değerden, $df = 1,66$, [2,3] büyüktür [88].

2.1.2. DLA modeline yüzey gerilimi katılması -2

Katılma sırasında oluşan desenleri elde etmek üzere DLA modeli üzerinde genelleştirmeler yapılmaktadır. Tek bir çekirdekten büyüyen iki boyutlu kümeler önce daire şeklinde iken daha sonra dallı büyümeye geçiş yapmaktadır. Anizotropik yüzey geriliminin etkileri incelenmektedir; bunun için taneciklerin yapışma ihtimaliyetlerinin, arayüzeyin bölgesel yönelimine bağlı olarak değiştiği kabul edilmektedir. Tercihli rasgele yürüyüş yapan taneciklerin birikmesi yolu ile yönlü katılmanın simülasyonu yapılmaktadır. Yönlü katılma deneylerinin temel özellikleri hesaba katıldığında doğrusal olarak kararlı desenler elde edilmektedir. Simülasyonlar sonucunda elde edilen desenler deneylerdekilere çok benzerlik göstermektedir.

Model aşağıda verilmektedir:

Katılma cephesinin hareketini difüzyon alanı $u(x,t)$ tayin eder, eğer arayüzeyin yavaş ilerlediği farz edilirse $\nabla^2 u(x,t)$ denklemini sağlar. Yüzeyden çok uzaklarda harekete geçen bir taneciğin rasgele yürüyerek x noktasına t anında varma ihtimali, yukarıdaki denkleme, denklem x ve t nin kesikli değerler almasına uygun olarak düzenlendiğinde uymaktadır [2,3]. Bu denklemin arayüzey sıcaklığı T_{int} ile erime sıcaklığı T_M arasındaki GibbsThomson bağıntısı,

$$T_{\text{int}} = T_M \left(1 - \frac{\gamma K}{H} \right) \quad (2.3)$$

dikkate alınarak çözülmesi gerekir. Bu ifadede γ yüzey gerilimini, K arayüzeyin bölgesel eğriliğini, H 'da erime ısısını göstermektedir. Bu şartın etkilerini göz önüne alabilmek için DLA'da şu değişiklik yapılmaktadır: Küme yüzeyine yapışma ihtimaliyeti arayüzeyin bölgesel eğriliğine bağlıdır. Gibbs-Thomson bağıntısına göre, $K > 0$ ise $T_{\text{int}} < T_M$ olur ve yerel sıcaklık azalma eğilimine geçer. Bu etki yerel büyüme hızını azaltır (büyümeyi yavaşlatır). Yüzey geriliminin bu kararlı hale getirme özelliğini hesaba katmak için yapışma ihtimaliyeti diye bir nicelik tanımlanmaktadır; $K > 0$ olan yerlerde yapışma ihtimaliyeti daha küçüktür ve küme bu yerlerde daha yavaş büyür. Yüzeyde bir x noktasındaki yerel eğriliğin ölçüsü olarak x merkezli ($L \times L$) alanlı bölgedeki kümeye ait tanecik sayısı N_L kullanılmaktadır. $n_L = \frac{N_L}{L^2}$ ve $n_0 = \frac{L-1}{2L}$ olmak üzere $(n_L - n_0)$, ortalama yerel eğriliğin yaklaşık değeri olarak alınabilir; n_0 , bir taneciğin yüzeye dokunduğu x noktasındaki düz arayüzeye karşılıktır. Yapışma ihtimaliyetinin eğriliğe bağımlılığı için

$$\rho(n) = A(n - n_0 + B) \quad (2.4)$$

ifadesi kullanılabilir; n , arayüzeye varış yerini çevreleyen bir kutu içindeki normalleştirilmiş tanecik sayısı olup, eğrilik K bununla temsil edilmektedir. Gibbs - Thomson bağıntısı ile bu ifade ilişkilendirilirse,

$$B = T_M \quad (2.5)$$

$$\frac{A}{B} = \frac{\gamma}{H} \quad (2.6)$$

$$(n_0 - n) = K \quad (2.7)$$

olduğu görülür. A veya B'yi değiştirerek düzensiz fraktal büyümeden kar tanesi görünümlü büyümeye geçiş yapılabilir. Modelin kuralları özetle şunlardır:

1. Tanecikler DLA daki gibi rasgele yürür.
2. Taneciklerin büyümekte olan küme yüzeyine yapışma ihtimali arayüzeyin eğriliğine bağlıdır.
3. Tanecik, en yakın komşu sayısı en fazla olan (potansiyel enerjisi en düşük olan) bir konumda kararlı duruma gelir.

Bu model ile [88]'deki model arasındaki farklılık arayüzeydeki yerel eğriliğin hesaba katılma tarzından kaynaklanmaktadır. [88]'da yüzeydeki bir boş göze bir taneciğin yerleşme ihtimali, o gözün en yakın dolu komşularının sayısı ile orantılıdır. Buradaki modelde ise, bu yerleşme ihtimalini bulmak için bu gözü merkez kabul eden (LxL) tane göz kontrol edilerek dolu gözlerin sayısı N_L elde edilmektedir[89].

2.1.3. Tanecikler arasında dipol etkileşmesi var iken kümeleşme

DLA modeli temel alınarak tanecikler arasında dipol (iki kutuplu) etkileşmesi (uzun menzillidir) var iken kümeleşme incelenmektedir. İki kutuplu etkileşmesi manyetik türden alınarak iki ve üç boyutlu uzaylarda simülasyonlar yapılmaktadır. Model aşağıda açıklanmaktadır: İki dipol arasındaki etkileşme enerjisi hem aralarındaki uzaklığa hem de birbirine göre yönelmelerine bağlıdır. $\vec{\mu} = \mu \vec{u}$ bir taneciğin manyetik dipol momentini ve $\vec{u}, \vec{\mu}$ yönünde birim vektör olmak üzere etkileşme enerjisi,

$$U_{ij} = \mu^2 u_{ij} \quad (2.8)$$

$$u_{ij} = \left[\vec{u}_i \cdot \vec{u}_j - 3 \frac{(\vec{u}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{u}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^2} \right] / r_{ij}^3 \quad (2.9)$$

\vec{r}_i ve \vec{r}_j , i-nci ve j-inci dipollerin (dipol momentli taneciklerin) konumları, u_{ij} boyutsuz dipol enerjisi ve $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$ dir. Taneciklerin rasgele yürüyüşleri kümedeki

taneciklerin uyguladıkları kuvvetlerden dolayı etkilenir. Bu özellik şöyle hesaba katılmaktadır. Tanecik sayısı $(n-1)$ olan ve her bir taneciği $\vec{r}_{ij} = 1, 2, \dots, n-1$ konumlarında bulunan bir kümeyle, kümeleşmenin bir anında \vec{r}_n konumunda bulunan bir tanecik (n-inci tanecik) rasgele yürüyüş yaparak geliyor olsun. Bu taneciğin kümenin tanecikleri ile etkileşme enerjisinin toplam değeri

$$u_T = \sum_{i=1}^{(n-1)} U_{ni} \quad (2.10)$$

dir. Tanecik Brown hareketi (rasgele hareket) yaparak ve her adımda tanecik çapı (d) kadar ve rasgele seçilen yönde giderek bir \vec{r}_n konumuna gelsin. Bu sırada tanecik dipol momentinin ($\vec{\mu}$) yönü değişmemekte ve enerjisinde $\Delta u_T = u'_T - u_T$ kadar bir değişim olmaktadır. Eğer $\Delta u_T < 0$ ise, bu hareket geçerli kabul edilir. Eğer $\Delta u_T > 0$ ise, hareket

$$P = e^{-K(\Delta u_T)} \quad (2.11)$$

ihtimali ile geçerli kabul edilir. Buradaki K parametresi yürüyen taneciğin sahip olduğu dipol etkileşme enerjisi ile ısı enerjisi arasındaki çekişmenin bir ölçüsüdür:

$$K = \frac{\mu^2}{d^3 k_B T} \quad (2.12)$$

$K^{-1} = 0$ uç durumunda, eğer taneciğin enerjisi sadece dipol etkileşme enerjisine indirgeniyor ise taneciğin hareketi geçerli kabul edilir. $K^{-1} \rightarrow \infty$ uç durumunda taneciğin bütün hareketleri kabul edilir, yani tanecik sadece rasgele yürüyüş (Brown hareketi) yapar ve model temel DLA modeline indirgenir[90].

2.1.4. İki boyutlu uzayda uzun menzili çekici etkileşmelerin etkisinde büyüme

DLA modeli temel alınarak tanecikler arası uzun menzilli çekici $u(r) = p/r^\alpha$ etkileşme potansiyeline göre tanecik kümeleşmesi incelenmektedir. Simülasyonlar üçgen örgüde yapılmakta ve böylece anizotropi göz önüne alınmaktadır. Aşağıda tanımlanmakta olan model, $p \rightarrow 0$ veya $\alpha \rightarrow \infty$ uç durumlarında DLA modeline, sürekli ortam uç durumunda ise Smoluchowski denkleminde dönüşmektedir. Modelin kuralları şunlardır:

1. Çekirdek örgü merkezinde bulunmaktadır.
2. İç yarıçapı, kümeyi içine alan en küçük çemberin yarıçapı r_0 olmak üzere, $r_{iç} = \frac{4}{3}r_0$ ve dış yarıçapı da $r_{dış} = \frac{5}{3}r_0$ olan bir bölge tanımlanmaktadır
3. Yukarıda sözü edilen bölgede rasgele bir örgü noktası (i, j) seçilip, sonsuzdan bir tanecik bu noktaya atlatılmaktadır; bu sırada taneciğin enerjisinde küme tanecikleri ile etkileşmesinden dolayı ΔU kadar değişme olur.

$$\Delta U = U_{ij} = \sum_{k=1}^N \frac{\rho}{r_{ij,k}^2} \quad (2.13)$$

Bu atlama,

$$P(\Delta U) = \frac{1}{2} \left(1 - \tanh \left(\frac{1}{2} \Delta U \right) \right) \quad (2.14)$$

Glauber ihtimaliyetine göre gerçekleşir ya da gerçekleşmez.

4. Tanecik (i,j) noktasından en yakınındaki boş örgü noktasına (l,m) atlar, bu sırada enerjisinde $\Delta U = U_{lm} - U_{ij}$ kadar değişme olur. Bu atlama da Glauber ihtimaliyetine göre gerçekleşir ya da gerçekleşmez.

5. Yukarıdaki adım, tanecik büyüme noktasından $2r_0$ uzaklığına ulaşana kadar yinelenir.

6. Tanecik $2r_0$ uzaklığına ulaştığında ihmal edilerek simülasyon 3. adımdan yeniden başlatılır; eğer büyüme noktasına ulaşmışsa oraya yerleştirilir ve r_0 için yeni değer hesaplanarak 2.adımdan simülasyona devam edilir.

DLA'da oluşturulan küme yapısından, bu temel yapının en ince altı dallı olanına kadar kümeler oluşturulabilmektedir[91].

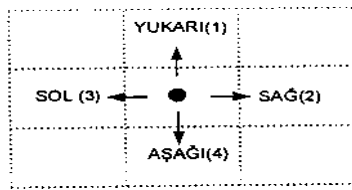
2.2. Çok Boyutlu Uzaylarda DLA Modeli

DLA modeli kullanılarak uzay boyutu $2 \leq d \leq 6$ aralığında olmak üzere kare gözlü örgülerde küme simülasyonları yapılmaktadır. 2 ve 3 boyutlu uzaylarda ayrıca örgüsüz simülasyonlar yapılmaktadır. Yapışma ihtimaliyeti (s) değiştirilerek yapılan simülasyonlar, küçük s değerlerine doğru daha yoğun kümeler vermekte fakat $0,1 \leq s \leq 1$ aralığındaki değerler için fraktal boyut değişmemektedir. Örgüsüz simülasyonlar da aynı sonucu vermektedir. Simülasyon yapılan bütün boyutlarda ($2 \leq d \leq 6$) geçerli olan $d_f = \frac{5d}{6}$ ifadesi sağlanmaktadır.

2.3. Difüzyonla Sınırlı Tanecik Kümeleşme Algoritması

Difüzyon ile sınırlı tanecik kümeleşme (DLA) modelinde L doğrusal boyutlu bir kapalı kare örgü ve yerleşeceği tahmin edilen parçacık (tanecik) sayısı belirlenir. Bu örgü içerisinde taneciklerin etrafında kümeleşeceği tohum (çekirdek) tanecik, koordinatları keyfi olarak belirlenen bir göze (hücreye) yerleştirilir. Kare örgünün kenarlarındaki göz sayısı $4L$ ve örgünün toplam göz sayısı L^2 'dir. Bilgisayar 0,001 ile 0,999 arasında rasgele sayılar (R) üretir. Taneciğin harekete başlayacağı gözü bulmak için, $I = 4.R.L$ hesaplanır, I için elde edilen değer tamsayı kısmı alınarak taneciğin harekete başlayacağı kenar göz elde edilmiş olur. Taneciğin ilerleyeceği sonraki gözü bulmak için tekrar bir rasgele sayı üretilir. Eğer sayının değeri 0,001 ile

0,249 arasında ise tanecik bir göz aşağı(4), 0,250 ile 0,499 arasında ise bir göz yukarı(1), 0,500 ile 0,749 arasında ise bir göz sağa(2), 0,750 ile 0,999 arasında ise bir göz sola(3) taşınır. (Şekil 2.1). Kapalı kare örgünün koordinatları (i,j) olan gözünde bir tanecik varsa, ise taneciğin koordinatları $(i,j+1)$, ise $0,250 \leq R \leq 0,499$ $(i,j-1)$, $0,500 \leq R \leq 0,749$ ise $(i+1, j)$, $0,750 \leq R \leq 0,999$ ise $(i-1,j)$ olacaktır. Bu işlemler küme önerilen tanecik sayısına ulaşıncaya kadar tekrarlanır.



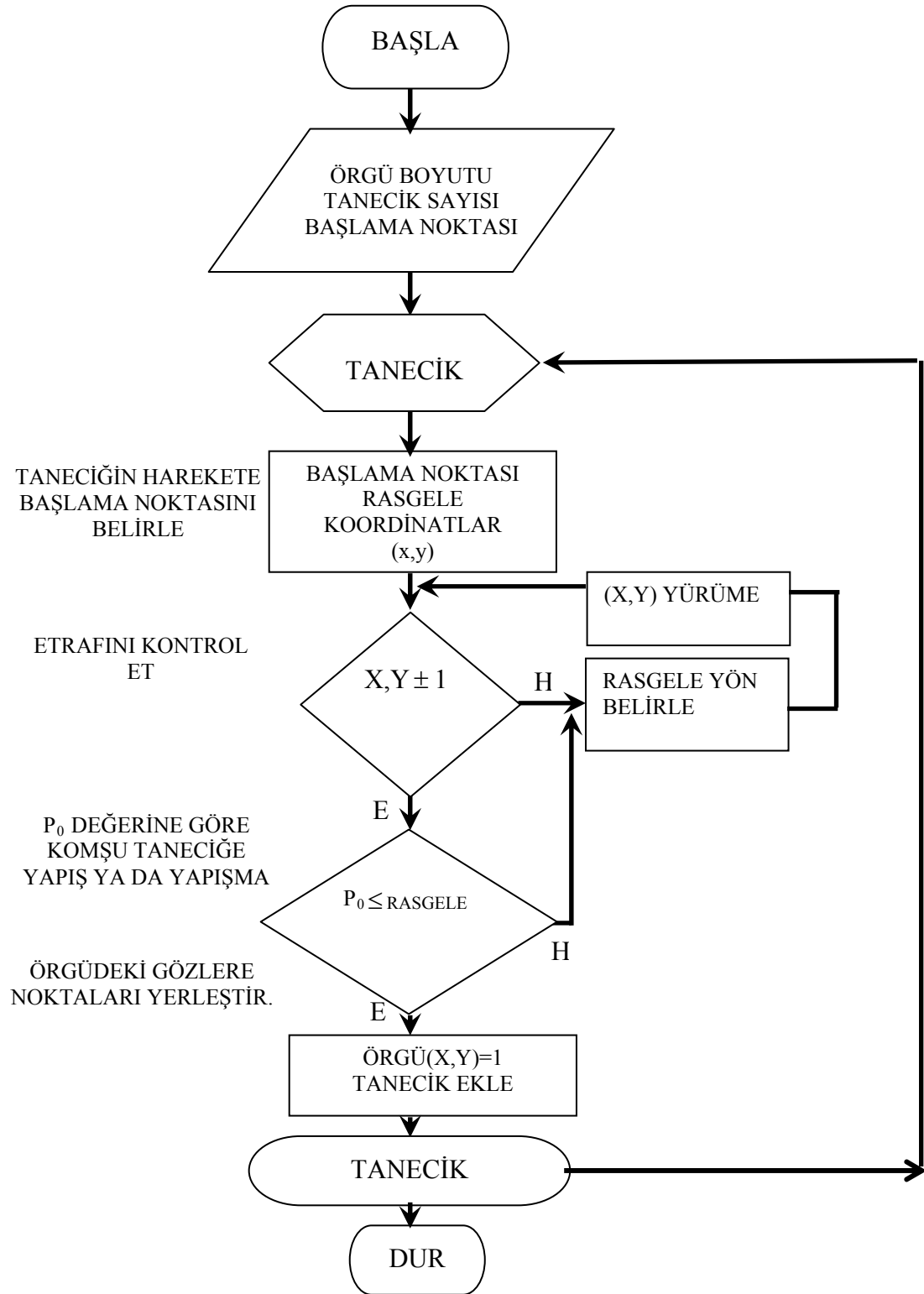
Şekil 2.1. Bir taneciğin gidebileceği komşu gözler.

Harekete başlatılan ve rasgele yürütülen tanecik, merkezi taneciğin (çekirdek) bir komşu gözüne ulaşıncaya kadar yürüyüşüne devam ettirilir ve tanecik kümenin bir elemanı olur. Eğer herhangi bir tanecik, hareketi esnasında kapalı örgünün sınırları dışına çıkarsa, o tanecik ihmal edilerek yeni bir tane önerilir. Bu işlem, küme önceden belirlenen tanecik sayısına ulaşıncaya kadar devam eder[92].

Sistemde bulunan tanecikler hiçbir yönü tercih etmeksizin sıcaklık etkisi ile sürekli hareket halindedir. Brown hareketi olarak isimlendirilen taneciklerin bu hareketi difüzyon ile sınırlı olduğu için Monte Carlo yöntemi ile doğrudan incelenebilir (Şekil 2.2).

Ortamdaki sıcaklık değişimi taneciklerin ortalama serbest yollarının büyüklüğünü etkiler. Taneciklerin birbirlerine yapışma olasılığı P , ortamın sıcaklığı ile doğru orantılıdır. Sıcaklığın azalması, taneciklerin ortalama serbest yollarını büyütür ve tanecikler, küme saçaklarının (dallarının), arasındaki iç bölgelere kadar ulaşarak yapışır ve dalların kalınlığı artar. Bunun sonucu olarak, tanecik kümeleri daha sıkı ve yoğun bir görünüm kazanır.

