

**T.C.  
BALIKESİR ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ  
FİZİK ANABİLİM DALI**

**İKİ BOYUTLU UZAYDA MAKRO KRİSTALLERİN MORFOLOJİK  
YAPISININ MONTE CARLO SİMÜLASYON YÖNTEMİ İLE İNCELENMESİ**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**ÖZLEM SAVAŞ PEKDUR**

**Balıkesir, Ocak- 2011**

**T.C.  
BALIKESİR ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ  
FİZİK ANABİLİM DALI**

**İKİ BOYUTLU UZAYDA MAKRO KRİSTALLERİN MORFOLOJİK  
YAPISININ MONTE CARLO SİMÜLASYON YÖNTEMİ İLE İNCELENMESİ**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**ÖZLEM SAVAŞ PEKDUR**

**Balıkesir, Ocak- 2011**

T.C.  
BALIKESİR ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ  
FİZİK ANABİLİM DALI

İKİ BOYUTLU UZAYDA MAKRO KRİSTALLERİN MORFOLOJİK  
YAPISININ MONTE CARLO SİMÜLASYON YÖNTEMİ İLE  
İNCELENMESİ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Özlem SAVAŞ PEKDUR

Tez Danışmanı: Yrd. Doç. Dr. Mehmet BAYIRLI

Sınav Tarihi: 27.01.2011

Jüri Üyeleri: Prof. Dr. Abdullah GÜNEN (GÜ)

Yrd. Doç. Dr. Tayfun UZUNOĞLU (BAÜ)

Yrd. Doç. Dr. Mehmet BAYIRLI (BAÜ)

Doç. Dr. Raif KURTARAN (BAÜ)

Yrd. Doç. Dr. Orhan ZEYBEK (BAÜ)

Balıkesir, Ocak-2011

## ÖZET

### İKİ BOYUTLU UZAYDA MAKRO KRİSTALLERİN MORFOLOJİK YAPISININ MONTE CARLO SİMÜLASYON YÖNTEMİ İLE İNCELENMESİ

Özlem SAVAŞ PEKDUR  
Balıkesir Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü,  
Fizik Anabilim Dalı

(Yüksek Lisans Tezi / Tez Danışmanı: Yrd. Doç. Dr.  
Mehmet BAYIRLI)

Balıkesir, 2011

İki boyutlu uzayda kristal büyüme morfolojisi Monte Carlo simülasyon tekniği ile incelenmektedir. Bu amaç ile difüzyon ile sınırlı kümeleşme algoritması modifiye edilerek yeni A ve B modelleri tanımlanmakta ve modellerde kristal büyüme morfolojisini kontrol etmek için  $0 < t \leq 1$  aralığında değişen yapışma olasılık parametresi,  $t$  kullanılmaktadır. Yapışma olasılığı  $P$  yapışma olasılık parametresi  $t$  ile orantılıdır. Yapışma olasılığı yüzeyde büyüyen kristal küme için karmaşık kimyasal reaksiyon dinamikleri ve geri dönüşümsüz indirgenen katyonların sayısı ile orantılıdır. A ve B modelleri çalıştırılarak farklı yapışma olasılık değerlerinde yedi bağımsız simülasyon ile küme temsilleri üretildi ve hesaplanan değerler bunların ortalamaları üzerinden yapılmaktadır. Küme temsillerinin fraktal boyut ve korelasyon yoğunluk fonksiyon üs değerleri sırası ile A modeli için  $D_f = 1.709 \pm 0.154$  ve  $\alpha = 0.376 \pm 0.005$ , B modeli için  $D_f = 1.711 \pm 0.014$  ve  $\alpha = 0.353 \pm 0.011$  hesaplanmaktadır. Ayrıca radyal tanecik yoğunluğu kritik üs değerleri  $\overline{\rho(r)} = \rho_0 + Ar^{-\gamma}$  bağıntısı ile A modeli için  $\gamma = 0.515 \pm 0.106$ , B modeli için  $\gamma = 0.464 \pm 0.096$  hesaplanmaktadır. Bağlı tanecik yoğunluğu ile yapışma olasılık parametresi arasındaki ilişki  $\rho_0 \sim t^{-\beta}$  bağıntısı ile A modeli için  $\beta = 0.268 \pm 0.022$ , B modeli için  $\beta = 0.290 \pm 0.021$  hesaplanmaktadır. Genel radyal tanecik dağılımı Gaussian dağılım göstermektedir. Ayrıca manyezit cevheri yüzeyinde oluşan doğal mangan dendrit ve deneysel çinko metali kümeleri için hesaplanan değerler simülasyon değerleri ile karşılaştırılmaktadır. Sonuçlar literatür değerleri ile uyumludur.