2.3.1. Difüzyonla sınırlı tanecik kümeleşme algoritması için akış şeması



Şekil 2.3 Difüzyon ile sınırlı tanecik kümeleşme algoritması için akış şeması

2.4. Evrensellik

Kritik olaylarda gözlenen, bir niceliğin kuvveti şeklindeki davranışların en çarpıcı özelliklerinden birisi evrenselliğidir. Yani, Hamilton işlemcisinin mikroskobik ayrıntılardan bağımsız olmasıdır. Bu davranış, mikroskobik etkileşmelerin hüküm sürdüğü ölçeklere göre çok daha büyük ölçeklerde korelasyonların oluştuğu durumlarda beklenmeyen bir davranış değildir. DLA için de bu davranışın geçerli olması gerektiği, kare ve üçgen örgülerde ve örgüsüz simülasyonlarda fraktal boyut (d_f) için aynı değerin hesaplanmasından anlaşılmaktadır[93]. Evrenselliğin bir ikinci yanı, dallanarak büyümenin incelenme tarzı[84-87,94,95] ile karşılaştırılarak aşağıda incelenmektedir: Gerçek bir dallanarak büyüyen kümenin büyüme ucunun (tomurcuk) yarıçapını, Gibbs -Thomson sınır şartındaki

$$u|_s = \Gamma K \quad (2.15)$$

kılcal damar (boru) uzunluğu Γ belirler; K , yüzeyin yerel eğriliğidir. DLA da rasgele yürüyen tanecik kümenin çevresine ait bir göze geldiğinde mutlaka kümeye yapışmaktadır (yapışma ihtimali $s = 1$). Bu durum DLA kümelerinde yüzey geriliminin sıfır olduğunu, dolayısı ile de yüzeyde sabit bir dağıtma alanı olduğunu göstermektedir. Bu probleme çözüm olarak, rasgele yürüyen taneciğin kümeye yapışma ihtimalinin $s \leq 1$ olduğu kabul edilmektedir; bu difüzyon denkleminde bir uzunluk parametresi getirmektedir. Bu parametrenin DLA'da nasıl bir değişiklik yaptığını anlamak için bir boyutlu uzayda aşağıdaki analiz yapılmaktadır:

$$u(l, k + 1) = (1 - s)u(\theta, k) + \frac{1}{2}u(2l, k) \quad (2.16)$$

$$u(\theta, k + 1) = \frac{1}{2}u(l, k) \quad (2.17)$$

Bu ifadelerdeki θ küme çevresine ait bir gözü, l ve $2l$ de boş uzayı belirtmektedir. Kararlı hal söz konusu ise k 'ya bağımlılığı kaldırarak Eş. 2.16 ve 2.17 eşitliklerinden,

$$su(l) = u(2l) - u(l) \quad (2.18)$$

bulunur. Sürekli ortamlar için de

$$su \Big|_s = l n \cdot \vec{\nabla} u \Big|_s \quad (2.19)$$

elde edilir. u 'nun logaritmik türevinin yüzeydeki değeri yeni bir uzunluk ölçeği verir:

$$\lambda = \frac{l}{s} \quad (2.20)$$

Bu uzunluk ölçeği istenildiği gibi ayarlanabilir. λ , alışılagelmiş incelemelerdeki kılcal damar (boru) uzunluğu görevini üstlenmektedir. Daha önce elektrostatik ile yapılmış olan benzerlikten yararlanarak Eş. 2.19 eşitliği yeniden yorumlanabilir. Bir küre yüzeyi düşünelim; $\lambda \ll R$ ise, $\vec{\nabla} u|_s = u_\infty / R$ olur ve λ için birinci mertebeden

$$u|_s = u_\infty \lambda / R \quad (2.21)$$

yazılabilir; bu da Eş. 2.15 eşitliğinde ki şart ile aynı yapıdadır. Eş. 2.19 eşitliğinin ne ifade ettiğini ortaya koymak için, yukarıdaki yeni sınır şartı kullanılarak kararlılık analizi yeniden yapılırsa iki boyutlu uzayda şu ifadeler elde edilir:

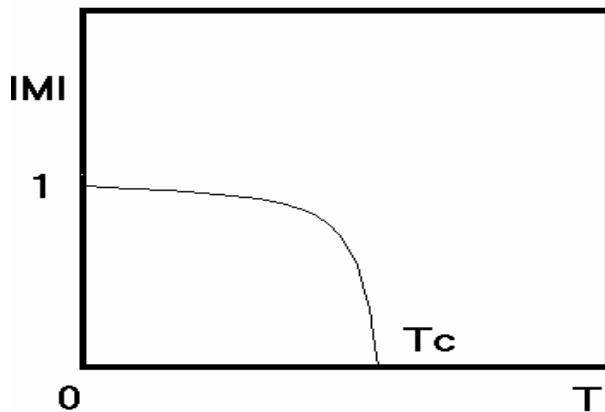
$$\frac{d\delta_m}{dt} = \frac{(m-1)\delta_m A}{R(R+m\lambda)} \quad (2.22)$$

$$\left(\frac{\dot{\delta}}{\delta}\right) / \left(\frac{\dot{R}}{R}\right) = \frac{(m-1)R}{(R+m\lambda)} \quad (2.23)$$

$\lambda \gg \frac{R}{m}$ için $\frac{d\delta}{dt}$ eşitliğindeki değerine göre ihmal edilecek kadar küçüktür; alışlagelmiş dallanarak büyüme durumundaki gibi işaret değiştirmez, fakat $R < \lambda$ ise, m ne olursa olsun şekil bozuklukları, zaman ilerledikçe R 'ye göre daha da büyümek yerine daha da küçülür. $R < \lambda$ için DLA'ya sebep olan kararsızlık bastırıldığından, DLA yoğunluğunun $R \leq \lambda$ mesafelerinde sabit olması gerekir. Daha büyük R için, kararsızlıklar yine mevcuttur ve temel DLA modelindeki gibi dallanan kümeler oluşması gerekir. Aynı sonuçlar üç boyutlu uzayda da geçerlidir.

2.5. Ising Modelin Teorisi

Ising model ferromanyetik metallerin termodinamik özelliklerini incelemek için kurulmuş bir modeldir. Bilindiği gibi ferromanyetik metallerde (Fe, Ni gibi), dış manyetik alanın olmadığı durumlarda bile Curie sıcaklığından düşük sıcaklıklarda kendiliğinden mıknatıslanma oluşmaktadır. Metalin sıcaklığı Curie sıcaklığının üstünde ise sıfır olmaktadır (Şekil 2.4). Diğer taraftan Curie sıcaklığına her iki taraftan yaklaşıldığında ferromanyetik metalin özısı ve manyetik alınganlığı iraksamaktadır.

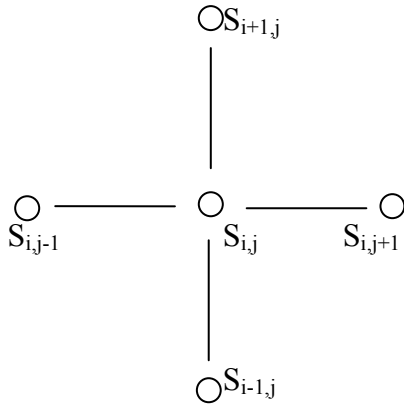


Şekil 2.4. $H=0$ da kendiliğinden manyetizasyonun MI nin sıcaklıkla değişimi

Ising modelde incelenen sistemin örgü konumları adı verilen N tane sabit noktadan oluşan n -boyutlu bir örgüdür. Örgünün geometrik yapısı iki boyutta kare veya üçgen, üç boyutta kübik veya hegzogonal ve dört boyutta ise basit hiperkübik olabilir. Her bir örgü konumuna, $+1$ veya -1 değerlerinden birisini alabilen s_i ($i=1,2,\dots,N$) spin değişkeni takılmıştır. Sistemde bundan başka değişken yoktur. Eğer $s_i=+1$ ise i .konumun spin yukarı durumda olduğu ve $s_i=-1$ ise spin aşağı konumda olduğu söylenir. Verilen bir $\{s_i\}$ kümesi bütün sistemin konfigürasyonu ve $\{s_i\}$ ile belirtilen konfigürasyona sahip olan bir sistemin enerjisi aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır.

$$E_I = -\sum J_{ij}s_i s_j - H \sum_{i=1}^N s_i \quad (2.24)$$

Burada I alt indisi Ising enerjisi, $\langle ij \rangle$ en yakın komşu spin çiftleri üzerinden toplamı göstermektedir. İki boyutta kare örgü için Şekil 2.5'de görüldüğü gibi bir spin dört en yakın komşu spine sahiptir. $\langle ij \rangle$ üzerinden toplam $2N$ terim ihtiva etmektedir. J_{ij} etkileşme enerjisi ve H dış manyetik alan sabit olarak verilmektedir.



Şekil 2.5. İki boyutlu kare örgü için en yakın komşu spinler

İzotropik etkileşmelerin olduğu durumda $J_{ij}=J$ alınmakta ve $J>0$ olduğu durum ferromanyetizmaya, $J<0$ olduğu durum ise antiferromanyetizmaya karşılık

gelmektedir. Ising modelde bütün termodinamik fonksiyonlar, E_1 enerjili bir sistemin ağırlık fonksiyonu aşağıdaki şekildedir.

$$Z_1(H, T) = \sum_{s_1} \sum_{s_2} \dots \sum_{s_N} e^{-\beta E_1(s_i)} \quad (2.25)$$

Burada her bir s_i spin değişkeni bağımsız olarak ± 1 değerleri alabildiğinden, yukarıdaki toplam 2^N teriminden oluşmaktadır. Termodinamik nicelikler genel olarak spin başına serbest enerjiden elde edilmektedir.

$$f(H, T) = -kTN^{-1} \log Z_1(H, T) \quad (2.26)$$

Bu serbest enerjiye bağlı olarak spin başına termodinamik nicelikler aşağıdaki şekilde tanımlanmaktadır[25,34].

$$U_1(H, T) = -kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{f}{kT} \right) \quad (2.27)$$

$$C_1(H, T) = \frac{\partial U_1}{\partial T} \quad (2.28)$$

$$M(H, T) = -\frac{\partial}{\partial H} \left(-\frac{f}{kT} \right) \quad (2.29)$$

$$\chi(H, T) = \frac{\partial M}{\partial H} \quad (2.30)$$

Burada U_1 iç enerji, C_1 öz ısı, M düzen parametresi ve χ manyetik alınganlıktır. Dış manyetik alan $H=0$ olduğu durumda $M(0, T)$ niceliği kendiliğinden mıknatıslanma veya düzen parametresi olarak adlandırılmaktadır. Ferromanyetik sistemlerde $M(0, T)$ sıfırdan farklıdır. Bu çalışmada $J>0$ hali yani ferromanyetizma ve dış manyetik alan H 'nin sıfır olduğu durum göz önüne alınmaktadır. Ising modelin analitik çözümü için iki yaklaştırma mevcuttur, bunlardan ilki Bragg-Williams ve

ikincisi Bethe-Peierles yaklaşımları olarak bilinmektedir[25]. İki boyutta Ising modelin tam çözümü ise Onsegar tarafından gerçekleştirilmiştir[36]. Ising modelin çözümü, ikili alaşım ve örgü gazı modelleri uygun parametre seçimi sonucunda Ising modele özdeş modeller olarak incelenebildiğinden oldukça önemlidir. Örneğin örgü gazı modeli için hamiltonyen aşağıdaki gibi verilmektedir.

$$-H = V \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j + \mu \sum_i n_i \quad (2.31)$$

Burada V örgü hücrelerine yerleşmiş atomlar arasındaki potansiyel enerji ve μ kimyasal potansiyeldir. n_i i -inci hücrenin dolu veya boş olmasına bağlı olarak sırası ile 0 veya 1 değerlerini alabilmektedir. Ising modeldeki spin değişkeni $s_i = \pm 1$ değerlerini alabildiğinden $s_i = 2n_i - 1$ veya $n_i = \frac{1}{2}(s_i + 1)$ yazmak mümkündür. Bu durumda örgü gazı için verilen hamiltonyen spin değişikliğine bağlı olarak,

$$-H = V \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{1}{4} s_i s_j + V \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{1}{4} (s_i + s_j) + \mu \sum_i \frac{1}{2} s_i + C \quad (2.32)$$

şekilde yazılabilir. Bu ifadede C , s_i den bağımsız bir sabittir. q her bir kürenin bağ sayısı (her bir hücre q en yakın komşuya sahiptir.) olmak üzere,

$$\sum_{\langle i,j \rangle} (s_i + s_j) = q \sum_i s_i \quad (2.33)$$

dir ve toplam Eş. 2.32'de kullanılacak olursa ,

$$-H = V \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{1}{4} s_i s_j + \frac{1}{4} (qV + 2\mu) \sum_i s_i + C \quad (2.34)$$

elde edilir. Sonuç olarak, Ising modeldeki parametreler $s_i=2n_i-1$, $j=V/4$ ve $H = (qV + 2\mu)/4$ şeklinde alınarak, örgü gazı modeli Ising modele özdeş hale getirilebilmektedir[33].

2.5.1. Statik kritik olay ve statik kritik üsler

Kritik olay deyimi ikinci derece faz geçişi yapan bir sistem için termodinamik niceliklerin kritik sıcaklık T_c yakınındaki davranışlarına karşılık gelmektedir. Kritik sıcaklığın her iki tarafında iki faz farkı uzaysal simetrilere sahiptir. Kritik sıcaklığın üstünde mıknatıslanma sıfırdır. Sistem dönme simetrisine sahiptir. Kritik sıcaklığın altında kendiliğinden mıknatıslanma oluşur ve mıknatıslanma vektörü uzayda tercihli bir doğrultuya sahiptir. Bu durum dönme simetrisini bozmaktadır. Bir simetrinin varlığı veya yokluğundan dolayı iki faz, kritik noktadaki süreksizliğinden dolayı, termodinamik niceliklere karşılık gelen farklı fonksiyonlar ile tanımlanabilmektedir. Simetrinin bozulması yüzünden düşük sıcaklık fazını tanımlamak için yeni bir parametre gerekmektedir. Bu parametre düzen parametresi olarak adlandırılmaktadır ve M ile gösterilmektedir. Herhangi bir sistem için bu parametre rahatlıkla ölçülebilen yaygın bir termodinamik değişken olarak adlandırılmaktadır. Ferromanyetizma için M mıknatıslanma vektörüdür.

Kritik noktadaki değişik ölçülebilen niceliklerin süreksizlikleri farklı kritik üsler ile tanımlanmaktadır. Bu üsler dış bir manyetik alan H 'nin sıfır olduğu durumlarda altı tanedir. Bunlar α , β , γ , η , ν ve μ şeklinde Grek alfabesindeki harflerle gösterilmektedir[33].

Kendiliğinden mıknatıslanma M , manyetik alınganlık χ ve özısı C 'nin sıcaklık bağımlılıkları

Kritik sıcaklık T_c , civarında termodinamik niceliklerin davranışı aşağıda tanımlanan indirgenmiş sıcaklık t 'ye bağlı olarak incelenmektedir.

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

$t \rightarrow 0$ limitinde, herhangi bir termodinamik nicelik sonlu olan düzenli bir kısım ve ıraksayan “singular” bir kısma ayrılabilir. “Singular” kısımların t 'nin bir kuvveti ile orantılı olarak değiştiği kabul edilmektedir. Bu kuvvetler genel olarak kesirlidir.

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

$$\begin{aligned} M(0,T) &\sim t^{\beta'} & t \rightarrow 0^+ \\ M(0,T) &\sim (-t)^{\beta} & t \rightarrow 0^- \end{aligned} \quad (2.36)$$

Burada β ve β' kendiliğinden mıknatıslanma kritik üsleri olarak adlandırılmakta ve onların değerleri iki boyutlu Ising model için $\beta = 1/8$ ve $\beta' = 7/8$ olarak verilmektedir[25,33].

Dış manyetik alanın varlığında $t = 0$ için hal denklemi,

$$M \sim H^{-1/\delta} \quad (2.37)$$

şeklinindedir. Burada δ bir diğer kritik üstür, ancak bu çalışmada dış manyetik alanın ($H=0$) sıfır olduğu durum incelendiğinden ele alınmayacaktır.

Sıcaklık T , kritik sıcaklık T_c 'ye çok yaklaştığında manyetik alınganlık χ ıraksamaktadır. Manyetik alınganlığın kritikteki ıraksayan davranışı γ ve γ' kritik üsleri ile karakterize edilmektedir.

$$\begin{aligned} kT\chi(0,T) &\sim t^\gamma & t \rightarrow 0^+ \\ kT\chi(0,T) &\sim t^{\gamma'} & t \rightarrow 0^- \end{aligned} \quad (2.38)$$

Burada $\gamma = \gamma'$ 'dür ve her iki haldeki orantı katsayıları birbirinden farklıdır. Manyetik alınganlık kritik üssü için teorik olarak $\gamma = \gamma' = 7/4$ değeri verilmektedir[25,33].

Dış manyetik alanın yokluğunda öz ısı C , kritik sıcaklığında singüler bir davranış göstermektedir. Bu durum α , α' kritik üsleri ile karakterize edilebilmektedir.

$$\begin{aligned} C(0,T) &\sim t^{-\alpha} + b^+ & t \rightarrow 0^+ \\ C(0,T) &\sim (-t)^{-\alpha'} + b^- & t \rightarrow 0^- \end{aligned} \quad (2.39)$$

Burada b^\pm bir düzeltme terimidir. Öz ısı kritik üsleri α ve α' birbirine eşittir ve öz ısı içinde orantı sabitleri farklıdır. Bu kritik üs teorik olarak $\alpha=0$ (log) değeri ile verilmektedir[25,33,96]. $\alpha = 0$ (log) olması öz ısının singüler olmayan bir kısma sahip olmasından kaynaklanmaktadır. Öz ısı buna rağmen $t = 0$ 'da sonlu bir süreksizliğe sahiptir. Buraya kadar verilmiş olan tanımlarda singüler davranışın kritik sıcaklığa aşağıdan veya yukarıdan yaklaşılsa da aynı tipte olduğu kabul edilmektedir.

2.6. Spin-spin İlgileşim Fonksiyonu $g(r)$

η ve ν kritik üsleri korelasyon fonksiyonu ile ilgili kritik üslerdir. Bir spin sisteminde i . ve j . spinler arasındaki korelasyon aşağıdaki ifade ile verilmektedir[33,97].

$$g_{ij} = \langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle \quad (2.40)$$

Öteleme altında değişmez sistemler için $g_{ij} = g_{ij}(r_{ij})$ dir ve sadece i. ve j. spinler arasındaki vektör mesafe r_{ij} 'ye bağlı olarak değişmektedir. Kritik sıcaklıktan yeterince büyük sıcaklıklarda $g(r)$ 'nin büyük r ler için sıfıra üstel olarak bozunması beklenmektedir[25].

$$g(r)_{t \rightarrow 0} \rightarrow r^{-p} e^{-r/\xi} \quad (2.41)$$

Kuvvet kanununa uygun olarak $t=0$ 'da $p=d-2+\eta$ dir. Korelasyon fonksiyonunun sonsuz örgü için $T>T_C$ sıcaklık bölgesinde geçerli tam ifade Kadonoff tarafından verilmiştir[97].

$$g(r) = e^{-r/\xi} \left(\frac{\pi r}{\xi} \right)^{-1/2} 2^{-3/8} \quad (2.42)$$

Bu ifadedeki ξ korelasyon uzunluğudur ve t'ye bağlı olarak aşağıdaki şekilde değişmektedir.

$$\xi \sim \varepsilon^{-\nu} \quad t \rightarrow 0^+ \quad (2.43)$$

$$\xi \sim (-t)^{-\nu'} \quad t \rightarrow 0^- \quad (2.44)$$

Korelasyon uzunluğu kritik üsleri ν ve ν' birbirine eşittir. İki boyutlu Ising model için onların değeri 1 olarak verilmektedir[98]. Diğer taraftan $T=T_c$ 'de korelasyon fonksiyonu iki boyutlu örgüler için sadece r'nin bir kuvveti ile bozunmaktadır.

$$g(r) \sim r^{-\eta} \quad (2.45)$$

Bu ifadedeki r'nin kuvveti bir diğer kritik üstür. Teorik olarak $\eta=1/4$ dir.

2.7. Sonlu Örgü Ölçekleme Teorisi

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

2.8. Boyut Analizi

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

$$[f] = L^{-d} \quad (2.46)$$

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

$$[g(x)] = L^{2-d-\eta} \quad (2.47)$$

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

$$[M/V] = L^{(2-d-\eta)/2} \quad (2.48)$$

olarak tanımlanmaktadır. Dalgalanma-dağılıma teoreminden manyetik alınganlığın boyutu aşağıdaki şekilde verilmektedir.

$$[kT\chi] = L^{2-\eta} \quad (2.49)$$

Diğer taraftan dış alanın boyutu $M = -\partial F / \partial H$ ifadesinden;

$$[H / kT] = [f] / [M / V]$$

veya

$$[H / kT] = L^{(2+d-\eta)/2} \quad (2.50)$$

şeklinde elde edilmektedir.

Eğer bu ifadelerde L uzunluğu ξ korelasyon uzunluğu ile değiştirilip, korelasyon uzunluğu için $\xi \sim t^{-\nu}$ bağıntısı kullanılacak olursa bütün kritik üsleri tanımlamak mümkündür. Örneğin öz ısı göz önüne alınacak olursa;

$$C = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \quad (2.51)$$

ifadesinde serbest enerji için $f \sim \xi^{-d} \sim \varepsilon^{vd}$ ilişkisi kullanıldığında öz ısının kritik sıcaklık civarındaki davranışı belirlenebilmektedir.

$$C \sim \varepsilon^{vd-2} \quad (2.52)$$

Eşitlik (2.39) ve eşitlik (2.52) karşılaştırıldığında özısı kritik üssü α ve benzer işlemler yapıldığında diğer statik kritik üsler için aşağıdaki ifadeler elde edilmektedir.

$$\alpha = 2 - vd \quad (2.53)$$

$$\gamma = \nu(2 - \eta) \quad (2.54)$$

$$\beta = -\nu(2 - d - \eta)/2 \quad (2.55)$$

$$\delta\beta = \nu(2 + d - \eta)/2 \quad (2.56)$$

Bu ifadeler sırasıyla Josephson, Fisher, Rushbrooke ve Widom kanunları olarak bilinmektedir[25].

2.9 Termodinamik Nicelikler İçin Sonlu Örgü Ölçekleme Bağıntıları

Daha öncede verildiği gibi ölçekleme teorisi, korelasyon uzunluğunun $t = 0$ komşuluğundaki bir sistem için tek karakteristik uzunluk olduğunu kabul etmektedir. Korelasyon uzunluğu deneysel olarak $t = 0$ 'da yani kritik sıcaklıkta iraksar. Bu sonuç sistemin $t = 0$ 'da karakteristik bir uzunluğa sahip olmadığını ve korelasyon uzunluğunun ölçekleme dönüşümü altında değişmez olduğunu gösterir. Diğer taraftan eğer sistemin bir kısmı orijinal sistem kadar büyütüldüğünde orijinal sistem ve büyütülmüş sistem arasında bir fark görülüyorsa, bu durumda sistem ölçek dönüşümü altında değişmezdir. Daha kesin olarak termodinamik fonksiyonların, $t = 0$ 'da korelasyon fonksiyonuna benzer olarak homojen fonksiyonlar oldukları "ölçek-değişmez" bir sistem tanımlamak mümkündür. $t = 0$ 'da korelasyon fonksiyonu

$$g(x) \sim x^{-p} \quad (2.57)$$

şeklinde davranmaktadır. Burada $p - 2 + \eta$ $g(x)$ 'in boyutudur. Birim uzunluk bir b faktörü ile arttığında koordinat $x \rightarrow x' = x/b$ şeklinde dönüşür. Bu koordinat dönüşümü altında korelasyon fonksiyonu aşağıdaki şekilde yazılabilir.

$$g(x/b) = b^p g(x) \quad (2.58)$$

Bu bir homojenlik kuralıdır. Bu kurala bağlı olarak homojen bir fonksiyon şu şekilde tanımlanmaktadır[25].

$$y(q') = b^{D_y} y(q) \quad q' = b^{D_y} q \quad (2.59)$$

Ising modeldeki bütün termodinamik niceliklerin ona bağlı olarak elde edildiği hacim başına serbest enerji göz önüne alınacak olursa; serbest enerji yoğunluğu $f = F/kTV$ d-boyutundadır. Bu yüzden serbest enerji f , “ölçek- değişmez” bir sistemde homojen bir fonksiyonla tanımlanabilir.

$$f(h', t') = b^d f(h, t) \quad (h = H / kT) \quad (2.60)$$

veya

$$f(h, t) = b^{-d} f(b^{D_h} h, b^{D_t} t) \quad (2.61)$$

ξ korelasyon uzunluğu sistemin tek karakteristik uzunluğu olduğundan birim uzunluktaki bir değişim korelasyon uzunluğuna eş değer bir değişime sebep olacaktır. Serbest enerji fonksiyonu d-boyutunda olduğundan yukarıdaki ifadenin sağ tarafındaki fonksiyon boyutsuz olmalıdır. $\xi \sim t^{-\nu}$ ifadesi kullanıldığında $D_t = 1/\nu$ ve aynı mantıkla h 'nin boyutu hatırlanacak olursa $D_h = \delta\beta/\nu$ sonucu elde edilir. Serbest enerji için elde edilen son ifadede bu sonuçlar kullanılarak ve iki boyutlu ($L \times L$) kare örgü için $b=L$ alınarak sonlu örgü ölçekleme teorisi için serbest enerji fonksiyonu,

$$f(h, \varepsilon) = L^{(\alpha-2)/\nu} f(L^{\delta\beta/\nu} h, L^{1/\nu} \varepsilon) \quad (2.62)$$

şeklinde elde edilmektedir[25]. Burada

$$t = \frac{T - T_c(\infty)}{T_c(\infty)} \quad (2.63)$$

dır. Sonsuz ve sonlu örgü kritik sıcaklıkları arasındaki fark,

$$\Delta\varepsilon = \frac{T_c(\infty) - T_c(L)}{T_c(\infty)} \alpha aL^{-1} \quad L \rightarrow \infty \quad (2.64)$$

olarak tanımlanmaktadır[96]. Bu ölçekleme bağıntısındaki L örgünün kenar uzunluğu ve bütün kritik üsler ise sonsuz örgü için kritik üslerdir. Diğer ilgilenilen bütün termodinamik nicelikler için sonlu örgü ölçekleme bağıntıları, serbest enerji için verilen sonlu örgü ölçekleme bağıntısından elde edilebilmektedir. Örneğin, kendiliğinden mıknatıslanma için sonlu örgü ölçekleme bağıntısı aşağıdaki şekilde oluşturulabilmektedir.

$$\begin{aligned} M(h, \varepsilon) &= -\frac{\partial f}{\partial h} \\ &= -\frac{\partial}{\partial h} L^{-d} f(\delta\beta^{1/\nu} h, L^{1/\nu} t) \\ &= -L^{-d} L^{\delta\beta^{1/\nu}} f' \end{aligned} \quad (2.65)$$

Burada $X^0 = -f'$ tanımı ve $\delta\beta$ için Eş. 2.56 kullanılacak olursa dış manyetik alanının varlığında kendiliğinden mıknatıslanma için sonlu örgü ölçekleme bağıntısı,

$$M(h, \varepsilon) = L^{-\beta/\nu} X^0(L^{\delta\beta^{1/\nu}} h, L^{1/\nu} \varepsilon) \quad (2.66)$$

şeklinde elde edilmektedir. Bu ifade dış manyetik alanın olmadığı ($h=0$) durumunda,

$$M = L^{-\beta/\nu} X^0(L^{1/\nu} t) \quad (2.67)$$

şeklinde yazılabilmektedir. Diğer taraftan manyetik alınganlık ve özısı için sonlu örgü ölçekleme bağıntıları, $h=0$ da kendiliğinden mıknatıslanma için elde edilen ifadeye benzer olarak,

$$k\chi = L^{\gamma/\nu} Y^0(L^{1/\nu} t) \quad (2.68)$$

$$C = L^{\alpha/\nu} Z^0(L^{1/\nu} t) \quad (2.69)$$

bağıntıları ile verilmektedir. Burada β , γ , α ve ν sonsuz örgü için mıknatıslanma, manyetik alınganlık, özısı ve korelasyon uzunluğu için statik kritik üslerdir. Yukarıdaki şekil fonksiyonlarının $x = L^{1/\nu} t$ olmak üzere X değerleri için Ax^w şeklinde değişmeleri beklenmektedir. Bu fonksiyondaki A sonsuz örgü için kritik genlik ve w ise şekil fonksiyonun karşılık geldiği niceliğin kritik üssüdür. w, kendiliğinden mıknatıslanma için β , manyetik alınganlık için γ ve özısı için α dır[96].

Korelasyon fonksiyonu için sonlu örgü ölçekleme bağıntısı iki değişkenli bir şekil fonksiyonuna sahiptir[99].

$$g(r, \varepsilon) = L^{-2\beta/\nu} G^0(L^{-1} r, L^{1/\nu} \varepsilon) \quad (2.70)$$

Bu fonksiyondaki yeni değişken, birim uzunluk L faktörü ile arttığında i. ve j. spinler arası vektör mesafesinin $r \rightarrow r' = r/L$ şeklinde dönüşmesinin sonucudur.

Yukarıda verilen sonlu örgü ölçekleme bağıntılarını $T_c(\infty)$ ve $T_c(L)$ deki karşılıkları, kritik üsleri belirlemek için farklı iki yaklaşım olarak ortaya çıkmaktadır. Sonlu örgü ölçekleme bağıntılarında $T=T_c(\infty)$ alındığında $t = 0$ olduğundan şekil fonksiyonunun değişkeni $x=0$ olmaktadır. Bu yüzden şekil fonksiyonu sıcaklığa ve örgü büyüklüğüne bağlı olmamakta, yani sıcaklığın ve örgü büyüklüğünün sabit bir fonksiyonu olmaktadır. Bu durumda sonlu örgü ölçekleme bağıntıları $T= T_c(\infty)$ için

$$M \sim L^{-\beta/\nu} \quad (2.71)$$

$$kT_c(\infty)\chi \sim L^{-\gamma/\nu} \quad (2.72)$$

$$C \sim L^{-\alpha/\nu} \quad (2.73)$$

olarak elde edilmektedir. Diğer taraftan $T = T_c(L)$ için şekil fonksiyonunun değişkeni t için verilen Eş. 2.35’de $T = T_c(L)$ alındığında, sabit olmaktadır. Bu durumda sonlu örgü ölçekleme bağıntıları aşağıdaki gibi yazılabilmektedir.

$$kT_c(L)\chi_{\max} \sim L^{-\gamma/\nu} \quad (2.74)$$

$$C_{\max} \sim L^{-\alpha/\nu} \quad (2.75)$$

Sonlu örgü ölçekleme teorisinin sonucu olarak buraya kadar verilen bağıntılar, iki-boyutlu Ising modeller için termodinamik niceliklerin sonlu örgülerdeki davranışlarından sonsuz örgü davranışlarını belirleme imkânı vermektedir.

2.10. “Cellular Automaton” Modeli

“Cellular Automaton”lar tabii sistemlere model oluştururlar. “Cellular Automaton”lar fiziksel sistemler için matematiksel bir modeldir. Bu model fizikte kullanılan geleneksel modellerden farklı bir yapıya sahiptir. “Cellular Automaton”da uzay ve zaman kesikli değerlere sahiptir ve “Cellular Automaton” (CA) sonsuza kadar genişletilebilen düzenli bir hücreler örgüsünden oluşur. Örgünün her bir hücresinde kesikli değerler alabilen değişkenler yer almaktadır. Bir “Cellular Automaton” hali bu hücre değişkenlerinin değerleri ile belirlenmektedir. “CA” kesikli zaman adımlarında gelişir ve gelişim esnasında bir hücre değişkeninin değeri bölgesel bir kural yardımıyla bir önceki zaman adımında ona komşu hücrelerdeki değişkenlerin değerlerine bağlı olarak oluşmaktadır. Bir hücrenin komşuları olarak, genellikle hücrenin kendisi ve ona en yakın komşu hücreler alınmaktadır. Herhangi bir zaman adımında tüm hücre değişkenlerinin değerleri özdeş bir kural yardımı ile eş zamanlı olarak elde edilmektedir. Genel olarak d-boyutlu bir “Cellular Automaton”ın gelişimi için periyodik sınır şartı

kullanılmaktadır. Sonuç olarak herhangi bir fiziksel sistem için “Cellular Automaton” ile bir model oluşturulurken;

- i- Sistemin yapısına uygun düzenli bir örgü (iki boyutta kare , üçgen , üç boyutta kübik , hegzagonal , dört boyutta hiper kübik, vb.) seçilir.
- ii- Örgüyü oluşturan hücrelerin sahip olabilecekleri hallere karşılık gelen değişken veya değişkenler belirlenir.
- iii- Hücrelerin birbirleri ile etkileşme şeklini ve gelişimi sağlayan bir bölgesel kural tanımlanır.

Bir çok fiziksel problem bir “Cellular Automaton” olarak incelenebilmektedir; Dinamik Ising Model (kinetik enerji terimi ihtiva eden) ve diğer örgü spin sistemleri basit bir “Cellular Automaton” problemi olarak ele alınmaktadır[43]. Daha genel olarak makroskobik seviyede her hücre birçok molekül ihtiva eden bir bölgeyi temsil edebilir ve onun değeri birkaç farklı mümkün fazlardan ve kompozisyonlardan birini temsil edebilir. “CA” bu şekliyle doğrusal olmayan kimyasal sistemler için kesikli modeller olarak kullanılmıştır[100,101]. Dentritik kristallerin büyümesi, gizli ısının bölgesel olarak ortaya çıkması ile ilişkili bölgesel büyüme yasağına sahip farklı paketlerin toplanması ile tanımlanmakta ve böylece bir “cellular automaton” örneği olarak göz önüne alınabilmektedir[84]. Fiziksel problemlerin yanı sıra Biyoloji ve Kimyadaki bir çok problem “cellular automaton” olarak incelenebilmektedir[39].

2.10.1. Bir boyutlu cellular automaton kuralları

Bir ve iki boyutlu örgüler için birçok cellular automaton kuralı mevcuttur[39,43,46]. Bu kurallar etkileşmeye giren hücrelerin sayısına ve pozisyonuna bağlı olarak isimlendirilmektedir. Bir boyutlu cellular automaton’da

t	a_{i-1}^t	a_i^t	a_{i+1}^t
t+1			a_i^{t+1}		

Şekil 2.6. Bir boyutlu örgü için (t+1) zaman adımında i. hücrenin en yakın komşuları üç komşu hücre vardır. Bunlar göz önüne alınan hücrenin bir önceki zaman adımında kendisi, sağ ve solundaki hücrelerdir (Şekil 2.6). Bir boyutlu “CA” larda i. pozisyondaki bir hücrenin a_i değeri, ona en yakın üç komşu hücrenin değerlerine bağlı olarak değişmektedir. Bu yüzden bir hücrenin bir sonraki zaman adımında değerini belirleyen bölgesel kural, en yakın üç hücre değerlerinin fonksiyonu olarak tanımlanmaktadır.

$$a_i^{t+1} = f(a_{i-1}^t, a_i^t, a_{i+1}^t) \quad (2.76)$$

Eğer bir boyutlu örgüde bir hücre değişkeni 0 veya 1 olmak üzere iki mümkün değer alabiliyorsa, üç hücre t. zaman adımında aşağıdaki gibi sekiz farklı duruma sahip olabilir.

t	<u>111</u>	<u>110</u>	<u>101</u>	<u>100</u>	<u>011</u>	<u>010</u>	<u>001</u>	<u>000</u>
t+1	0	1	0	1	1	0	1	0

Şekil 2.7. Hücre değişkeni iki hale sahip, bir boyutlu basit cellular automaton için kural 90

Bir merkezi hücre değişkeni (t+1)-inci zaman adımındaki en yakın komşularının değerlerine bağlı olarak şekil 2.7’de gösterilen değerleri alıyorsa, bu bir kural ile gerçekleşir. Bu kurallar, şekil 2.7’de gösterilen düzende, (t+1). zaman adımında ulaşılan iki tabanına göre sayının ondalık sistemdeki karşılıkları ile isimlendirilmektedir. Şekil 2.7’de örneklenen kuralın ondalık sistemdeki karşılığı $0x2^7+1x2^6+0x2^5+1x2^4+1x2^3+0x2^2+1x2^1+0x2^0=90$ ’dır. Bu yüzden kural doksan olarak adlandırılmaktadır. Üç hücre değerinin 8 farklı şekilleniminden ulaşılan her sekiz basamaklı ikili sayı bir kurala karşılık geldiğinden $2^8=256$ farklı “CA” kuralı oluşmaktadır. Ancak bu kuralların bazıları iki kısıtlama yüzünden geçersiz “CA”

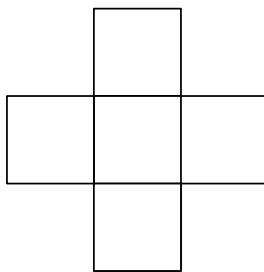
kuralı olarak kabul edilmektedir. İlk kısıtlamaya göre, yansıma simetrisine sahip olmayan kurallar geçersizdir. Yani 100 ve 001 (110 ve 011) gibi haller aynı değere gitmelidir. İkinci kısıtlamada ise, 000 halini değişime zorlayacak bir durum olmadığından 1 ile biten bütün 8 basamaklı ikili sayılara karşılık gelen kurallar geçersiz kabul edilmektedir. Bu yüzden $\alpha_1\alpha_2 \alpha_3\alpha_4 \alpha_2\alpha_5 \alpha_40$ şeklinde 32 tane geçerli “CA” kuralı mümkün olmaktadır.

Geçerli bölgesel kurallar, komşuluklardaki hücre değerlerinin Boolean fonksiyonu olarak ifade edilmektedir. Kural 90 için Boolean ifadesi, a_i^t t-inci zaman adımında i-inci hücrenin değeri olmak üzere, (t+1)-inci zaman adımında i-inci hücrenin değeri bir önceki zaman adımında ona komşu iki hücre değişkeninin mod 2 toplamı ile oluşturulabilmektedir.

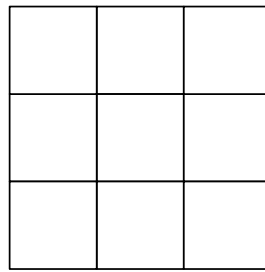
$$a_i^{t+1} = a_{i-1}^t \oplus a_{i+1}^t \quad (2.77)$$

Burada \oplus , mod 2 ye göre toplama karşılık gelmektedir.

2.10.2. İki Boyutlu cellular automaton kuralları



(a)



(b)

Şekil 2.8. İki boyutlu kare örgüde (a) 5 komşuluk, (b) 9 komşuluk

İki boyutlu cellular automaton'lar için kurallar, bir-boyutta olduğu gibi göz önüne alınan hücrenin bir önceki zaman adımındaki komşu hücrelerinin etkileşme şeklinde ve etkileşmeye giren hücrelerin pozisyonlarına bağlı olarak değişmektedir. İki boyutlu basit kare örgülerde iki farklı komşuluk cinsi vardır. Bunlardan ilki beş komşuluklu ve ikincisi ise dokuz komşuluklu cellular automaton olarak adlandırılmaktadır. Beş komşuluklu “Cellular Automaton”larda komşu hücreler olarak merkezi hücrenin kendisi ve onun kuzey, güney, doğu ve batısındaki hücreler alınmaktadır. Dokuz komşuluklu “Cellular Automaton”larda ise en yakın beş komşu hücrenin yanı sıra köşelerdeki komşu hücreler alınmaktadır (Bkz. Şekil 2.8).

İki boyutlu “Cellular Automaton” kurallarında, bir boyutlu “Cellular Automaton”larda olduğu gibi herhangi bir merkezi a_{ij} hücresinin bir sonraki zaman adımındaki değeri, ona en yakın komşu hücrelerin değerlerinin bir fonksiyonu olarak ifade edilmektedir[46]. Örneğin beş komşuluklu “cellular automaton”larda kurallar aşağıdaki gibi en yakın komşu hücrelerin bir fonksiyonu olarak yazılmaktadır.

$$a_{ij}^{t+1} = f(a_{ij}^t, a_{ij-1}^t, a_{ij+1}^t, a_{i-1j}^t, a_{i+1j}^t) \quad (2.78)$$

Eğer iki boyutlu “cellular automaton”larda hücreler iki hale sahip ise (0,1 gibi) beş komşuluklu “cellular automaton”lar için genel olarak $2^{32} \cong 4 \times 10^9$ ve dokuz komşuluklu “cellular automaton”lar ise $2^{512} \cong 10^{154}$ farklı kural mümkün olmaktadır. İki boyutlu “cellular automaton” kuralları komşuluktaki hücre sayısına bağlı olarak Wolfram tarafından sınıflandırılmıştır[46] ve komşuluktaki hücrelerin pozisyonuna bağlı olarak Vichniac tarafından isimlendirilmiştir[43]. Bu kurallara basit bir örnek olarak, merkezi hücre değişkeninin (t+1)-inci zaman adımındaki birinci derece en yakın dört komşu hücre değerinin mod 2 toplamıyla elde edildiği bir kural yazmak mümkündür.

$$a_i^{t+1} = a_{ij-1}^t + a_{ij+1}^t + a_{i-1j}^t + a_{i+1j}^t \text{ Mod } 2 \quad (2.79)$$

2.10.3. Cellular Automaton'da tersinirlik ve tersinmezlik

“Cellular Automaton”lar kesikli dinamik sistemler olarak göz önüne alınabilmektedir. Bu yüzden hemen hemen bütün durumlarda “Cellular Automaton” gelişimi tersinmezdir. Yani konfigürasyon uzayındaki yolaklar zaman içinde kesişirler ve mümkün olan bütün başlangıç hallerinden başlayan yolaklar belirli çekici konfigürasyonlarda yoğunlaşırlar. Bu konfigürasyonlar mümkün hallerin sadece çok küçük bir kesrine karşılık gelmektedir. Keyfi başlangıç hallerinden çekici konfigürasyonlara olan gelişim “Automaton”ın kendi kendine düzelmesine neden olmaktadır. Yani belirli bir yapıya sahip olmayan başlangıç halinden uzun bir zaman adımı sonra belirli bir yapıya sahip hale gelişmektedir[39,40,46]. Ancak tersinmezlik CA için gerekli bir özellik değildir. CA’daki tersinmez davranış entropi göz önünde bulundurularak analiz edilebilir. Entropi genel olarak bir sistemin mümkün hallerinin ortalama sayısının logaritması veya

$$S = \sum_i P_i \log_2 P_i \quad (2.80)$$

olarak tanımlanmaktadır[39]. Burada P_i i.inci hal için ihtimaliyettir. Entropi değer olarak mümkün haller topluluğunda bir hali belirlemek için gerekli üçlü bitlerin ortalama sayısı olarak göz önüne alınabilir. Bir boyutta N hücreden her biri, iki hale sahip ise 2^N farklı konfigürasyon mümkündür. Bir sistemin toplam entropisi, istatikselsel olarak bağımsız alt sistemlerin entropilerinin toplamıdır. Entropi, bir sistem tamamen düzensiz ve bağımsız alt sistemler maksimum sayıda ise maksimumdur. Termodinamiğin ikinci kanununa göre entropi zamanla artma eğilimindedir. Fiziksel sistemler düzenli hallerden başlayarak zamanla daha düzensiz hallere bozunurlar. Tersinmez sistemlerde entropi zamanla azalmaktadır. Tersinir sistemlerde ise zaman değişimi hemen hemen her zaman entropide bir artışa sebep olmaktadır. Genel olarak CA kuralları tersinmez olmalarına rağmen, tersinir bir CA oluşturmak mümkündür.