**ANAHTAR SÖZCÜKLER:** Monte Carlo Metot / Ölçekleme Metodu / Kristal Büyüme / Kritik Üs / Difüzyonla Sınırlı Kümeleşme (DLA)

## ABSTRACT

### MONTE CARLO SIMULATION OF TWO-DIMENSIONAL SPACE WITH STRUCTURE OF MORPHOLOGICAL EXAMINATION OF MACRO CRYSTALS

Özlem SAVAŞ PEKDUR  
Balıkesir University, Institute of Science,  
Department of Physics

(M. Sc. Thesis:Asist. Prof. Mehmet BAYIRLI)

Balıkesir, 2011

The crystal growth morphology of two-dimensional space are reviewed with the Monte Carlo simulation technique. Diffusion-limited aggregation algorithm has been modified with this aim with the new A and B models, and models of crystal growth morphology is defined to control the  $0 < t \leq 1$  parameter, ranging from adhesion probability,  $t$  is used. Parameter  $t$  is proportional to the probability of adhesion  $P$  sticking probability. Adherence to the possibility of a complex chemical reaction dynamics of clusters on the surface of crystal growing and irreversibly reduced the number of cations is proportional to. Sticking probability of different values of A and B models by running the simulation with the cluster of seven independent representations are produced and calculated values of their averages. Representations of the cluster fractal dimension and correlation density function with the base sequence of values for model A and  $\alpha = 0.376 \pm 0.005$ ,  $D_f = 1.709 \pm 0.154$ ,  $D_f = 1.711 \pm 0.014$  for the B model and calculated  $\alpha = 0.353 \pm 0.011$ . In addition, the critical exponent values of the radial particle density  $\overline{\rho(r)} = \rho_0 + Ar^{-\gamma}$  relation for the model with  $\gamma = 0.515 \pm 0.106$  A, B,  $\gamma = 0.464 \pm 0.096$  for the model are calculated. Relative particle density and the relationship between adhesion probability parameter  $\rho_0 \sim t^\beta$  relation for the model with  $\beta = 0.268 \pm 0.022$  A, B,  $\beta = 0.290 \pm 0.021$  for the model are calculated. Radial particle distribution in general shows Gaussian distribution. In addition, the surface of a natural manganese ore, magnesite, zinc metal clusters of dendrites and experimental values for the simulation is compared with the calculated values. The results are compatible with the literature.

**KEY WORDS:** Monte Carlo Method / Method of Scaling / Crystal growth / Critical Exponent / Diffusion Limited Aggregation (DLA)

## İÇİNDEKİLER

ÖZET, ANAHTAR SÖZCÜKLER	iii
ABSTRACT, KEY WORDS	iv
İÇİNDEKİLER	v
ŞEKİLLER LİSTESİ	vii
ÇİZELGE LİSTESİ	ix
TEŞEKKÜR	x
1. GİRİŞ	1
2. BÜYÜME TEORİ VE MODELLERİ	6
2.1 Serbest Sınır Modeli ve Ara yüzey İçin Sınır Şartları	6
2.1.1 Eriyiğin Katılaşmasında Yüzey Gerilimi ve Yüzey Kinetiği	8
2.1.2 Aşırı Doymuş Çözeltinin Katılaşmasında Yüzey Gerilimi ve Yüzey Kinetiği	11
2.1.3 Kristalleşmede Anizotropi	14
2.2 Kümeyi Temel Birimlerinden Büyütme Modeli (“Atomistic” Model)	15
2.3 Yayılma – Faz Geçiş Modeli	15
2.4 Faz – Alan Modeli	19
3. TANECİK KÜMELEŞME MODELLERİ	23
3.1 Temel Kümeleşme Modelleri	23
3.1.1 Eden Modeli	23
3.1.2 Difüzyonla Sınırlı Tanecik Kümeleşme Modeli	24
3.1.2.1 Kararlılık Analizi	24
3.1.2.2 Evrensellik	27
3.1.2.3 Yoğunluk Korelasyon Fonksiyonu	30
3.1.2.4 Topolojik Boyut	32
3.1.3 Perkolasyon Kümeleri	33
3.1.4 Yörüngesini Kesmeksizin Yürüyüş	36
3.2 Temel Kümeleşme Modellerine Renormalizasyon Grup Yaklaşımı	36
3.2.1 DLA Modeli	38
3.3 Kümeleşme Deneyleri	40
3.4 Eden Modelini Temel Alan Kümeleşme Modelleri	41
3.4.1 Magnetik Momentli Tanecikler İçin Eden Modeli	41
3.4.2 Elektrik Yüklü Tanecikler İçin Eden Modeli	41
3.5 DLA Modelini Temel Alan Kümeleşme Modelleri	42

3.5.1	Kare Örgüde Küme Büyümesi İçin Bir “Stochastic” Modelin Simülasyonu	42
3.5.2	Kümeleşme Modellerinde Katılma Desenlerinin Oluşumu	44
3.5.3	Tanecikler Arasında Dipol Etkileşmesi Var İken Kümeleşme	47
3.5.4	İki Boyutlu Uzayda Uzun Menzili Çekici Etkileşmelerin Etkisinde Büyüme Şekilleri	49
3.6	Çok Boyutlu Uzaylarda DLA Modeli	51
3.7	Büyüme Modeli Olarak “Cellular Automaton”lar	51
4.	DİFÜZYONLA SINIRLI TANECİK KÜMELEŞME ALGORİTMASI	53
5.	BULGULAR ve TARTIŞMA	56
6.	SONUÇ	79
7.	KAYNAKLAR	80

## ŞEKİLLER LİSTESİ

### Şekil

<u>Listesi</u>	<u>Adı</u>	<u>Sayfa</u>
Şekil 3.1.1	Kare örgüde $b = 2$ kenarlı bir hücre için, Eden modeline göre, 1 numaralı gözdeki bir çekirdekten başlayarak dört gözü dolu bir küme elde etmek için dört farklı yol	23
Şekil 3.2.1	Kare örgüde $b=2$ kenarlı bir hücre için kapsayan örgü yaratığı konumları	38
Şekil 3.2.1.1	Difüzyonla sınırlı kümeleşmeye göre AB kümesini büyütmenin yolları	38
Şekil 3.2.1.2	(a) Beş adımlı rastgele yürüyüş (b) Altı adımlı rastgele yürüyüş	39
Şekil 4.1	Bir taneciğin gidebileceği komşu gözler	54
Şekil 5.1	Doğal manyezit cevheri yüzeyinde oluşan mangan Dendritleri (a), kimyasal elektrodepozisyon yöntemi kullanılarak üretilen nikel-bakır yapıları (b) ve Petri kabında Mogi ve arkadaşları tarafından gerçekleştirilen çinko sülfat çözeltisi kullanılarak üretilen yapılar (c), (d)	58
Şekil 5.2	Lineer örgü boyutu $L=400$ nokta birimli $N=10000$ tanecikli küme temsillerinin korelasyon yoğunluk fonksiyonunun radyal yarıçapa bağlı değişimi	62
Şekil 5.3	Lineer örgü boyutu $L=400$ nokta birimli $N=10^4$ parçacıklı küme temsillerinin $N(r)$ nin $r$ bağlı logaritmik değişimi	63
Şekil 5.4	Lineer boyutu $L=400$ nokta birimli kapalı kare örgüde $N=10^4$ tanecikli standart ve radyal algoritma kullanılarak yapışma olasılık parametresi $t=1$ için üretilen küme temsillerine ait tanecik yoğunluğunun radyal yarıçapa göre değişimi.	64
Şekil 5.5	Lineer boyutu $L=400$ nokta birimli kapalı kare örgüde $N=10^4$ tanecikli A ve B modeli algoritması kullanılarak yapışma olasılık parametresi $t=1$ için üretilen küme temsillerine ait tanecik yoğunluğunun radyal yarıçapa göre değişimi.	66
Şekil 5.6	Lineer boyutu $L=400$ nokta birimli kapalı kare örgüde $N=10^4$ tanecikli A ve B modeli algoritma kullanılarak yapışma olasılık parametresi $t=1$ için üretilen küme temsillerine ait tanecik yoğunluğunun radyal yarıçapa göre logaritmik değişimi.	67
Şekil 5.7	Lineer boyutu $L=4 \cdot 10^4$ nokta birimli kapalı kare örgüde $N=10^4$ tanecikli standart algoritma kullanılarak üretilen	



Şekil 5.8	küme temsilleri Lineer boyutu $L=4 \cdot 10^4$ nokta birimli kapalı kare örgüde $N=10^4$ tanecikli radyal algoritma kullanılarak üretilen küme temsilleri.	68
Şekil 5.9	A ve B modeli küme temsilleri için $D_f$ nin t ye bağlı dağılımı ve birinci derecen üstel regresyon eğrileri	69
Şekil 5.10	Radyal tanecik yoğunluğu $\rho_0$ in t ye göre değişimi sonucu $\beta$ değerlerinin değişimi	71
Şekil 5.11	A ve B modelleri ile yapışma olasılık parametresi $t=1$ için üretilen küme temsillerine ait radyal parçacık dağılımı	73
Şekil 5.12	A modeli ile farklı yapışma olasılık parametresine göre üretilen küme temsillerine ait radyal parçacık dağılımı.	74
Şekil 5.13	B modeli ile farklı yapışma olasılık parametresine göre üretilen küme temsillerine ait radyal parçacık dağılımı.	74
Şekil 5.14	A ve B modelleri ile üretilen $t=1$ değerli kümelerinde yarıçapa bağlı kütle değişimi.	75
		76