Bir ve iki boyutlu CA lar için yukarıda tanımlanan kurallar tersinmez kurallardır. Bir kural eğer her bir konfigürasyon tek bir geçmişe sahip ise veya o kural ile geriye dönüş mümkün ise tersinirdir. “CA”da aşağıdaki şekilde tersinir bir kural oluşturulabilmektedir.

$$C^{t+1} = f(\text{t.zaman adımıdaki koşullar}) - C^{t-1} \pmod{n} \quad (2.81)$$

Burada C merkezi hücreyi, n bir hücrenin kaç mümkün değer alabildiğini göstermektedir. f komşu hücre değerlerinin bir fonksiyonudur. Yukarıdaki ifade f değişmeden C^{t-1} için rahatlıkla çözülebilir ve bu özellik yeni kuralı tersinir yapar. n=2 için mod2 çıkarma işlemi basitçe tek başına bir OR Boolean işlemidir. Bu yeni kural zamana ikinci dereceden bağlıdır, fakat her bir hücre n^2 hale sahip olacak şekilde geçmiş haller tanımlanarak birinci dereceden yapılabilir. Bu şekilde kurulmuş kurallar sadece tersinir değil, onlar aynı zamanda zaman tersinimi altında değişmezdir; ardıl konfigürasyonlar aynı kural ile geriye doğru iki son konfigürasyon ters çevrilerek basitçe oluşturulabilmektedir.

2.11. Ising Model İçin Creutz Cellular Automaton

Bu modelde[38], (LxL) kare örgüdeki her hücreye dört ikili “bit” karşılık getirilmekte ve bir hücredeki değişkenlerin alacağı değer bir önceki zaman adımındaki kendi değeri ile ona en yakın komşularındaki değişkenlerin değerinden aşağıda verilen kurala göre tayin edilmektedir. Bu modeldeki dört ikili “bit” den ilki, B_i Ising spinidir; “0” ve “1” değerlerini alabilir. $S_i = 2B_i - 1$ olmak üzere, Ising spin enerjisi H_I aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır.

$$H_I = -J \sum S_i S_j \quad (2.82)$$

Burada $\langle ij \rangle$ bütün en yakın komşu hücre çiftleri üzerinden toplamı göstermektedir. Her bir hücredeki ikinci ve üçüncü “bit” spine eşlik eden momentuma (demon) karşılık gelmektedir. $D_{1,i}$, $D_{2,i}$ ile gösterilen bu bitler “0” ve “1” değerlerini

alabilmekte ve $(D_{1,i} \times 2^0 + D_{2,i} \times 2^1)$ şeklinde 0,1,2 ve 3 değerlerini alabilen bir tamsayı oluşturmaktadır. Momentum değişkenine karşılık gelen kinetik enerji H_K , bu tam sayı değerinin dört katını almaktadır.

$$H_K = 4 \sum (D_{1,i} + 2D_{2,i}) \quad (2.83)$$

Kinetik enerji bu değerleri aldığı anda, bir spin değişiminde Ising enerjideki oluşan maksimum enerji değişimi karşılanabilmektedir. Bu durumda toplam enerji değişimi karşılanabilmektedir. Bu durumda, toplam enerji H

$$H=H_I+H_K \quad (2.84)$$

tüm simülasyon süresince korunmaktadır. Dördüncü "bit" "Cellular Automaton"nın zamanla dama tahtası üzerinde gelişimini sağlamakta ve böylece Ising modelin "Cellular Automaton" ile simülasyonunu mümkün kılmaktadır.

Gelişim süresince dama tahtasının siyah(=1) hücrelerine kural uygulanıp rengi beyaza(=0) çevrilir, beyaz hücrelerin ise rengi siyaha çevrilir. Rengi beyaza çevrilen siyah hücrelerin spini ters çevrilerek(1→0 veya 0→1) Ising enerjideki dH_I enerji değişimi hesaplanır. Eğer enerji değişimi bu hücrenin momentum değişkenine aktarılabilir veya momentumun değişkeninden alınabilecek bir değer ise ve toplam enerji korunuyor ise spin ters çevrilir. Buna uygun olarak momentum değiştirilir. Aksi halde spin ve momentum değiştirilmez. Bu işlem örgüdeki bütün siyah hücrelere aynı zaman adımında uygulanmakta ve gelişim süresince periyodik sınır şartı kullanılmaktadır.

2.11.1. Creutz algoritması

Bu yöntemde yukarıda tanımlandığı gibi momentum değişkenine karşılık gelen kinetik enerji , iki "bit" ile kodlanmış olduğundan sınırlı değerler alabilmektedir. Bir spin değişiminde Ising enerji değişimi , dH_I

$$N_i = \sum_k (B_i + B_k) \text{Mod} 2 \quad (2.85)$$

olmak üzere , 4'ün katları ile değişmektedir.

$$dH_i = 4(4 - N_i) \quad (2.86)$$

Burada alt indisi i. Hücrenin en yakın komşu hücreleri üzerinden toplamı göstermektedir. Kinetik enerji Ising enerji değişimine uygun olarak 4'ün katları ile değiştiğinden onun maksimum değeri M=28 dir. Burada spin değişimi deterministik bir “Cellular Automaton” kuralı ile gerçekleşmektedir. E_i kinetik enerjinin alabileceği değerlere karşılık gelmek üzere, spin değişim kuralı aşağıdaki şekilde verilmektedir.

$$q_i^t = E_i^t - 4(2 - N) \quad (2.87)$$

$$A_i^t = \left[-1 \langle q_i^t \rangle_{M+1} \right]_T \quad (2.88)$$

$$B_i^{t+1} = (B_i^t + (A_i^t W_i^t)) \text{Mod} 2 \quad (2.89)$$

$$E_i^{t+1} = q_i^t A_i^t + E_i^t (1 - A_i^t) \quad (2.90)$$

$$W_i^{t+1} = 1 - W_i^t \quad (2.91)$$

(2.88) eşitliğindeki []_T işlemi eğer kontrol doğru ise 1 , yanlış ise 0'a eşittir. Burada W dördüncü “bit”e karşılık gelen değişkendir. Bu aloritmadan açıkça görülebileceği gibi bir merkezi hücrenin spin değişkeninin bir sonraki zaman adımındaki değeri

$$B_{i,j}^{t+1} = f(B_{i,j}^t, B_{i,j-1}^t, B_{i,j+1}^t, B_{i-1,j}^t, B_{i+1,j}^t, E_{i,j}^t, W_{i,j}^t) \quad (2.92)$$

şeklinde deterministik bir “Cellular Automaton” kuralı ile elde edilmektedir. Bu kural tersinir bir “Cellular Automaton” kuralıdır. Eğer her hangi bir zaman adımında bütün örgünün W değişkenleri ters çevrilir ve elde edilen bu konfigürasyon başlangıç konfigürasyonu olarak alınır ise bu zaman adımından geriye doğru ardıl konfigürasyonları oluşturmak mümkün olmaktadır. Bu yüzden dengedeki bir sistemin simülasyonunu yapmak için oldukça kullanışlı bir algoritmadır.

2.11.2. Creutz Cellular Automatonda Termodinamik niceliklerin Hesabı

Bu model toplam enerjinin korunumu altında mikrokanoniktir. Ancak kinetik enerji ve iç enerji açısından kanonik bir davranış sergilemektedir. Yani simülasyon süresince bu enerjiler dalgalanmaktadır. Bu yüzden $T=1/\beta$ sıcaklığında bir sistemde E_i 'nin kinetik enerjili bir konfigürasyona rastlama ihtimali Boltzman ağırlıklı üstel bir dağılıma uymaktadır;

$$P(E_i) \sim \exp(-4\beta E_i) \quad (2.93)$$

Burada $H_k=4E_i$ ve $E_i=D_{1,i}+2D_{2,i}$ dir. Bu dağılıma uygun olarak kinetik enerjinin beklenen değeri aşağıdaki şekilde ifade edilmektedir.

$$\langle E_i \rangle = \frac{\sum_{n=0}^3 n e^{-4n\beta}}{\sum_{n=0}^3 e^{-4n\beta}} \quad (2.94)$$

Bu ifade ile tanımlanan E_i 'nin beklenen değeri sistem sıcaklığının değerini belirleme imkânı vermektedir. E_i 'nin beklenen değeri hücre başına ve zaman adımı başına hesaplanıp, yukarıdaki ifade kullanılarak $T=1/\beta$ eşitliğinden sıcaklık değerleri belirlenir. Elde edilen bu sıcaklık değerlerine karşılık gelen kendiliğinden mıknatıslanma M , iç enerji H_I , manyetik alınganlık χ ve öz ısı C , yukarıdaki tanımlanan kural uygulanarak oluşturulan konfigürasyonlardan, aşağıda verilen ifadeler yardımı ile hesaplanabilir.

$$M = \frac{1}{N} \sum_i^N S_i \quad (2.95)$$

$$H_1 = \frac{1}{2} N \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad (2.96)$$

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} = L^2 \left(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \right) / kT \quad (2.97)$$

$$\frac{C}{k} = \frac{\partial H_1}{\partial T} = L^2 \left(\langle H_1^2 \rangle - \langle H_1 \rangle^2 \right) / (kT)^2 \quad (2.98)$$

Eş. 2.95 ve Eş. 2.96 eşitliklerinde $N=L \times L$, örgüdeki hücre sayısıdır ve $\langle \rangle$ zaman üzerinden ortalamaya karşılık gelmektedir. Burada M , H_1 hücre başına ortalama değere ve h düzenli bir dış alana karşılık gelmektedir. Ising hamiltoyende düzenli bir dış alan varlığında, alan-spin etkileşmesinin oluşturduğu $h \sum_i S_i$ şeklinde bir ek enerji terimi mevcuttur. Ancak bu çalışmada dış manyetik alanın sıfır olduğu göz önüne alınmaktadır. Bu yüzden Eş. 2.97, manyetik alınganlık için dış manyetik alanın varlığında elde edilen ifadenin $h \rightarrow 0$ limitine karşılık gelmektedir. Bu çalışmada bütün büyüklüklerin beklenen değeri basit aritmetik ortalamalar alınarak hesaplanmaktadır. Yani q herhangi bir ölçülebilir büyüklük olmak üzere q 'nun beklenen değer ifadesi şu şekildedir.

$$\langle q \rangle_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N q_i \quad (2.99)$$

Burada N zaman adımı, örgü veya her ikisi üzerinden ortalamaya karşılık gelmektedir.

3. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Bu çalışmada $L=40, 60, 80, 100, 120, 160, 200, 240$ örgüler için Difüzyon ile Sınırlı Kümeleşme (Diffusion-Limited Aggregation (DLA)) modeli kullanılarak fraktallar elde edilmiştir. Difüzyon ile Sınırlı Kümeleşme (Diffusion-Limited Aggregation (DLA)) modelinde örgünün merkezine bir çekirdek tanecik yerleştirilir. İkinci tanecik merkezden uzakta bulunan gelişigüzel (rasgele) bir örgü gözünden bırakılarak rasgele hareket ettirilir. Bu tanecik çekirdeğin etrafındaki herhangi bir komşu göze ulaşıncaya kümenin bir elemanı olur. Eğer tanecik hareketi esnasında kapalı kare örgünün dışına çıkarsa, o tanecik iptal edilir. Daha sonra aynı işlem yeni tanecikler için tekrarlanır. Difüzyon ile Sınırlı Kümeleşme (Diffusion-Limited Aggregation (DLA)) modeli kullanılarak elde edilen fraktallar iki bitli demonlar kullanılmak yoluyla Creutz Cellular Automaton'da simülasyonu yapılmıştır. Statik üsler genel olarak ilgili termodinamik niceliklerin kritik sıcaklık ve kritik sıcaklık civarında sonlu örgülerde yapılan ölçümlerden, sonlu örgü ölçekleme teorisi yardımı ile hesaplanabilmektedir. Bunun yanı sıra aşağıdaki ifade kullanılarak ta sonsuz örgü kritik üslerinin ($q(\infty)$) elde edilmesi denenmiştir.

$$q(L) = q(\infty) + a / L \quad (3.1)$$

Bu ifade de $q(L)$ sonlu örgü için termodinamik niceliğin kritik üssü olup, $\log q(L, T)$ 'nin $\log(T - T_c(L) / T_c(L))$ 'ye karşı değişiminin eğiminden elde edilmektedir; a bir sabittir, $T_c(L)$ ilgili niceliğin, doğrusal boyutu L olan, sonlu örgü için kritik sıcaklığıdır.

Bu çalışmada iki boyutlu Creutz algoritması için sonsuz örgü kritik üsleri hem kritik sıcaklıkta ve kritik sıcaklık civarında verilen sonlu örgü ölçekleme bağıntıları, hem de yukarıda tanımlanan hesaplama şekli kullanılarak elde edilmiştir. Termodinamik niceliklerin sıcaklıkla değişim eğrilerini oluşturmak amacı ile farklı sıcaklıklara karşılık gelen başlangıç konfigürasyonları, örgünün bütün spin değişkenleri paralel seçilerek (yani bütün spinler "0" veya "1" alınarak ve örgünün beyaz hücrelerindeki

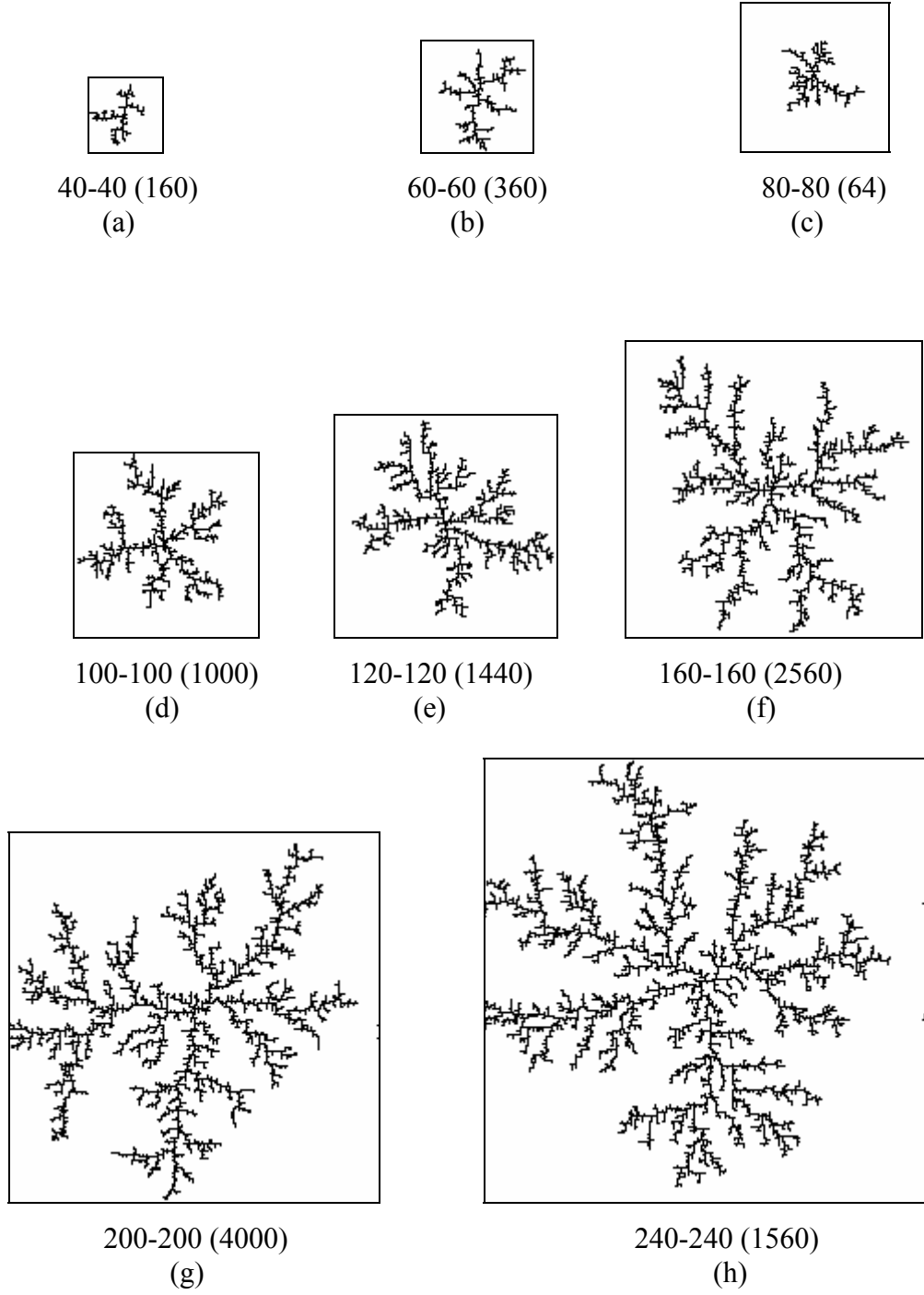
($W=0$) kinetik enerji deęişkenlerinin ikinci “bit”ine rasgele “1” verilerek oluşturulmuştur.

3.1.Bir Tanecik Etrafında Simülasyonla Oluşturulan Kümeler

Küme simülasyonları için kişisel bilgisayarlar kullanılarak kenar uzunluğu 40-240 nokta birimi (pixel) olan kapalı kare örgüde ortalama 1 ile 6 dakika arasında 160 ile 4000 tanecikli bir küme oluşturulabilmektedir.

Buna göre, kümelerdeki tanecik sayısı ile küme oluşumu için gerekli bilgisayar zamanı orantılı değildir. Bunun sebebi şudur: Simülasyon ilerledikçe küme bütünlüğü artar ve simülasyonun başlangıcında harekete başlayan taneciklere göre daha sonra başlayan tanecikler daha az zaman adımıyla kümenin bir elemanı olurlar.

Küme simülasyonları bir kenarı 40-240 nokta birimi (pixel) olan kapalı kare örgüde yapılmaktadır. Merkezi çekirdeğin koordinatları 40 nokta birimi (pixel) için (20,20), 60 nokta birimi (pixel) için (30,30), 80 nokta birimi (pixel) için (40,40), 100 nokta birimi (pixel) için (50,50), 120 nokta birimi (pixel) için (60,60), 160 nokta birimi (pixel) için (80,80), 200 nokta birimi (pixel) için (100,100) ve 240 nokta birimi (pixel) için (120,120) alınıp, 160, 360, 64, 1000, 1440, 2560, 4000 ve 1560 tanecikli 8 küme oluşturulmaktadır. Taneciklerin birbirine yapışma olasılığı $P = 1$ alınmıştır. Difüzyon ile Sınırlı Kümeleşme (Diffusion-Limited Aggregation (DLA)) modeli kullanılarak elde edilen fraktallar şekil 4.1.(a),(b),(c),(d),(e),(f),(g),(h)’de gösterilmektedir[4,7,8,90].



Şekil 3.1. (a) $L=40$, (b) $L=60$, (c) $L=80$, (d) $L=100$, (e) $L=120$, (f) $L=160$, (g) $L=200$, (h) $L=240$ örgüleri için Difüzyon ile Sınırlı Kümeleşme (Diffusion-Limited Aggregation (DLA)) modeli kullanılarak elde edilen fraktalların şekilleri

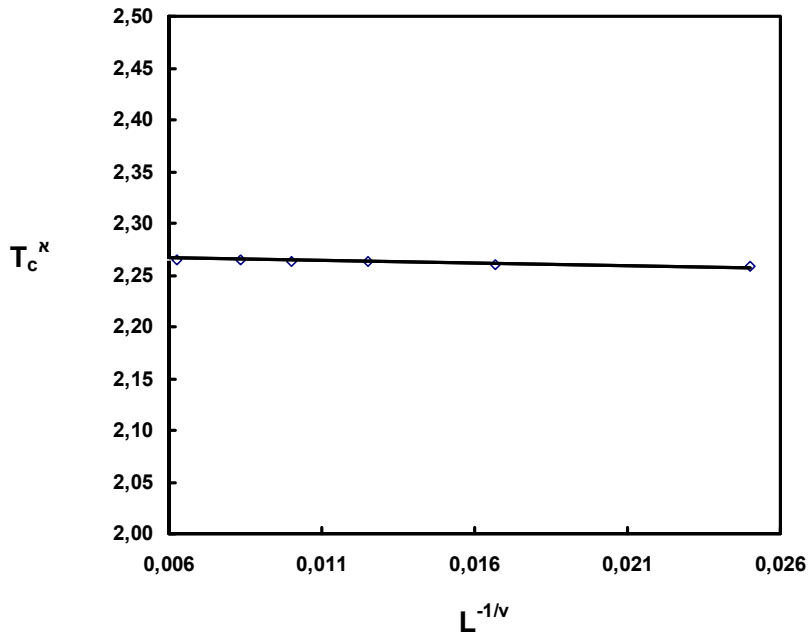
3.2.Kritik Sıcaklık

Sonlu örgü kritik sıcaklık değerleriyle sonsuz örgü sıcaklık değerleri arasındaki bağıntı “Eş. 3.2” ve “Eş. 3.3” de verilmiştir[6,32,54,55,82,83].

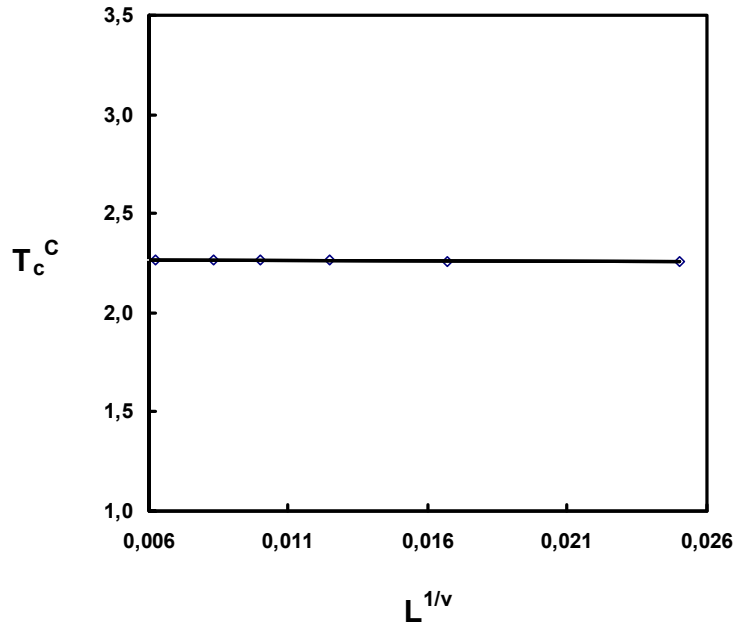
$$T_c^{\chi}(\infty) - T_c^{\chi}(L) \propto L^{-1/\nu} \quad (3.2)$$

$$T_c^C(\infty) - T_c^C(L) \propto L^{-1/\nu} \quad (3.3)$$

$T_c^{\chi}(\infty)$ ve $T_c^C(\infty)$ manyetik alınganlık ve özısı için sonsuz örgü kritik sıcaklığıdır. ν ise korelasyon uzunluğu kritik üssüdür. $d=2$ boyut için $\nu = 1$ 'dir.



Şekil 3.2. Sonlu örgü için $T_c^{\chi}(L)$ 'nin $L^{1/\nu}$ 'ye karşı değişimi ($40 \leq L \leq 240$ aralığındaki verilere uyan doğru $L \rightarrow \infty$ iken sonsuz örgü kritik sıcaklık değeri olarak $T_c^{\chi}(\infty) = 2,269$ vermektedir)



Şekil 3.3. Sonlu örgü için $T_c^C(L)$ 'nin $L^{1/\nu}$ 'ye karşı değişimi ($40 \leq L \leq 240$ aralığındaki verilere uyan doğru $L \rightarrow \infty$ iken sonsuz örgü kritik sıcaklık değeri olarak $T_c^C(\infty) = 2,269$ vermektedir)

Sonlu örgü sıcaklık değerinden sonsuz örgü sıcaklık değerinin bulunmasında manyetik alınganlık ve özısının maksimum olduğu sıcaklık değerleri kullanılabilir. İki boyutlu Ising modeli için Şekil 3.8 ve Şekil 3.14'de de görüldüğü gibi manyetik alınganlığın maksimumları özısınınkine göre daha sivri ve daha yüksek olduğundan $T_c^Z(L)$ değerleri ile elde edilen T_c değerleri daha hassas olacaktır. Manyetik alınganlık ve özısı için değerler Çizelge 3.1'de verilmektedir.

Çizelge 3.1. Manyetik alınganlık ve özısının maksimum olduğu sonlu örgü kritik sıcaklık değerleri

L	$T_c^{\chi}(L)$	χ_{\max}	$T_c^C(L)$	C_{\max}
40	2,259	24,636	2,259	0,567
60	2,261	50,926	2,260	0,570
80	2,262	84,762	2,262	0,575
100	2,264	106,242	2,264	0,588
120	2,264	180,684	2,265	0,593
160	2,265	289,225	2,267	0,598
200	2,265	419,050	2,268	0,602
240	2,272	553,514	2,268	0,608

Çizelge 3.1 incelendiğinde sonlu örgü boyutu(L) arttıkça, sonlu örgü kritik sıcaklık değerleri ($T_c^{\chi}(L)$ ve $T_c^C(L)$) artmaktadır. $T_c^{\chi}(L)$ ile $T_c^C(L)$ “Eş. 3.1” ve “Eş. 3.2” formüllerine uydurularak Şekil 3.2. ve Şekil 3.3.’de çizilmiştir. Bu grafiklerden T_c sonsuz örgü kritik sıcaklık değerleri için $T_c^{\chi}(\infty) = 2,269$ ve $T_c^C(\infty) = 2,269$ elde edilmiştir. Elde edilen bu sonsuz örgü kritik sıcaklık değerleri $T_c^{\chi}(\infty) = 2,269$ [25] teorik değeri ve $T_c^C(\infty) = 2,263$ [55] Creutz Cellular Automaton’un değeri ile uyum halindedir.

Çizelge 3.2. İki boyutlu Ising modelinin farklı çalışmalarda elde edilen sonsuz örgü kritik sıcaklık değerleri

T_c	Yöntem
2,269	Teorik sonuç [25]
2,263	Creutz Cellular Automaton [55]
2,269 (Manyetik alınganlık maximumlarından) bu çalışma	Creutz Cellular Automaton
2,269(özısının maximumlarından) bu çalışma	Creutz Cellular Automaton

3.3. Düzen parametresi için kritik üs

Düzen parametresinin ($M(L)$) lineer örgü boyutuna (L) ve kritik üslere ($\beta(L), \beta'(L)$) bağımlılığı [32,54,55,82,83]

$$M(L)\alpha t(L)^{\beta(L)}, \quad T < T_c(L), \quad T \rightarrow T_c(L) \quad (3.4)$$

$$M(L)\alpha t(L)^{\beta'(L)}, \quad T > T_c(L), \quad T \rightarrow T_c(L) \quad (3.5)$$

ifadeleri ile verilmektedir. Burada $t(L) = |T - T_c(L)| / T_c(L)$ indirgenmiş sıcaklık, $\beta(L)$ ve $\beta'(L)$ ise düzen parametresi için kritik üstlerdir. $d=2$ boyutta sonlu örgü ölçekleme teorisi

$$M = L^{-\frac{\beta}{\nu}} X(x) \quad (3.6)$$

$$X(x) = Bx^\beta \quad (3.7)$$

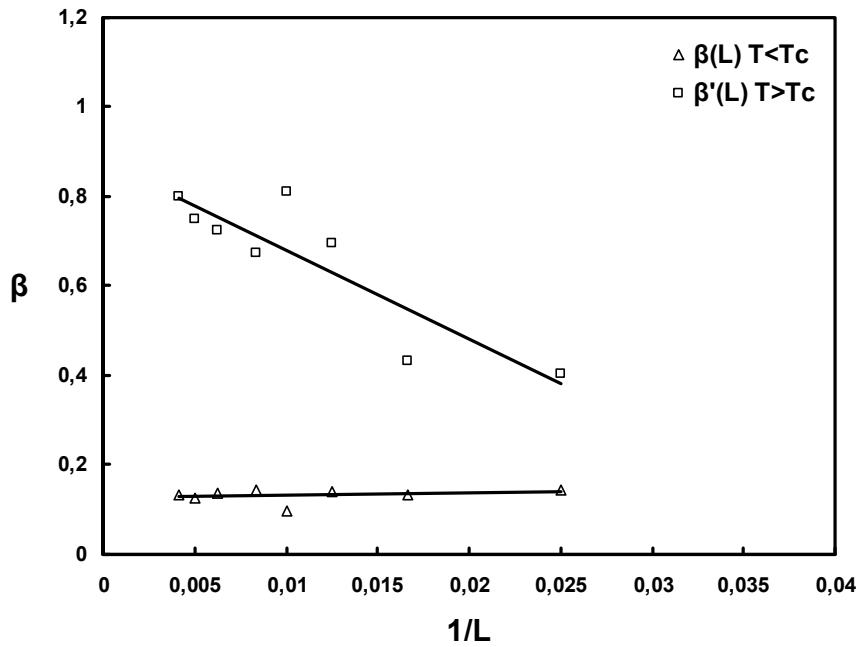
ifadeleri ile verilmektedir. Burada $x = tL^{1/\nu}$ ve X ölçekleme fonksiyonudur. $T = T_c$ 'de "Eş. 3.6"

$$M\alpha L^{-\frac{\beta}{\nu}} \quad (3.8)$$

formunu almaktadır.

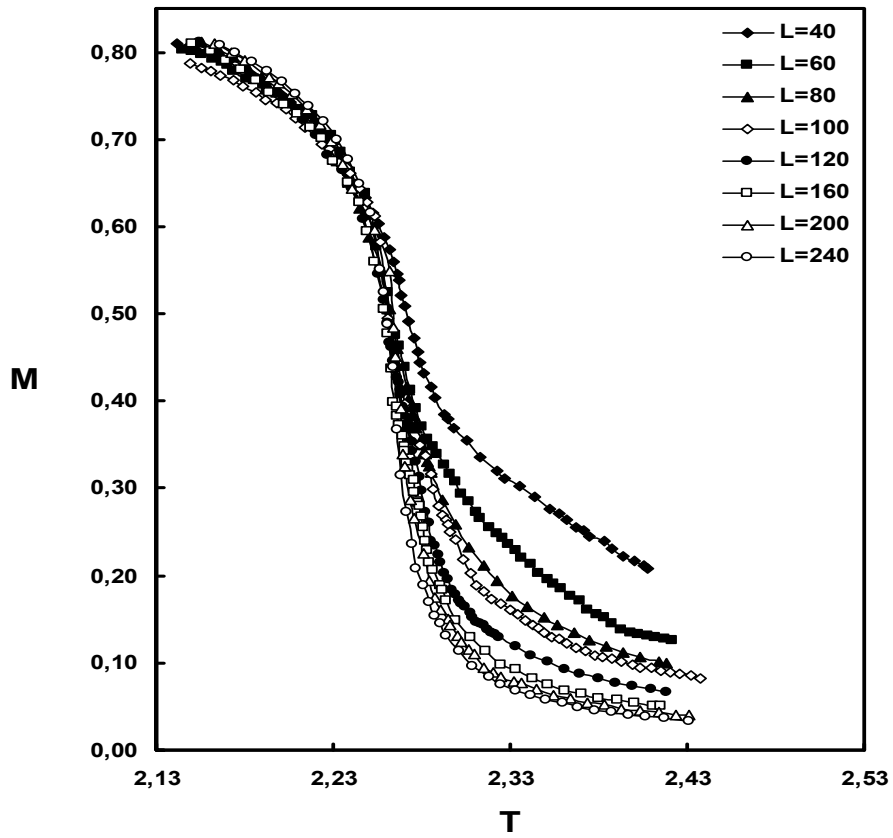
Çizelge 3.3. $0,0005 \leq t \leq 0,074$ aralığında $M(L)$ 'nin indirgenmiş sıcaklık $t(L) = |T - T_c(L)|/T_c(L)$ 'e karşı Log-Log grafiğinin eğiminden elde edilen kritik üs $\beta(L)$ ve $\beta'(L)$ değerleri

L	$\beta(L)$	$\beta'(L)$
40	0,144	0,403
60	0,135	0,432
80	0,140	0,694
100	0,098	0,809
120	0,145	0,675
160	0,137	0,726
200	0,127	0,749
240	0,133	0,801

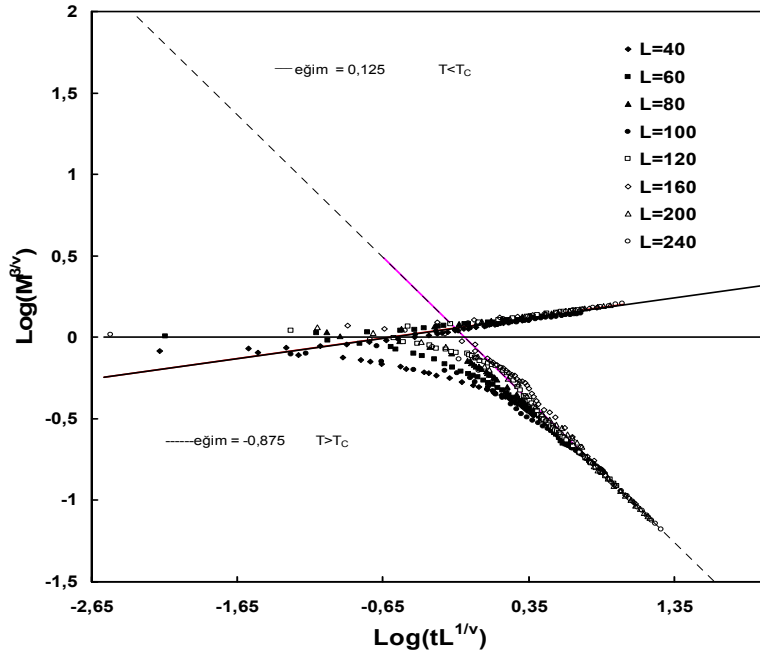


Şekil 3.4. $\beta(L)$ ve $\beta'(L)$ 'nin $1/L$ 'ye karşı değişimleri (Eğrilerin kesim noktasından ($1/L \rightarrow 0$ için extrapolasyonundan) $\beta(\infty) = 0,880$, $\beta'(\infty) = 0,126$ değerleri elde edilmektedir.)

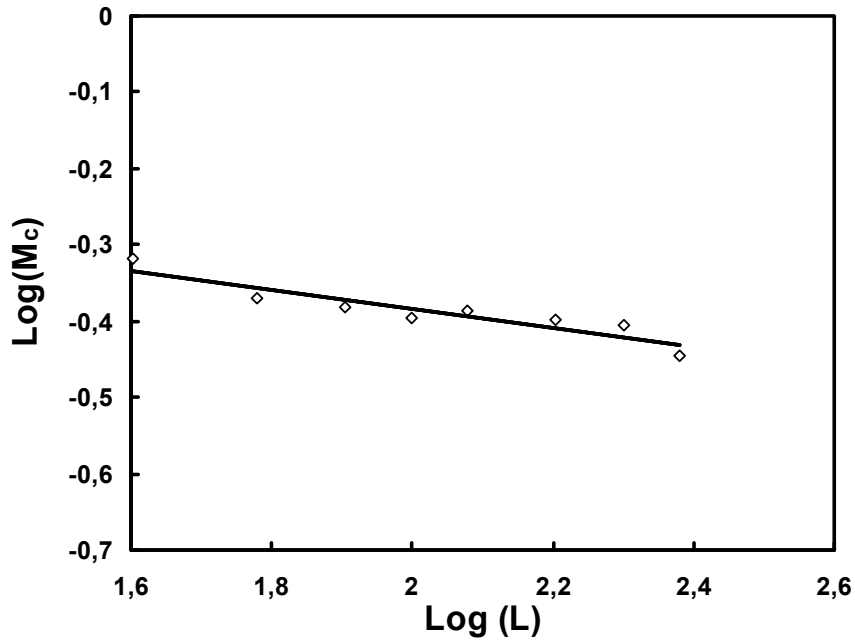
Çizelge 3.3 ve Şekil 4.4'den yararlanılarak elde edilen manyetizasyon için $\beta(\infty)=0,880$, $\beta'(\infty)=0,126$ kritik üs değerleri, $\beta(\infty)=0,875$ ve $\beta'(\infty)=0,125$ 'in teorik değerleri ile uyum halindedir.



Şekil 3.5. Manyetizasyonun sıcaklık ile değişimi



Şekil 3.6. Ölçeklenmiş manyetizasyonun ölçeklenmiş sıcaklık ile değişimi



Şekil 3.7. Manyetizasyonun sonsuz örgü kritik sıcaklığındaki değeri M_c 'nin sonlu örgü doğrusal boyutuna karşı Log-Log değişimi ($(40 \leq L \leq 240)$ doğrunun eğimi $\frac{\beta}{\nu} = 0,126$ değerini vermektedir.)

Çizelge 3.4. Sonsuz örgü kritik sıcaklığında $T_c = 2,269$ ve $L=40, 60, 80, 100, 120, 160, 200, 240$ örgülerinde M_c değeri

L	M_c
40	0,481
60	0,427
80	0,415
100	0,402
120	0,410
160	0,400
200	0,392
240	0,359

Çizelge 3.5. Doğrusal boyut (L) aralığı için M_c 'nin L 'ye karşı Log-Log grafiğinin eğimi

L için aralık	$\frac{\beta}{\nu}$	
$40 \leq L \leq 240$	0,126	Bu çalışma

Şekil 3.6. incelendiğinde dataların üst üste geldiği görülmektedir. Bu ise “Eş. 3.6”da verilen ölçekleme ifadesinin doğru olduğunu göstermektedir.

Şekil 3.5. grafiğindeki datalardan yararlanarak sonsuz örgü kritik sıcaklığında ($T_c = 2,269$) ve $L=40, 60, 80, 100, 120, 160, 200, 240$ örgülerinde elde edilen M_c değerleri Çizelge 3.4’de verilmiştir. $\frac{\beta}{\nu}$ için değişik doğrusal boyut (L) aralığında Şekil 3.7.’den elde edilen değerler Çizelge 3.5.’de verilmiştir. Bu çalışmadan elde edilen $\frac{\beta}{\nu} = 0,126$ değeri, $\frac{\beta}{\nu} = 0,125$ ’in teorik değeri ile uyum halindedir.