## ÇİZELGE LİSTESİ

### Cizelge

<u>Numarası</u>	<u>Adı</u>	<u>Sayfa</u>
Tablo 3.2.1	İki ve üç boyutlu uzayda oluşan farklı tanecik k için yoğunluk korelasyon fonksiyonuna ait üsler ( $\alpha$ ) kümeleri.	31
Tablo 5.1	A ve B modeli küme temsilleri için radyal parçacık yoğunluna ait ölçekleme ile hesaplanan kritik üs ve fraktal boyut değerleri.	70
Tablo 5.2	A ve B modeli küme temsilleri için $D_f$ 'nin t'ye bağlı birinci dereceden üstel regresyon değerleri.	71
Tablo 5.3	Doğal mangan dendritleri (örnek-1), farklı üretim değerleri göre çinko kümelerine ait (Örnek-2, Örnek-3), bağıl tanecik yoğunluğu, kritik üs, olasılık parametresi ve fraktal boyut ve değerlerinin karşılaştırılması	78

## TEŐEKKÜR

Çalıřmamın her ařamasında bilgi ve tecrübelerini paylařan, deęerli bilgileriyle uzun zaman beni bilgilendiren, benden desteęini esirgemeyen sabrı ve bilgisiyle her zaman birlikte çalıřmaktan gurur duyduęum deęerli danıřman hocam Sayın Yrd. Doç. Dr. Mehmet BAYIRLI 'ya teőekkür ederim.

Beni çalıřmalarımda bir an olsun yalnız bırakmayan, desteęini hiç esirgemeyen, her zaman yanımda olan sevgili eřim Ömer PEKDUR 'a çok teőekkür ederim.

Bana varlıklarıyla destek olan, her Őeyden önemlisi beni bugünlere getiren, benden desteęini hiç ama hiç esirgemeyen, her Őeyi başarabileceęime her zaman inanan ve beni inandıran bu günlere gelmemde en büyük destekçim biricik annem Hayriye SAVAŐ 'a ve beni gökyüzünden izledięini bildięim babacıęım Hasan SAVAŐ 'a sonsuz teőekkür ederim.

## 1. GİRİŞ

Doğada ve deneysel çalışmalar ile üretilen malzeme yüzeylerinde oluşan yapıların, oluşum mekanizmalarını ve onları karakterize eden temel nicelikleri incelemek, teknolojik uygulamalardan dolayı son zamanlarda dikkat çekici bir konu olmuştur. Heterojen çevre şartları ve düzensizlik olmasına rağmen kümelerin nasıl olup da simetrik veya kısmen simetrik özellik taşıdığı bu kaotik yapılar, temel bilimler tarafından araştırılmaktadır.

Bir dinamik sistemin kaotikliğini açıklayan hala genel kabul gören bir tanım yoktur. Ancak durum uzayı içinde başlangıç şartlarına hassas bağımlılığın ya da başka bir ifade ile duyarlı noktaların teknik açıdan daha netleştirmek durumunda olan belli anlamlarda “çokluğu” kaosun en önemli şartları kabul edilmektedir. Ayrıca, ilginç bir şekilde düzensizlik şartlarını oluşturan bazı düzenlilik koşullarında (örneğin çok sayıda kapalı ve iç içe yörüngenin varlığı gibi) aranmaktadır. Bu sebeple kaos, şu anda anlaşıldığı gibi gürültünün değil düzenli bir düzensizliğin teorisidir.

Dinamik sistemlerin oluşturduğu tanecik kümelerinin doğası, tanımlanması ve anlaşılması için en önemli çalışma ilk kez Johannas Kepler tarafından yapılmıştır. Kepler, 1610 yılında inorganik azoik yapıların örneği olarak simetrik yapılı ve altı köşeli kar kristallerinin yapılarını daha önceki çalışmalardan farklı bir açıdan incelemiştir[1].

Bu yapılar; fiziksel, kimyasal ve biyolojik ortamlarda farklı üretim şartları kullanılarak elde edilen numunelerin yüzeylerinde ya da ara yüzeylerde farklı morfolojik yapıda oluşabilmektedir[2-4]. Özellikle doğal mangan cevheri yüzeyinde mangan dendritleri, mangan ve demir bileşikleri jeolojik oluşum esnasından günümüze kadar bu yapıların doğal örneklerindedir[5-7]. Ayrıca hem elektrokimyasal elektrodpozisyon hem de

buhar depozisyonu yöntemi kullanılarak üretilen ferro manyetik filmlerin yüzey ve ara yüzeylerinde gözlenmektedir. Bir elektrot üzerinde büyüyen metal elektrodepozitleri (Cu, Ag, Zn, Al, Ag, Au), çözelti konsantrasyonuna ve uygulanan elektriksel potansiyele göre pek çok elektrokimyasal hücrede (örneğin Petri kabı) farklı morfolojik yapılar geliştirilmektedir[8, 9].

Tabiatta kendiliğinden desen oluşumunun en güzel ve tanımlanan örnekleri, biyolojik ve kimyasal sistemler dışında, kar kristallerinin büyümesinde gözlemlenir. Kar kristalleri bunların en yaygın örneğidir. Su molekülü polar özelliklidir. Su buharı içerisinde farklı maddelerde gökyüzünde bulut olarak bulunmaktadır. Katılaştıran sistemlerde, oluşum deseninin yapısı gerek bilim, gerek estetik gerekse teknoloji açısından önemlidir. Kendiliğinden düzene giren sistem olarak kar kristallerinin doğal oluşum aşamaları aşağıda özet olarak verilmektedir. Katılma bir merkezi çekirdek ile başlar ve atmosferin farklı bölgelerinden geçerek yeryüzüne düşer. Genel olarak karşılaştırılan altı dallı kristalin dalları makroskobik olarak birbirine benzer; dalların oluşumunu sağlayan bir iç düzenleyici olmayıp, sıcaklık, nem ve çok küçük tanecikler gibi dış şartlar sağlamaktadır. Büyümekte olan bir kar kristalinin şekli zamana bağlı olarak şöyle gelişir; önce 1-10 µm yarıçaplı bir buz kristali; buluttaki aşırı soğumuş bir su damlasının donması ile oluşmaktadır. Bu kristal kürecik (çekirdek) aşırı doymuş su buharını yüzeyinde tutup büyüyerek şu şekiller oluşabilir; düzlem, sütun, silindir, iğne ve dallanmış[1-4].

Kümeler morfolojik bakış açısı ile gerek kendini meydana getiren unsurlar, gerekse istatistiksel nicelikler açısından değişik gruplara ayrılabilir. Genel yaklaşım, inorganik azoik (cansız) sistemler ve non-azoik (canlı) sistemler olarak iki ana grupta incelenmektedir. Ancak farklı alt gruplara da ayrılarak küme morfolojilerine göre karşılaştırmalar yapılmaktadır. Bu amaç ile kümelerin oluşum mekanizmalarını belirlemek ve morfolojisini karakterize eden temel istatistiksel parametreleri incelemek için deneysel, teorik ve simülasyon çalışmaları yapılmaktadır[5].

Monte Carlo simülasyon yöntemi kullanılarak küme morfolojisini tanımlamak için farklı modeller geliştirilmiştir[10]. Bunlar; süzülme (percolation)[11-56], parçacık küme kümeleşmesi (particle-cluster aggregation) ve küme-küme kümeleşmesi (cluster-cluster aggregation)[12, 13]. Bunlardan parçacık-küme kümeleşmeleri genelde Eden Modelini temel almaktadır[12]. Kaplama oranı oldukça büyük yoğun yapıli kümelerdir. Kapalı örgülerde, merkezi çekirdek etrafında random veya doğrusal yörüngeli tanecikler onun komşu boş gözlerine gelerek yerleştirildiğinde küme üretilmektedir. Daha sonra, çekirdek etrafında salkımlı kümelerin temsillerini üretmek için yüzey gerilimi ihmal edilerek Difüzyonla Sınırlı Kümeleşme (Diffusion-Limited Aggregation (DLA)) modeli T. A. Witten ve L. M. Sender tarafından 1981 yılında kolloidal  $40 \text{ \AA}$  yarı çaplı tanecikli kümeleri tanımlamak ve oluşum mekanizmalarını tartışmak için önerilmiştir[13]. Daha sonraki çalışmalar ile bu modele, kimyasal reaksiyon dinamiklerini ve indirgenen geri dönüşümsüz katyonların davranışını temsil etmek üzere yapışma olasılığı[14], kümedeki dallanma[15], bir boyutlu yapıda parmaklanma yapısı ve morfolojik geçişler[16, 17], yüzey gerilimi[18], taneciklerin iyonik özellikleri[19], dış elektrik[20], manyetik etkileri[21-23], parçacık sürüklenmesi ve mobilitesi[24] de eklenerek geliştirilmiştir.

DLA modeli kümeleri analitik olarak tanımlamak oldukça zordur. Çünkü DLA modeli kümeleri spesifik koşullarda fraktal karakterli örüntü yapılar üretmektedir ve Laplace büyüme modelinin prototipi ki çok dallı ve alt saçaklı ağaca benzer yapıların oluşumuna neden olur. Bunlardan dolayı bilgisayarın ekran çözünürlüğü referans alınarak küme temsilleri üzerinde ölçekleme ile geometrik ve istatistiksel tanımlama için nümerik çözümler yapılmaktadır[11]. Simülasyonlarda radyal küme kütlesinin değişimi en genel ifade ile  $M \sim R_g^{-D}$  ilişkisi ile belirtilmektedir[10]. Burada  $R_g$  firdolanım (gyration) yarıçapı ve  $D_f$  fraktal boyut değeridir. Yapılan çalışmalarda iki boyut için  $D_f \sim 1,71$ , üç boyut için  $D_f \sim 2,5$  değerindedir[13, 14]. DLA modeli bilgisayar simülasyonu ile  $d=2$  den  $d=6$  boyutuna kadar kritik bir değişim olup olmadığını kontrol etmek için incelenmiştir[25].  $d=2$ , kare ve üçgen örgüler kullanılmaktadır.  $d=3$  için küp,  $d>2$  ise hiper kübik örgüde sanal çözümler

yapılmaktadır. Günümüzde bilgisayar teknolojisinin geliřimiyle birlikte  $10^3$  -  $10^{10}$  tanecikli küme temsilleri elde edilmektedir. Böylece kümeleřmeleri daha ayrıntılı incelemek ve özelliklerini berraklařtırmak mümkün hale gelmiřtir. Daha ayrıntılı çözümler için bilgisayar teknolojisinin geliřmesi gerekmektedir.