3.4. Manyetik alınganlık için kritik üs

Manyetik alınganlığın ($\chi(L)$) lineer örgü boyutuna (L) ve kritik üslere ($\gamma(L), \gamma'(L)$) bağımlılığı [32,54,55,82,83]

$$\chi(L)\alpha t(L)^{\gamma(L)}, \quad T > T_c(L), \quad T \rightarrow T_c(L) \quad (3.9)$$

$$\chi(L)\alpha t(L)^{\gamma'(L)}, \quad T < T_c(L), \quad T \rightarrow T_c(L) \quad (3.10)$$

ifadeleri ile verilmektedir. Burada $t(L) = |T - T_c(L)| / T_c(L)$ indirgenmiş sıcaklık, $\gamma(L)$ ve $\gamma'(L)$ ise manyetik alınganlık için kritik üstlerdir. d=2 boyutta sonlu örgü ölçekleme teorisi

$$\chi = L^{\frac{\gamma}{\nu}} Y(x) \quad (3.11)$$

$$Y(x) = Gx^{-\gamma} \quad (3.12)$$

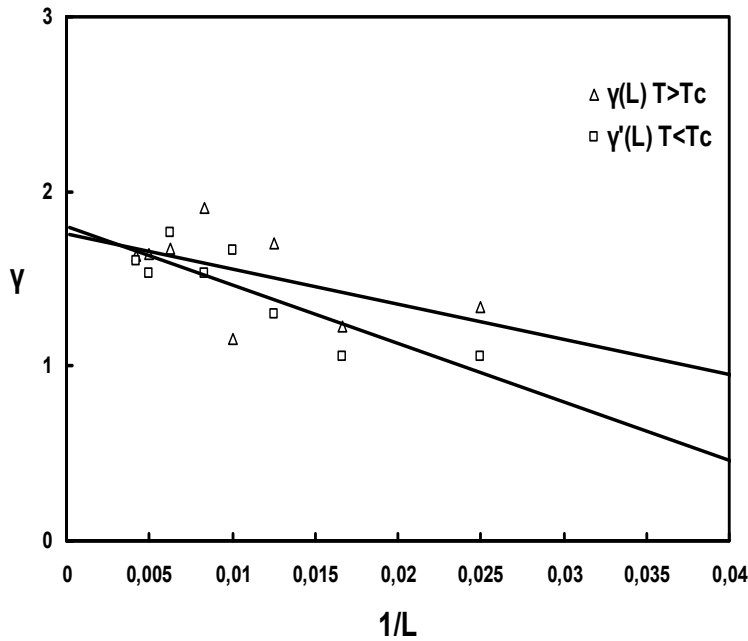
ifadesi ile verilmektedir. Burada $x = tL^{1/\nu}$ ve Y ölçekleme fonksiyonudur. $T = T_c$ 'de "Eş. 3.11"

$$\chi \alpha L^{\frac{\gamma}{\nu}} \quad (3.13)$$

formunu almaktadır.

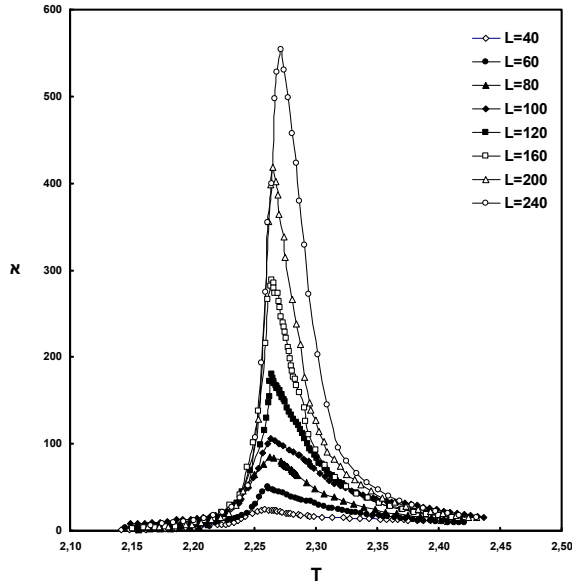
Çizelge 3.6. $0,0005 \leq t \leq 0,074$ aralığında $\chi(L)$ 'nin indirgenmiş sıcaklık $t(L) = |T - T_c(L)|/T_c(L)$ 'e karşı Log-Log grafiğinin eğiminden elde edilen kritik üs $\gamma(L)$ ve $\gamma'(L)$ değerleri

L	$\gamma(L)$	$\gamma'(L)$
40	1,333	1,051
60	1,231	1,052
80	1,700	1,296
100	1,151	1,659
120	1,905	1,531
160	1,670	1,767
200	1,640	1,527
240	1,634	1,602

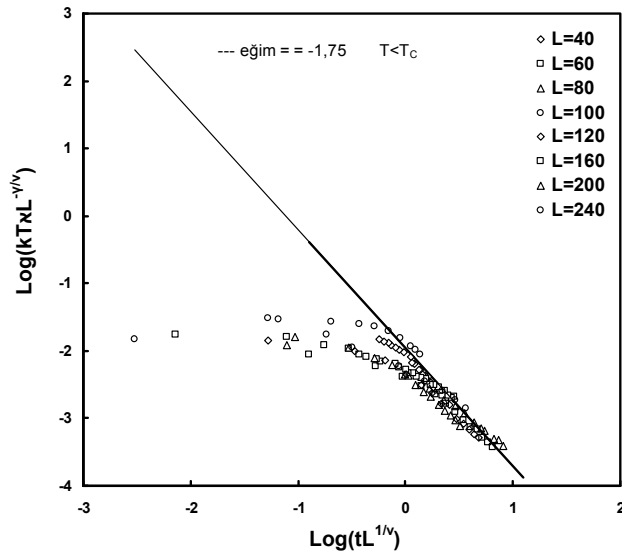


Şekil 3.8. $\gamma(L)$ ve $\gamma'(L)$ 'nin $1/L$ 'ye karşı değişimleri (Eğrilerin kesim noktasından ($1/L \rightarrow 0$ için extrapolasyonundan) $\gamma(\infty) = 1,75$, $\gamma'(\infty) = 1,80$ değerleri elde edilmektedir.)

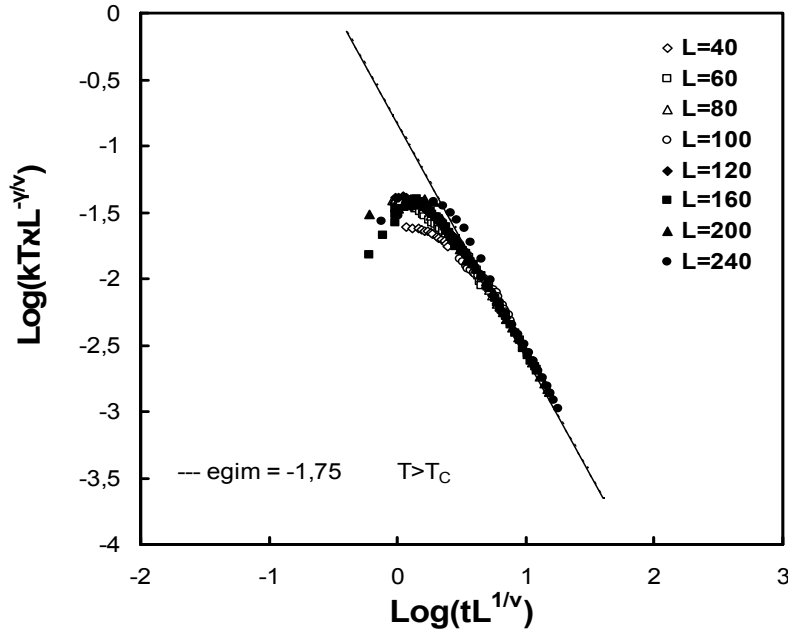
Çizelge 3.6 ve Şekil 3.8'den yararlanılarak elde edilen manyetik alınganlık için, $\gamma(\infty)=1,75$ ve $\gamma'(\infty)=1,80$ kritik üs değerleri, $\gamma(\infty)=1,75$ ve $\gamma'(\infty)=1,75$ 'ın teorik değerleri ile uyum halindedir.



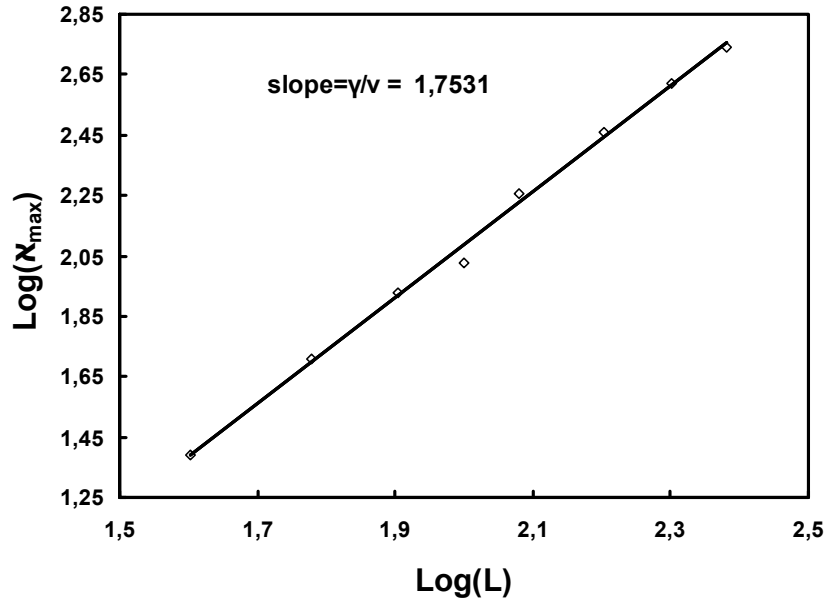
Şekil 3.9. Manyetik alınganlığın sıcaklık ile değişimi



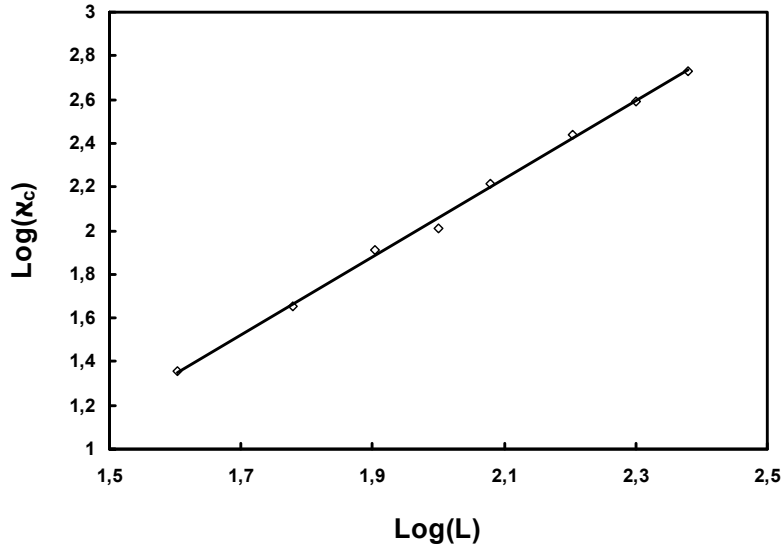
Şekil 3.10. Ölçeklenmiş manyetik alınganlığın ölçeklenmiş sıcaklık ile değişimi ($T < T_c$)



Şekil 3.11. Ölçeklenmiş manyetik alınganlığın ölçeklenmiş sıcaklık ile değişimi ($T > T_c$)



Şekil 3.12. Manyetik alınganlığın sonlu örgü kritik sıcaklığındaki değeri χ_{\max} 'nin sonlu örgü doğrusal boyutuna karşı Log-Log değişimi ($(40 \leq L \leq 240)$ Doğrunun eğimi $\frac{\gamma}{\nu} = 1,75$ değerini vermektedir.)



Şekil 3.13. Manyetik alınganlığın sonsuz örgü kritik sıcaklığındaki değeri χ_c 'nin sonlu örgü doğrusal boyutuna karşı Log-Log değişimi ($(40 \leq L \leq 240)$ Doğrunun eğimi $\frac{\gamma}{\nu} = 1,78$ değerini vermektedir.)

Çizelge 3.7. $L=40, 60, 80, 100, 120, 160, 200, 240$ örgülerinde sonlu örgü maximum değerleri χ_{\max} ve sonsuz örgü kritik sıcaklığında ($T_c = 2,269$) χ_c değerleri

L	χ_{\max}	χ_c
40	24,636	22,634
60	50,926	44,901
80	84,762	81,250
100	106,242	101,769
120	180,684	164,348
160	289,225	272,931
200	419,050	390,041
240	553,514	535,314

Çizelge 3.8. Doğrusal boyut (L) aralığı için χ_{\max} ve χ_c 'nin L'ye karşı Log-Log grafiğinin eğiminden elde edilen $(\frac{\gamma}{\nu})_{\max}$ ve $(\frac{\gamma}{\nu})_c$ 'nin değerleri

L için aralık	$(\frac{\gamma}{\nu})_{\max}$	$(\frac{\gamma}{\nu})_c$	
$40 \leq L \leq 240$	1,75	1,78	Bu çalışma

Şekil 3.10 ve Şekil 3.11 incelendiğinde dataların üst üste geldiği görülmektedir. Bu ise “Eş. 3.11”de verilen ölçekleme ifadesinin doğru olduğunu göstermektedir.

Şekil 3.9 grafiğindeki datalardan yararlanarak sonsuz örgü kritik sıcaklığında ($T_c = 2,269$) ve L=40, 60, 80, 100, 120, 160, 200, 240 örgülerinde elde edilen χ_{\max} ve χ_c değerleri Çizelge 3.7’de verilmiştir. $(\frac{\gamma}{\nu})_{\max}$ ve $(\frac{\gamma}{\nu})_c$ için değişik doğrusal boyut (L) aralığında Şekil 3.12 ve Şekil 3.13’den elde edilen değerler Çizelge 3.8’de verilmiştir. Bu çalışmadan elde edilen $\frac{\gamma}{\nu} = 1,75$ ve $\frac{\gamma}{\nu} = 1,78$ değerleri, $\frac{\gamma}{\nu} = 1,75$ 'in teorik değeri ile uyum halindedir.

3.5. Özısı için kritik üs

Özısı ($C(L)$) lineer örgü boyutuna (L) ve kritik üslere ($\alpha(L), \alpha'(L)$) bağımlılığı [32,54,55,82,83]

$$(C(L) - b)\alpha t(L)^{\alpha(L)}, \quad T > T_c(L), \quad T \rightarrow T_c(L) \quad (3.14)$$

$$(C(L) - b)\alpha t(L)^{\alpha'(L)}, \quad T < T_c(L), \quad T \rightarrow T_c(L) \quad (3.15)$$

ifadeleri ile verilmektedir. Burada $t(L) = |T - T_c(L)| / T_c(L)$ indirgenmiş sıcaklık $\alpha(L)$ ve $\alpha'(L)$ ise özısı için kritik üstlerdir. d=2 boyutta sonlu örgü ölçekleme teorisi

$$C = L^{-\frac{\alpha}{\nu}} Z(x) \quad (3.16)$$

$$Z(x) = Ax^{-\alpha} \quad (3.17)$$

ifadeleri ile verilmektedir. Burada $x = tL^{1/\nu}$ ve Z ölçekleme fonksiyonudur. $T = T_c$ ve $h=0$ 'da "Eş. 3.16"

$$C\alpha L^{\frac{\alpha}{\nu}} \quad (3.18)$$

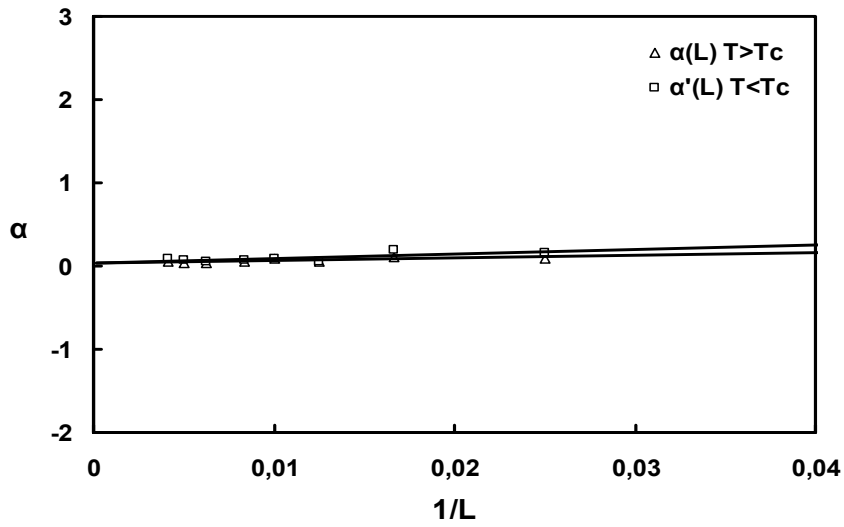
veya

$$C\alpha L^{\frac{\alpha}{(2-\alpha)/d}} \quad (3.19)$$

formunu almaktadır.

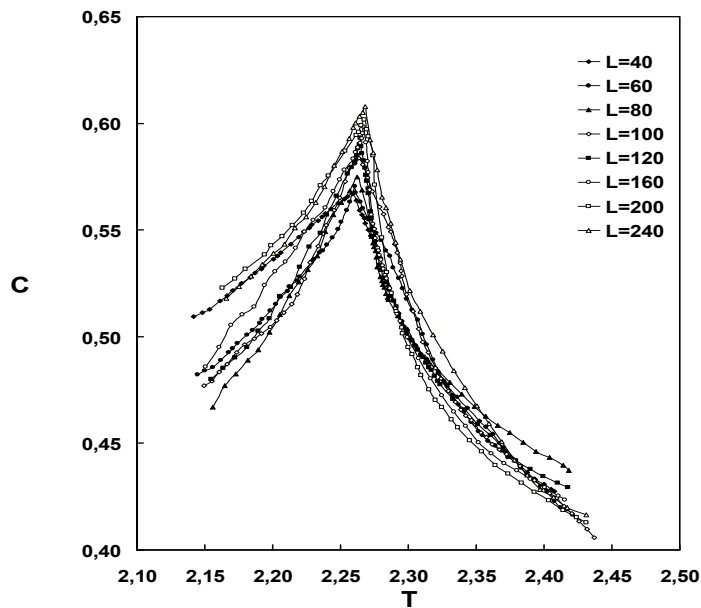
Çizelge 3.9. $0,0005 \leq t \leq 0,074$ aralığında $C(L)$ 'nin indirgenmiş sıcaklık $t(L) = |T - T_c(L)| / T_c(L)$ 'e karşı Log-Log grafiğinin eğiminden elde edilen kritik üs $\alpha(L)$ ve $\alpha'(L)$ değerleri

L	$\alpha(L)$	$\alpha'(L)$
40	0,091	0,153
60	0,114	0,197
80	0,048	0,060
100	0,082	0,092
120	0,056	0,071
160	0,030	0,059
200	0,040	0,076
240	0,046	0,083

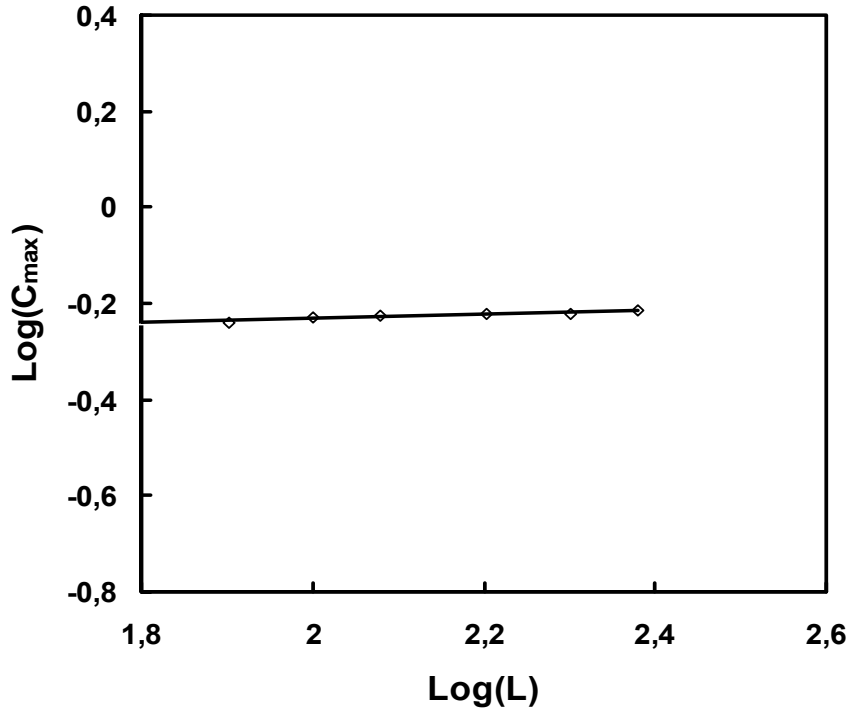


Şekil 3.14. $\alpha(L)$ ve $\alpha'(L)$ 'nin $1/L$ 'ye karşı değişimleri (Eğrilerin kesim noktasından ($1/L \rightarrow 0$ için extrapolasyonundan) $\alpha(\infty) = 0,029$, $\alpha'(\infty) = 0,042$ değerleri elde edilmektedir.)

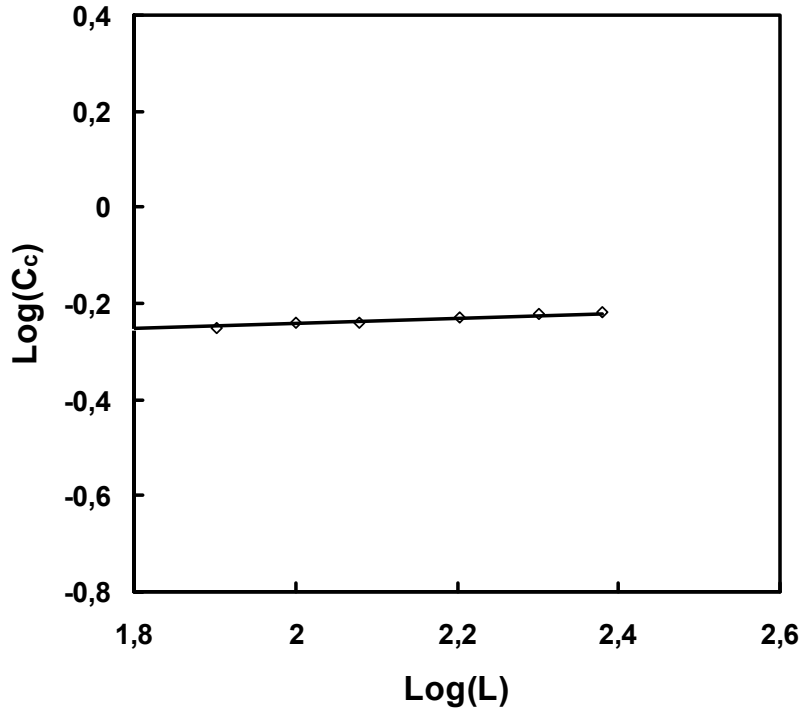
Çizelge 3.9 ve Şekil 3.14'den yararlanılarak elde edilen özısı için, $\alpha(\infty) = 0,029$ ve $\alpha'(\infty) = 0,042$ kritik üs değerleri, $\alpha(\infty) = \alpha'(\infty) = 0$ teorik değeri ile uyum halindedir.



Şekil 3.15. Özısının sıcaklık ile değişimi.



Şekil 3.16. Özısının sonlu örgü kritik sıcaklığındaki değeri C_{\max} 'nin sonlu örgü doğrusal boyutuna karşı Log-Log değişimi ($40 \leq L \leq 240$). Doğrunun eğimi $\frac{\alpha}{\nu} = 0,042$ değerini vermektedir.)



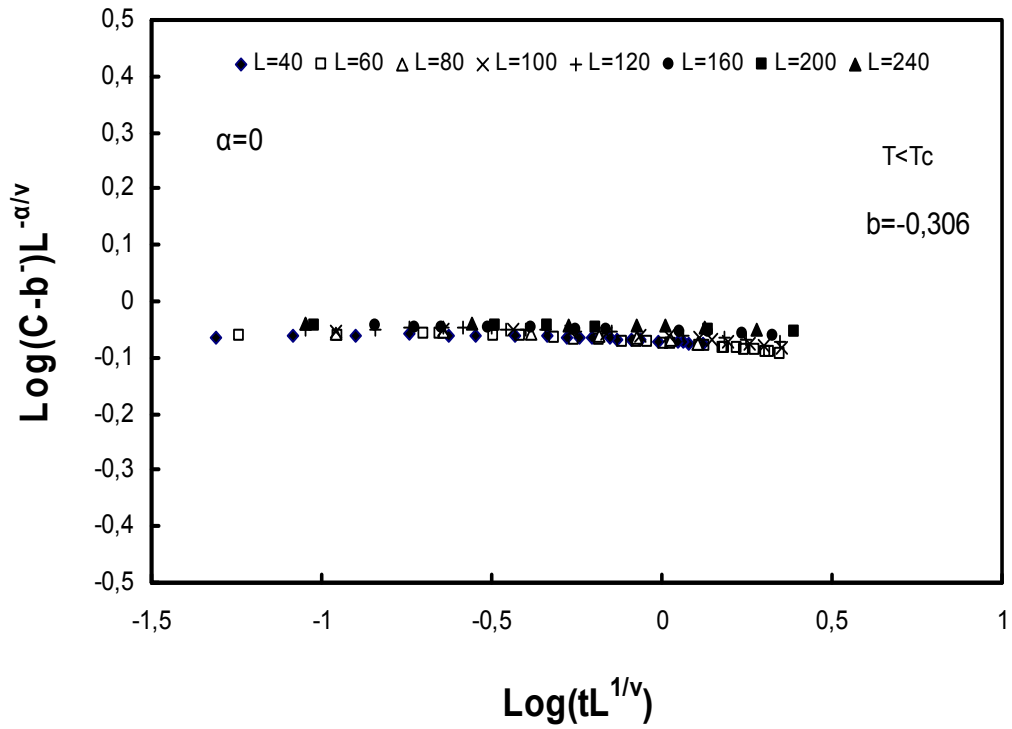
Şekil 3.17. Özısının sonsuz örgü kritik sıcaklığındaki değeri C_c 'nin sonlu örgü doğrusal boyutuna karşı Log-Log değişimi ($(40 \leq L \leq 240)$). Doğrunun eğimi $\frac{\alpha}{\nu} = 0,054$ değerini vermektedir.)

Çizelge 3.10. $L=40, 60, 80, 100, 120, 160, 200, 240$ örgülerinde sonlu örgü maksimum değerleri C_{\max} ve sonsuz örgü kritik sıcaklığında $(T_c = 2,269)C_c$ değerleri.

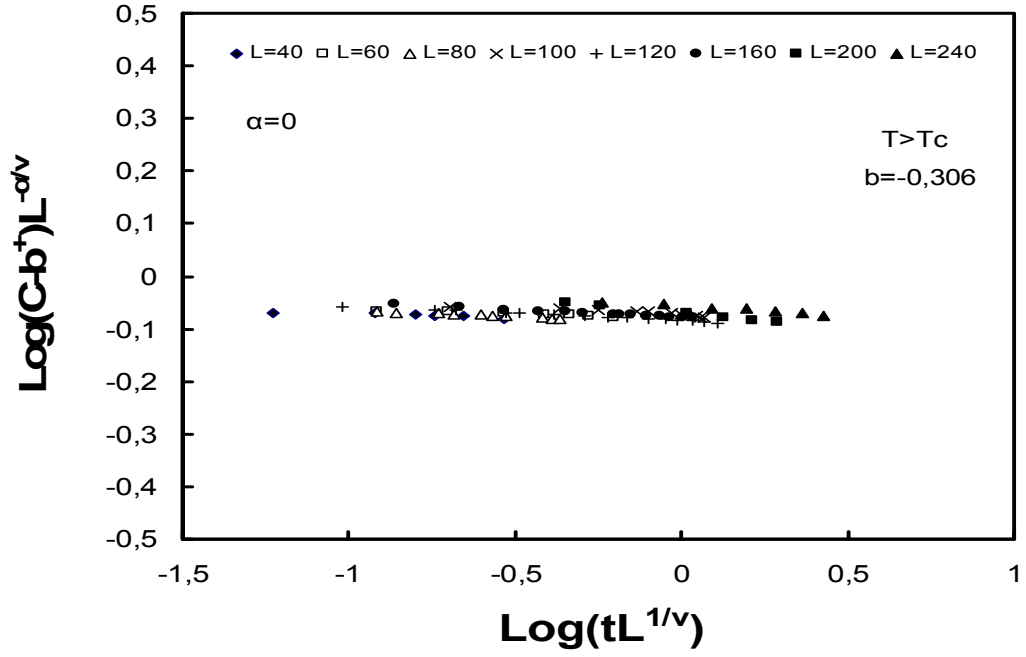
L	C_{\max}	C_c
40	0,567	0,553
60	0,570	0,557
80	0,575	0,561
100	0,588	0,576
120	0,593	0,576
160	0,598	0,591
200	0,602	0,598
240	0,608	0,603

Çizelge 3.11. Doğrusal boyut (L) aralığı için C_{\max} ve C_c 'nin L'ye karşı Log-Log grafiğinin eğiminden elde edilen $(\frac{\alpha}{\nu})_{\max}$ ve $(\frac{\alpha}{\nu})_c$ değerleri

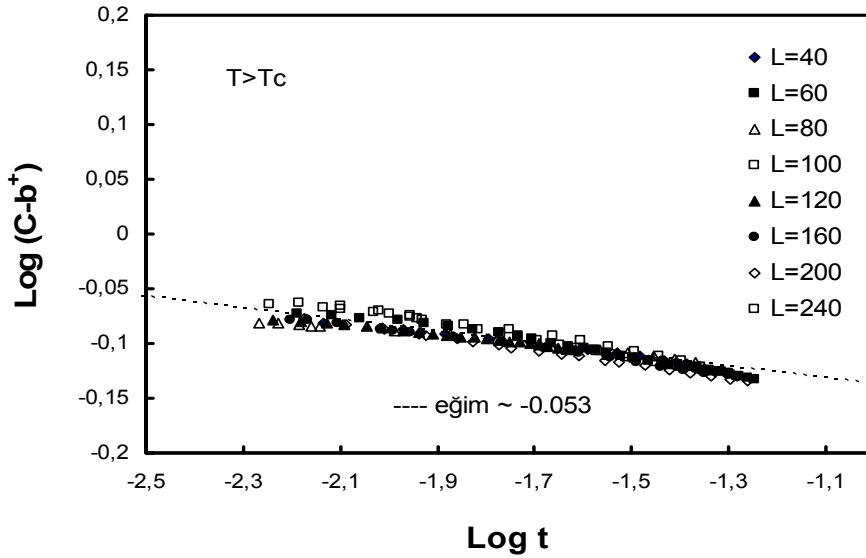
L için aralık	$(\frac{\alpha}{\nu})_{\max}$	$(\frac{\alpha}{\nu})_c$	
$40 \leq L \leq 240$	0,042	0,054	Bu çalışma



Şekil 3.18. $\text{Log}((C-b^-)L^{-\alpha/\nu})$ 'nün $\text{Log}(tL^{1/\nu})$ 'e karşı değişimi ($T < T_c$ ve $b^- = -0,306$)



Şekil 3.19. $\text{Log}((C-b^+)L^{-\alpha/\nu})$ 'nin $\text{Log}(tL^{1/\nu})$ 'e karşı değişimi ($T>T_c$ ve $b^+ = -0,306$)



Şekil 3.20. $\text{Log}(C-b^\pm)$ 'nin $\text{Log}(t)$ 'e karşı değişimi ($t = |T - T_c(L)|/T_c(L)$, eğim=0,053)

Şekil 3.15. grafiğindeki datalardan yararlanarak sonsuz örgü kritik sıcaklığında ($T_c = 2,269$) ve $L=40, 60, 80, 100, 120, 160, 200, 240$ örgülerinde elde edilen C_{\max} ve C_c değerleri Çizelge 3.10'da verilmiştir. $(\frac{\alpha}{\nu})_{\max}$ ve $(\frac{\alpha}{\nu})_c$ için değişik doğrusal boyut (L) aralığında Şekil 3.16. ve Şekil 3.17'dan elde edilen değerler Çizelge 4.11.'de verilmiştir. Bu çalışmada $\frac{\alpha}{\nu} = 0,042$ ve $\frac{\alpha}{\nu} = 0,054$ değerleri ve “Eş. 3.19”dan yararlanarak $\alpha_{\max} = 0,0410$ ve $\alpha_c = 0,052$ değerleri elde edilmiştir. Bu çalışmada elde edilen $\alpha_{\max} = 0,041$ ve $\alpha_c = 0,052$ değerleri $\alpha = 0$ teorik değeri ile uyum halindedir.

Şekil 3.18 ve Şekil 3.19 incelendiğinde dataların üst üste gelmesi “Eş. 3.16”da verilen ölçekleme bağıntısının $T < T_c$, $T > T_c$ ve $b^- = -0,306$ düzeltme terimi kullanıldığında geçerli olduğunu göstermektedir. Şekil 3.20 incelendiğinde tüm dataların ($T > T_c$) eğimi 0,053 olan doğru üzerine düştüğü görülmektedir.

3.6. Binder Parametresi

Binder parametresi $g_L [6,35,103,104]$

$$g_L = \frac{\langle s^4 \rangle_L}{\langle s^2 \rangle_L^2} - 3 \quad (3.20)$$

ifadesi ile tanımlanmaktadır[103-107]. Bu büyüklüklerin sıcaklık değişim grafiği çizilmiştir(Bkz. Şekil 3.21). Bu grafikteki eğrilerin kesim noktası, $L \rightarrow \infty$ iken T_c kritik sıcaklığına karşılık gelmektedir[103-107]. Bu simülasyon çalışmasında Binder parametresinin sıcaklık ile değişim eğrilerinin kesiştiği sıcaklık değerinin Şekil 3.21'deki grafikten $T_c = 2,270$ olduğu görülmektedir.

Çizelge 3.12. Sonlu örgü değerleri için Binder parametresi (g_L) ve özısının (C) sıcaklık ile değişim grafiklerinin kesim noktasından elde edilen sonsuz örgü kritik sıcaklık (T_c) değerleri

$g - T$ grafiğindeki eğrilerin kesim noktasından elde edilen T_c değerleri	$C - T$ grafiğindeki eğrilerin kesim noktasından elde edilen T_c değerleri
2,270	2,271

Çizelge 3.13. Sonsuz örgü kritik sıcaklık ($T_c = 2,269$) değerine karşılık gelen Binder parametresi (g_L) değerleri

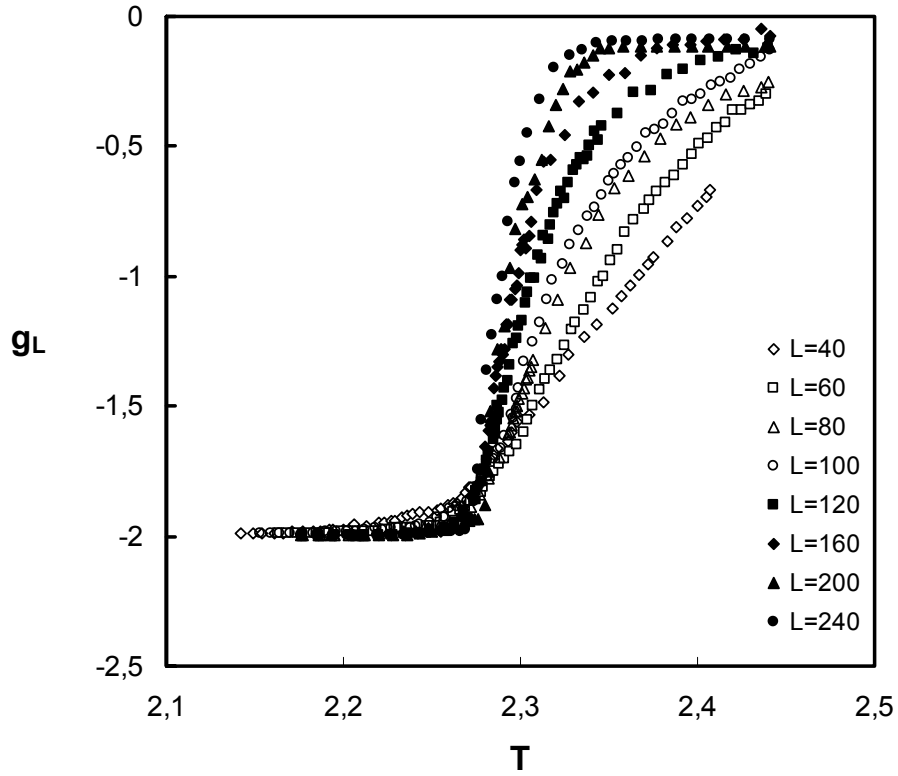
L	$g_L(T_c)$
40	-1,793
60	-1,730
80	-1,644
100	-1,629
120	-1,563
160	-1,545
200	-1,526
240	-1,502

Çizelge 3.12 incelendiğinde sonlu örgülerin kesim noktasından elde edilen sonsuz örgü kritik sıcaklık değerlerinin, $T_c = 2,270$ ve $T_c = 2,271$, sonsuz örgü kritik sıcaklık değeri $T_c = 2,269$ ile uyumlu olduğu görülmektedir. Çizelge 3.13 incelendiğinde doğrusal boyut (L) arttıkça Binder parametresinin değerlerinin büyüdüğü görülmektedir.

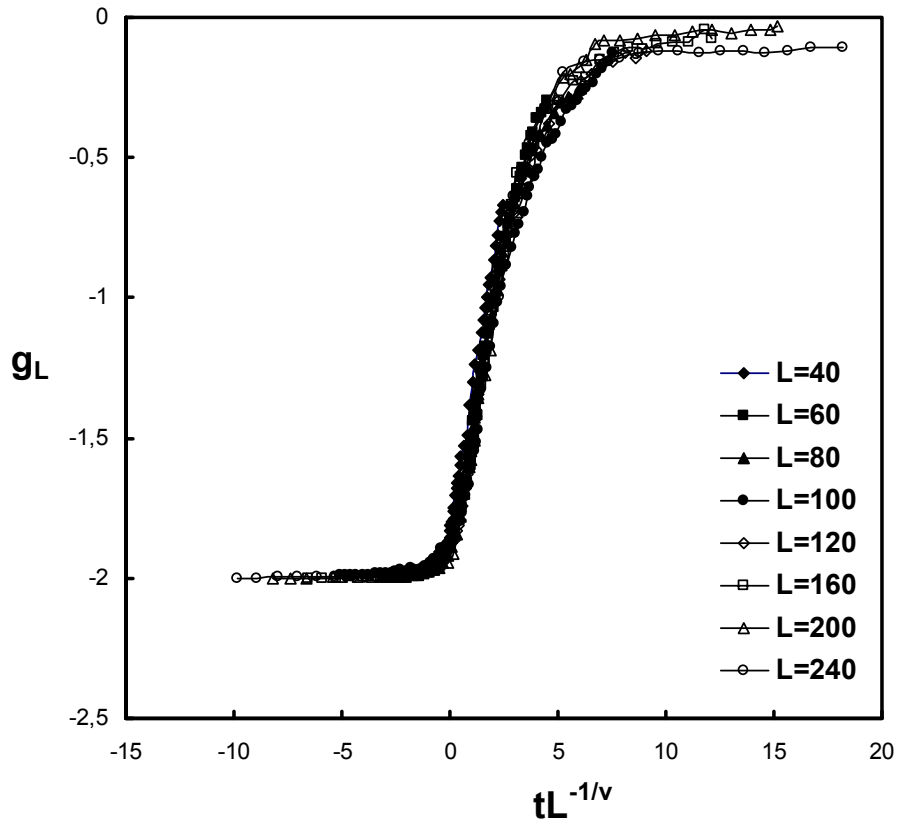
Binder parametresi için sonlu örgü ölçekleme ifadesi,

$$g_L \propto G(tL^{y_T}), L \rightarrow \infty \quad (3.21)$$

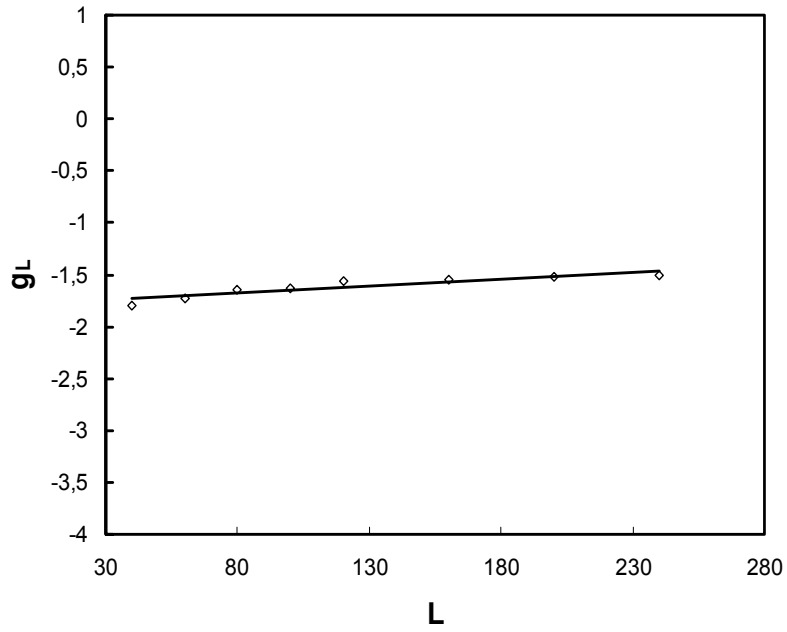
dir. Farklı L değerleri için ölçeklenmiş sıcaklığa göre eğrilerin üst üste gelmesinden (Bkz. Şekil 3.22) “Eş. 3.21” de verilen ölçekleme ifadesinin doğru olduğu anlaşılmaktadır.