Monte Carlo Simülasyon tekniđi kullanılarak tanımlanan DLA modeli, reel numune yüzeyindeki dođal[1, 5, 6, 7, 8], kimyasal elektrodepozisyon sonucu oluřan yapıları[26, 27, 28], dielektrik boşalması, řimřeđin davranıřını[29] açıklayabilmektedir. Ayrıca, biyolojide ise bakteri, virüslerin farklı çevre řartlarında ve besin seviyesine bađlı olarak oluřturduđu kolonilerin büyüme hızını ve oluřturduđu yapıyı başarı ile tanımlamaktadır[30, 31]. Ayrıca, bu model ekoloji, řehir planlaması ve astronomide gezegen dađılımını tanımlamada kullanılmaktadır[33].

Genelde küme simülasyonları için farklı algoritmalar geliřtirilmektedir. Algoritmadaki deđiřim küme temsillerinde oluřan morfolojik geçiřler meydana getirmekte ve kümeyi tanımlayan geometrik ve istatistiksel niceliklerdeki deđiřimler ile tanımlanmaktadır.

Bu tez çalıřmasında, Monte Carlo simülasyon tekniđi kullanılarak temel DLA modeli algoritmasına iki farklı yaklařım kullanarak küme temsilleri üretilmektedir. Hazırlanan iki farklı algoritmanın birincisi genelleřtirilmiř DLA modeli olarak A modeli, taneciklerin bařlangıç ve yörünge davranıřları referans alınarak oluřturulan B modeli olarak tanımlanmaktadır. Böylece bu tez çalıřması ařađıda özetlenmektedir.

1. Genelleřtirilmiř DLA modeli algoritması hazırlanarak küme temsilleri üretilmektedir (A Modeli). Algoritmanın geçerliliđi için literatür deđerleri ile üretilen küme temsillerinin deđerleri karřılařtırılarak güvenirliliđi sađlanmaktadır.

2. Algoritmaya (A modeli) taneciklerin harekete bařlama konumu deđiřtirilerek (B modeli) küme temsilleri üretilmektedir.

3. Bunların statik final durumundaki küme temsilleri ölçekleme yöntemi kullanarak korelasyon yoğunluk fonksiyon üssü ve fraktal boyut değerleri hesaplanmaktadır. Ayrıca, kümelerdeki pasif bölgelerinin bağıl tanecik yoğunlukları ve kritik üs değerleri hesaplanarak, küme morfolojisine göre karşılaştırılmaktadır.

4. A ve B modeli ile üretilen küme temsilleri, doğal mangan detritleri ve Petri kabında deneysel üretilen çinko yapıları ile karşılaştırılmaktadır.



## 2. BÜYÜME TEORİ VE MODELLERİ

### 2.1 Serbest Sınır Modeli ve Ara Yüzey İçin Sınır Şartları

Aşırı soğumuş eriğin katılaşma esnasında, katılaşma hızı (yalnız sıvıda ısı yayılması göz önüne alınarak),

$$v_n = - \left( \frac{Dc_p}{L} \right) \nabla_n T \quad (2.1.1)$$

olarak verilir. Burada D ısı için (termal) yayılma sabiti,  $c_p$  sıvının öz ısı ve L ise katı-sıvı faz geçişinde erime ısıdır. Ara yüzey şeklini tahmin etmek ve hal değişim hızını hesaplamak için eriyiğin tümü için sıcaklığın süreç içerisinde bilinmesi gereklidir. Bu katılaşma (ya da genel olarak difüzyon) problemi için aşağıdaki difüzyon denkleminin,

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D \nabla^2 T \quad (2.2.2)$$

ara yüzeyden çok uzaklarda,  $T_\infty = T_m - \Delta$  sınır şartları ile çözülmesi gerekir. Bu denklemde  $T_m$  bir düz ara yüzeyin erime sıcaklığı,  $\Delta$  ise aşırı soğuma seviyesidir.

Genellikle;

$$\Delta = (T_m - T_\infty) \frac{C_P}{L} \quad (2.2.3)$$

denklemini ile boyutsuz bir aşırı soğuma seviyesi tanımlanır. Diğer sınır şartı  $T_{int}$  ara yüzey sıcaklığıdır. Mikroskobik etkiler ihmal edildiğinde ara yüzey sıcaklığı  $T_{int}$  basitçe  $T_m$ 'ye eşitlenebilir.

Aşırı soğumuş eriyin katılaşmasında düzen parametresi korunmaz, çünkü ısı korunmamaktadır. Ara yüzey desen oluşumunun diğer bir örneği aşırı doymuş çözeltilerin katılaşmasıdır. Burada yayılan madde olduğundan düzen parametresi korunur. Bu model yukarıdakinin benzeridir; sadece  $T$ 'nin yerine konsantrasyon  $c$ 'nin yerleştirilmesi yeterlidir. Böylece konsantrasyon için yayılma denklemini

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \nabla^2 c \quad (2.2.4)$$

olur [59-66]. Bu denklemde  $D$  madde için yayılma sabitidir. Ara yüzeyden uzaklarda  $c = c_\infty$  ara yüzeyde  $c_{int} = c_{eq}$  dir. Boyutsuz aşırı doyma seviyesi de

$$\Delta = \frac{c_\infty - c_{int}}{c_s - c_{eq}} \quad (2.2.5)$$

olarak tanımlanır. (2.1.5) denkleminde;  $c_s$  katı konsantrasyonu ve  $c_{eq}$  sıvı-katı bir arada bulunma konsantrasyonudur. Hıza bağlılık denklem (2.1.1)'den farklı olarak aşağıdaki gibidir.

$$(c_s - c_{int}) v_n = D \nabla_n c \quad (2.2.6)$$

Bu denklem ara yüzeyde maddenin korunduğunu göstermektedir.

### 2.1.1 Eriyiğin Katılaşmasında Yüzey Gerilimi ve Yüzey Kinetiği

Ara yüzeydeki sınır şartlarını şu iki mikroskobik etki belirler: Yüzey gerilimi ve ara yüzey kinetiği. Bu etkileri göstermek için bir düz bir ara yüzey düşünelim. Bu ara yüzeyi oluşturan iki faz da  $T_M$  erime sıcaklığında dengede bulunsun. Ara yüzeyi bükme için enerji gerekir (yüzey enerjisi). Bu enerji yüzey alanındaki artışla orantılı olup, orantı sabiti yüzey gerilimi  $\gamma$  dır. Yüzey gerilimi, ara yüzeyi tekrar eski haline (düzlem) getirme eğilimindedir.

Maddenin iki halini (faz) ayıran bir ara yüzey varsa, bu ara yüzeyde yüzey gerilimi de bulunmak zorundadır.

R yarıçaplı bir katı küre eriyik ile erime sıcaklığından daha düşük sıcaklıkta  $T_{eq}$  dengededir. Buna göre şu eşitlik yazılabilir:

$$T_{eq} = T_M \left( -\frac{d_0}{R} \right) \quad (2.1.1.1)$$

Kılcal damar uzunluğu,

$$d_o = \left[ \frac{c_p \gamma T_M}{L^2 \rho} \right] \quad (2.1.1.2)$$

yüzey gerilimi ile orantılıdır. Burada  $\rho$  yoğunluktur.  $d_o$  nanometre mertebesinde bir değere sahiptir.

Herhangi bir şekle sahip bir ara yüzey için sıcaklık,

$$T_{int} = T_{eq} = T_M (1 - d_o \kappa) \quad (2.1.1.3.)$$

dir.

Burada  $\kappa$  bir boyutlu ara yüzeyin yerel eğriliğidir (1(yerel yarıçap)). Yukarıdaki denklemler yerel dengely ifade etmektedir ve ara yüzey için Gibbs Thomson bağıntıları diye bilinirler. Sıcaklığın her noktada eriyik ile dengede bulunan  $R = \frac{1}{\kappa}$  yarıçaplı bir katınıki ile aynı olduđu varsayılmaktadır. Buna göre, ara yüzeyin eğriliği noktadan noktaya değıştikçe sıcaklıkta değışir.

Eğriliği büyük olan noktalar daha soğuk olur, ısı bu noktalara doğru akar, sıcaklığı yükseltir ve ara yüzeyi düzleştirir. Yüzey geriliminin yayılıma kararsızlıklarına karşı davranışı ve yayılma cephesini tekrar düzleştirmeye çabalaması böyle olmaktadır.

Ara yüzey sıcaklığı (2.1.1.3) denklemi ile belirleniyorsa, iki faz dengededir. Bu makroskobik olarak eriğın serbest enerjisinin  $F_{eriyik}$ , katının serbest enerjisi  $F_{katı}$  ile aynı olduđu anlamına gelir. Mikroskobik olarak ise sıvıdan katıya atomların (ya da moleküllerin) soğurulma hızının, katıdan

sıvıya geri verilme hızı ile aynı olduğu anlamına gelir. Bundan dolayı ara yüzey ilerlemez. Ara yüzeyin ilerlemesi için katının serbest enerjisinin (ara yüzeyde) sıvınınkinden daha küçük olması zorunludur. Bunu garantilemek için ara yüzey sıcaklığının denge sıcaklığından aşağıda tutulması gerekir. Genel olarak serbest enerjideki fark, incelenmekte olan özel sisteme bağlı olmak üzere sıcaklığın bir fonksiyonudur. Benzer şekilde bir sıvının bir katıya dönüşme hızı da serbest enerjilerindeki farkın bir fonksiyonudur. Bu aşamada bu türden düzeltmelerin nitel (kalitatif) etkisi ile ilgilenilecek ve serbest enerjiler arasındaki farka bağımlılığın doğrusal olduğu en basit durum incelenecektir.