Şekil 3.21. Binder parametresinin sıcaklık ile değişimi



Şekil 3.22. Binder parametresinin ölçeklenmiş sıcaklık ile değişimi



Şekil 3.23. Binder parametresinin örgü uzunluğu ile değişimi

Şekil 3.23 incelendiğinde örgü uzunluğuna (L) karşı Binder parametresi (g_L) grafiği çizilmiştir. Bu grafikteki doğrunun kesim noktası $g_L = -1,785$ değerini vermektedir. Bu değer $d=2$ için literatürde verilen $-1,835 \leq g_L \leq -1,680$ değerlerle uyum halinde olduğu görülmektedir[103,104].

KAYNAKLAR

1. Ben-Jacop, E., "From Snowflake Formation to Growth of Bacterial Colonies. Part I: Diffusive Patterning in Azoik Systems", *Contemporary Physics*, 34:247-273 (1993).
2. Witten, T.A., Sander, L.M., "Diffussion-Limited Aggregation, a Kinetic Critical Phenomenon", *Physical Review Letters*, 47:1400-1403 (1980).
3. Witten, T.A., Sander, L.M., "Diffussion-Limited Aggregation", *Physical Review B*, 27:5686-5697(1983).
4. Bayırlı M., "İki Boyutlu Uzayda Tanecik Kümeleşmesinin İncelenmesi", Doktora Tezi, *G.Ü. Fen Bil. Ens.*, Ankara, 1-5, 41-53 (2003).
5. Merdan,Z., Bayırlı,M., "Computation of the Fractal Pattern in Manganese Dentrines", *Chin. Phys. Letter*, 22(8): 2112 (2005).
6. Merdan, Z., Bayırlı, M. and Öztürk, M.K., "The Finite-Size Scaling Study of the Specific Heat and the Binder Parameter of the Two-Dimensional Ising Model for the Fractals Obtained by Using the Model of Diffusion-Limited Aggregation", *Z. Naturforsch*, 64a: 849-854 (2009).
7. Bayırlı, M., Koçkar, H., Merdan, Z., "The effect of seed geometry and size on the mechanism of the pattern formations in two-dimensional space by Monte Carlo simulation", *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials-Symposia*, 1(3): 363-366 (2009).
8. Bayırlı, M., Merdan, Z., "Manyezit Cevheri Yüzeyindeki Mangan Çiçeklerinin Oluşumu", *G.Ü. Fen Bilimleri Dergisi*, 17: 49-57 (2004).
9. Collins, J.B. Levine, H., "Diffuse Interface Model of Diffusion-Limited Crystal Growth", *Physical Review B*, 31: 6119-6122 (1985).
10. Meakin,P., "Progress in DLA Research", *Physica D*, 86: 104-112 (1995).
11. Sander, L.M., "Diffussion-Limited Aggregation: a Kinetic Critical Phenomenon?", *Contemporary Physics*, 41: 203-218 (2000).
12. Mandelbrot, B.B., Kaufman, H. Vespignani, A., Yekutieli, I. and Lam, C.H., "Deviations from Self-Similarity in Plane DLA and the "Infinite Drift"Scenario", *Europhysics Letters*, 29: 599-604 (1995).
13. Mandelbrot, B.B., Vespignani, A. and Kaufman, H., "Crosscut Analysis of Large Radial DLA: Departures from Self-Similarity and Lacunarity Effects", *Europhysics Letters*, 32: 199-204 (1995).

14. Rikvold, P.A., "Simulations of a Stochastic Model for Cluster Growth on a Square Lattice", *Physical Review A*, 26: 647-650 (1982).
15. Vicsek, T., "Formation of Solidification Patterns in Aggregation Models", *Physical Review A*, 32: 3084-3089 (1985).
16. Pastor – Satorras, R., Rubi, J.M., "Particle-Cluster Aggregation with Dipolar Interactions", *Physical Review E*, 51: 594-6003 (1995).
17. Indiveri, G., Scalas, E., Levi, A.C., Gliozzi, A., "Morphologies in Two-Dimensional Growth with Attractive Long-Range Interactions", *Physica A*, 273: 217-230 (1999).
18. Tan, Zhi-Jie et al., "Influence of External Field on Diffusion-Limited Aggregation", *Physical Letters A*, 268: 112-116 (2000)
19. Vand e walle, N., Ausloos, M., "Magnetic Diffusion-Limited Aggregation", *Physical Review E*, 51: 597-603 (1995).
20. Meakin, P., "Formation of Fractal Clusters and Networks by Irreversible Diffusion-Limited Aggregation", *Physical Review Letters*, 51:119-1122 (1983)
21. Kolb, M., Botet, R., and Julien, R., "Scaling of Kinetically Growing Clusters", *Physical Review Letters*, 51:1123-1126 (1983)
22. Meakin, P., "Off-Lattice Simulations of Cluster – Cluster Aggregation in Dimensions 2-6", *Physical Letters*, 107A: 269-272 (1985).
23. Yeomans, J.M., "Statistical Mechanics of Phase Transitions", *Clarendon Press*, Oxford 35-66 (1992).
24. Serway A.R., "Physics for Scientific Engineers & with Modern Physics", *Sanders College Publishing*, 857-862 (1992)
25. Huang, K., "Statistical Mechanics", 2nd ed., *John Wiley and Sons*, Newyork 341-367 (1987).
26. Blume M. Emery V.Y., "Ising Model for the λ Transition and Phase Separation in mixtures". *Phys.Rev.A.*, 4: 1071(1971).
27. Jain A.K. and Landau, D.P., "Monte Carlo study of the fcc Blume-Capel model", *Phys.Rev.B.*, 445 (1980).
28. Honda, Y., "Monte Carlo renormalization-group study on the two-dimensional spin-1 Ising model", *Phys.Lett.A.*, 184:74 (1993).

29. Keskin, M., and Ekiz, C., “The metastable phase diagram of the Blume-Emery-Griffiths model in addition to the equilibrium phase diagram”, *J.Chem. Phys.*, 113: 5407 (2000).
30. Badehdah, M., Bekhechi, S., Benyoussef, A., Touzani, M., “Finite-size-scaling study of the two-dimensional spin-1 model with positive biquadratic interaction”, *J.Mag.and Mat.*, 204:209 (1999).
31. Mahan, G.D., and Girvin, S.M., “Blume-Capel model for plane-triangular and fcc lattices”, *Phys.Rev.B.*,17: 4411 (1977).
32. Kutlu, B., “The Simulation of the 2D Ferromagnetic Blume-Capel model on a Cellular Automaton”, *Int.J.Mod.Phys.C*, 12: 1401 (2001).
33. Baxter, R.B., “Exactly Solved Models in Statistical Mechanics”, *Academic Press*, London, 32-38 (1989).
34. Chandler, D., “Introduction to Modern Statistical Mechanics”, *Oxford University Pres*, New York- Oxford, 119-123 (1987).
35. Merdan, Z., “Altı Boyutlu Ising Modelinin Creutz “Cellular Automaton”İnda İncelenmesi”, Doktora Tezi, *G.Ü. Fen Bil. Ens.*, Ankara, 1-13 (2001).
36. Onsager, L., “Crystal Statistics I.A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition”, *Phys.Rev.*, 65:117 (1944).
37. Creutz, M., “Microcanonical Monte Carlo Simulation”, *Phys. Rev Lett.*, 50: 1411 (1983).
38. Creutz, M., “Deterministic Ising Dynamics”, *Ann.Phys.*,167,62, (1986).
39. Wolfram, S., “Statistical mechanics of cellular automata”, *Rev.Mod.Phys.*, 55: 527 (1983).
40. Wolfram, S., “Universality and Complexity in cellular Automata”, *Physica D*, 10:1 (1984).
41. Wolfram, S., “Theory and Applications of Cellular Automata”, *World Scientific*, 447-480, (1986).
42. Eken, M., Turhan, Ş., Aktekin, N., “Simulation of Diffusion on a Cellular Automaton in Two-Dimensional Space”, *Turkish Journal of Physics*, 20:79, (1995).
43. Vichniac, G.Y., “Simulating physics with Cellular Automata”, *Physica 10D*, 96 (1984)

44. Pomeau, Y., “Invariant in Cellular Automata”, *J.Phys.A.*,17 (L):415 (1984).
45. Aktekin, N., “The Simulation of the Ising Model on the Creutz Cellular Automaton, Annual Reviews of Computational Physic VII, edited by D.Stauffer”, *World Scientific*, Singapore, 1- 14 (2000).
46. Packard, H.N., Wolfram, S., “Two-Dimensional Cellular Automata”, *J.Stat.Phys.*, 38:901 (1985).
47. Hermann, H.J., “Fast algorithm for the simulation of Ising models”, *J.Stat.Phys.*, 45: 145 (1986).
48. Hermann, H.J., Carmesin, H.O.,Stauffer, D., “Periods and Clusters in Ising Cellular Automata”, *J.Phys.A.*, 20:4939 (1987).
49. Lang, W.M.,Stauffer, D., “Test of three-dimensional Q2R Ising algorithm”, *J.Phys.A*, 20: 5413 (1987).
50. Pomeau Y., and Vichniac G.Y., “Extensions of Q2R: Potts Model and other lattices”, *J.Phys.A,Math.Gen.*, 21: 3297 (1988).
51. Schulte, M., Stiefelhagen W.,Demme, E.S., “Period in the Chaotic Phase of Q2R Automata”, *J.Phys.A.Math.Gen.*, 20: L1023 (1987).
52. Rudnick, J., Guo, H., Jasnow, D., “Finite-size scaling and the renormalization group”, *J.Stat.Phys.*, 41: 353 (1985).
53. Luijten, E., Blöte, H.W.J., “Finite size scaling and universality above the upper critical dimensionality”, *Phys.Rev.Lett.*, 76: 1557 (1996).
54. Kutlu, B., Aktekin, N., “Critical exponents and for two-dimensional Ising model by Creutz Algorithm”, *İTÜ İst. Fiz. Gün*, İstanbul (1994), **Abstract Tr. J. of Physic.**, 19:160 (1995).
55. Kutlu, B., “İki Boyutta Ising Modelinin “Creutz Cellular Automaton”ı ile İncelenmesi”, Doktora Tezi ,*G.Ü. Fen Bil. Ens.*, 7-20 (1995)
56. Aktekin, N., , “Simulation of the three-dimensional Ising model on the Creutz Cellular Automaton”, *Physica A*, 219, 436 (1995).
57. Aktekin, N., “Simulation of the four-dimensional Ising model on the Creutz Cellular Automaton”, *Physica A*, 232, 397 (1996).
58. Aktekin, N., Günen, A., Sağlam, Z., “A finite-size scaling study of the four-dimensional Ising model on the Creutz Cellular Automaton”, *Int.J.Mod.Phys.C.*, 10: 875 (1999).

59. Aktekin, N., “The finite-size scaling functions of the four-dimensional Ising model”, **J.Stat.Phys.**, 104: 1397 (2001).
60. Merdan Z., Günen A., and Mülazımoğlu G., “Effect of the Number of Energy Levels of a Demons for the Simulation of the Four-Dimensional Ising Model on the Creutz Cellular Automaton”, **International Journal of Modern Physics**, C 16: 1269 (2005).
61. Mülazımoğlu, 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 (2008).
62. Merdan, Z., Günen, A., Çavdar, Ş. “Dynamical finite-size scaling function of the four dimensional ising model for Creutz algorithm”, **Physica A**, 359: 415 (2006).
63. 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 D: 95-100 (2003).
64. Merdan, Z., Öztürk, M.K., Kürkçü, C., Günen, A., “The finite-size scaling study of the specific heat for the four-dimensional Ising model in the presence of an external magnetic field on the creutz cellular automaton”, **Journal of Optoelectronics and advanced materials-Symposia**, 1(3): 505 (2009).
65. Merdan, Z., Bayırlı, M., Günen, A., “ Dört Boyutlu Ising Model İçin Bilinen Sonlu Örgü Ölçekleme ve Logaritmik Düzeltmeli Sonlu Örgü Ölçekleme Fonksiyonlarının İncelenmesi”, **S.Ü. Fen Edebiyat Fak. Fen Dergisi**, 23: 33-43 (2004).
66. Aktekin, N., Erkoç, Ş., Kalay, M., The test of the finite-size scaling relations for the five-dimensional Ising model on the Creutz Cellular Automaton, **Int.J.Mod.Phys. C.**, 10: 1237 (1999).
67. Kalay, M., Beş Boyutlu Ising Modelinin “Creutz Cellular Automaton”ında İncelenmesi, Doktora Tezi, **G.Ü. Fen Bil. Ens.** 7-14 (2001).
68. 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: 1 (2007).
69. Aktekin, N., “Effect of the number of energy levels of a demon on the simulation of the Ising model in five to seven dimensions on the Creutz Cellular Automaton”, **Int.J.Mod.Phys. C.**, 10: 621 (1999).

70. Aktekin, N., Erkoç, Ş., “The test of the finite-size scaling relations for the six-dimensional Ising model on the Creutz Cellular Automaton”, *Physica A*, 284, 206 (2000).
71. 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 (2004).
72. Merdan Z., Bayırlı 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 (2005).
73. Merdan, Z., Aktekin, N., “The Simulation of the Six-Dimensional Ising Model on the Creutz Cellular Automaton” , *Balkan Physics Letters*, 10: 95-101 (2002).
74. Merdan, Z., Aktekin, N., “Altı Boyutlu Ising Modelinin Creutz Cellular Automaton ile Simülasyonunda Hassasiyetin Arttırılması”, *G.Ü. Fen Bilimleri Dergisi*, 16: 671-676 (2003).
75. Aktekin, N., Erkoç, Ş., “The test of the finite-size scaling relations for the seven-dimensional Ising model on the Creutz Cellular Automaton”, *Physica A*, 290: 123 (2001).
76. Merdan, Z., Duran, A., Atille, D., Mülazımoğlu, G., 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*, 366:265 (2006).
77. 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*, 376: 327 (2007).
78. 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 (2007).
79. Aktekin, N., “Simulation of the eight-dimensional Ising model on the Creutz Cellular Automaton”, *Int.J.Mod.Phys. C*, 8:287 (1997).
80. Merdan, Z., Duran, A., Atille, D., Mülazımoğlu, G., 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*, 366: 265 (2006).
81. Dress, C., “Microcanonical simulations with a large number of demons”, *J.Phys. A*, 28: 7051(1995).

82. Kutlu, B., Kasap, M., Turhan, Ş., “The simulation of two-dimensional Ising model in the presence of an external magnetic field on the Creutz Cellular Automaton”, *Int.J.Mod.Phys.C*, 11:561 (2000).
83. Kutlu, B., “Critical behavior of the two-dimensional Ising model with next-nearest-neighbor antiferromagnetic interaction”, *Physica A*, 234: 807 (1997).
84. Langer, J.S., “Instabilities and Pattern Formation in Crystal Growth”, *Rev. Mod. Phys.*, 52:1-28 (1980)
85. Langer, J.S., Müller-Krumbhaar, H., “Theory of Dendritic Growth-I.Elements of a Stability Analysis”, *Acta Metallurgica*, 26:1681-1687 (1978).
86. Langer, J.S., Müller-Krumbhaar, H., , “Theory of Dendritic Growth-II.Elements Instabilities in the Limit of Vanishing Surface Tension”, *Acta Metallurgica*, 26:1689-1695 (1978).
87. Langer, J.S., Müller-Krumbhaar, H., “Theory of Dendritic Growth-III.Elements Effects of Surface Tension”, *Acta Metallurgica*, 26: 1697-1708 (1978).
88. Rikvold, P.A., “Simulations of Stochastic Model for Cluster Growth on a Square Lattice”, *Phys.Rev.A*, 26:647-650 (1982)
89. Vicsek, T., “Formation of Solidification Patterns in Aggregation Models”, *Phys.Rev.A*, 32: 3084-3089 (1985)
90. Pastor – Satorras, R., Rubi, J.M., “Particle–Cluster Aggregation with dipolar Interactions”, *Phys.Rev. E*, 51: 5994-6003 (1995)
91. Indiveri, G., Scalas, E., Levi, A.C., Gliozzi, A., “Morphologies in Two-Dimensional Growth with Attractive Long-Range Interactions”, *Physica A*, 273:217-230 (1999)
92. Family, F., “Cluster Renormalization Study of Site Lattice Animals in Two and Three Dimensions”, *J. Phys. A: Mat Gen.*, 16: L97-L104 (1983)
93. Meakin, P., “Diffusion-controlled cluster formation in 2-6 dimensional space”, *Phys.Rev.A*, 27:1495-1507 (1983)
94. Mullins, W.W., Sekerka, R.F., “Morphological Stability of a Particle Growing by Diffusion or Heat Flow” , *Journal of Applied Physics*, 34: 323-329 (1963)
95. Mullins, W.W., Sekerka, R.F., “Stability of a Planar Interface During Solidification of Dilute Binary Alloy”, *Journal of Applied Physics*, 35: 444-451 (1964)

96. Privman, Y., "Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems", *World Scientific*, Singapor, 11-32 (1990)
97. Kadonoff, L.P., "Spin-spin Correlation in Two-Dimensional Ising Model", *Nuovo Cimento*, B44:276 (1966)
98. Fisher, M.E., and Burford, R.J., "Theory of Critical-Point Scattering and Correlation. I. Ising Model", *Phys. Rev.*, 156:583 (1967)
99. Landau, D.P., "Finite-Size Behavior of The Ising Square Lattice", *Phys. Rev. B.*, 13:2997 (1976)
100. Grenberger, J.M., Hassard, B.D., and Hastings, S.D., "Pattern Formation and Periodic Structures in Systems Modeled by Reaction-Diffusion Equations", *Bull. Am. Math. Soc.*, 84:1296 (1978)
101. Gerhardt, M., Schuster, H., and Tyson, J.J., "A Cellular Automaton Model of Excitable Media: III. Fitting the Belousov-Zahabotinskii Reaction", *Physica D*, 46:416 (1990)
102. Merdan, Z., Bayırlı, M., "The Simulation of MnO Composed Aggregation", *Bulletin of Pure and Applied Sciences*, 24 D: 1-7 (2005)
103. Selke, W., "Critical Binder cumulant of two-dimensional Ising models", *Eur. Phys. J. B.*, 51: 223-228 (2006)
104. Selke, W., Shchur, L.N., "Critical Binder cumulant of two-dimensional anisotropic Ising models with competing interactions", *Physical Rev. E*, 80: 042104 (2009)
105. Binder, K., "Finite-size scaling analysis of Ising model block distribution functions", *Z. Phys. B*, 43: 119-140 (1981).
106. Binder, K., "Critical properties from Monte Carlo coarse graining and renormalization", *Phys. Rev. Lett.*, 47: 693- 696 (1981).
107. Binder, K. and Luijten, E., "Monte Carlo tests of renormalization-group predictions for critical phenomena in Ising models", *Phys. Rep.*, 344: 179-253 (2001).

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı, adı : BÜLBÜL, Mustafa
Uyruğu : T.C.
Doğum tarihi ve yeri : 26.11.1974 Ankara
Medeni hali : Evli
Telefon : 0 (312) 580 98 69
Faks : 0 (312) 580 42 11
e-mail : mustafa_bulbul74@hotmail.com.

Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet tarihi
Lisans	Gazi Üniversitesi/ Fizik Bölümü	1996
Lise	Ankara Merkez İmam Hatip Lisesi	1992

İş Deneyimi

Yıl	Yer	Görev
1996-2009	M.E.B.	Öğretmen

Yabancı Dil

İngilizce

Hobiler

Bilgisayar Teknolojileri, Masa Tenisi