$$\text{Faz geçiş hızı} \propto F_{\text{eriyik}} - F_{\text{katı}} \quad (2.1.1.4)$$

Ara yüzeyin ise  $v_n$  hızı faz geçiş hızı ile orantılıdır.  $T_{\text{eq}}$  ve  $T_{\text{int}}$  için verilen (2.3.2.3) denklemi ile birlikte yüzey sıcaklığı için sınır şartları;

$$T_{\text{int}} = T_M (1 - d_o \kappa - \beta_o v_n) \quad (2.1.1.5)$$

olur. Bu denklem şu iki mikroskobik etkiyi göstermektedir: Atomlar arası bağlanmanın mikroskobik etkisini gösteren denge halindeki yüzey gerilimi, ara yüzeyde faz geçiş kinetiği ile ilgili mikroskobik etkiyi yansıtan denge dışı terim veya yüzey kinetiği terimi.

Yüzey kinetiğinin kararlı hale getirme etkisi yüzey gerilimininkinden farklıdır. Yüzey kinetiğinin kararlı hale getirme etkisi ara yüzeyin hızlı hareket eden kısımlarının soğumasına ve yavaşlamasına sebep olur. Yüzey gerilimlerinin kararlı hale getirme etkisi ise ara yüzeyin eğri kısımlarının yavaşlamasına sebep olur.

## 2.1.2 Aşırı Doymuş Çözeltinin Katılaşmasında Yüzey Gerilimi ve Yüzey Kinetiği

Bu durumda ara yüzeydeki  $c_{int}$  konsantrasyon için sınır şartları;

$$C_{int} = c_{eq} (1 + d_o \kappa + \beta_o v_n) \quad (2.1.2.1)$$

olur. Düz olmayan bir ara yüzey yakınında konsantrasyon değerine yapılacak denge hal düzeltmeleri, isotropik yüzey gerilimi göz önüne alınarak, şöyle elde edilir: İki fazdan ibaret olan bir sistem için denge şartları temel termodinamikten yararlanarak tekrar oluşturulabilir. Bu iki fazdan birisi kimyasal potansiyeli  $\mu_s$  olan katı, diğeri de kimyasal potansiyeli  $\mu_l$  olan sıvıdır. Sistemin izotermal olduğu kabul edilmekte ve sıvı tarafından çevrelenmiş bir katı küre göz önüne alınmaktadır. Denge şartı;

$$(\mu_s - \mu_l) dN + \gamma d\sigma = 0 \quad (2.1.2.2)$$

dir. Bu denklemde  $d\sigma$  yüzey alanındaki (iki boyutlu uzaydaki sistemler için uzunluk) değişimdir.  $(\mu_s - \mu_l)dN$  terimi “bulk” enerjisindeki değişim,  $\gamma d\sigma$  ise enerji değişimine ara yüzeyin katkısıdır. Aşağıda sadece iki boyutlu uzayda “isotropik” sistemler incelenecektir. Sıvı tarafından kuşatılmış daire şeklinde ( $r$  yarıçaplı) bir katı faz bölgesi göz önüne alalım. Bu durumda tanecik sayısı ve ara yüzey uzunluğundaki son derece küçük değişimler;

$$dN = dV_p = 2\pi r dr \quad (2.1.2.3)$$

$$d\sigma = 2\pi dr \quad (2.1.2.4)$$

denklemleri ile verilirler. Burada  $\rho$  katı fazda birim alana düşen mikroskobik tanecik sayısıdır. Bu bağıntılar kullanılarak denklem (2.1.2.1) aşağıdaki şekline dönüşür;

$$\mu_\ell = \mu_s + \frac{\gamma\kappa}{\rho} \quad (2.1.2.5)$$

Bu şartı ideal çözelti yaklaşımını ( $\mu_\ell = kT \cdot \ln \rho$ ) kullanarak yayılma denklemleri için sınır şartlarına dönüşmekle;

$$c_{int} = e^{\mu_s + \gamma\kappa\rho^{-1} / kBT} = c_{eq} e^{\gamma\kappa / kBT\rho} \quad (2.1.2.6)$$

ifadesi elde edilir. Eğer  $\gamma\kappa / kBT\rho \ll 1$  yaklaşımı da yapılırsa konsantrasyona göre gelecek düzeltmeler;

$$c_{int} = c_{eq} (1 + d_0\kappa) \quad (2.1.2.7)$$

şeklinde yazılabilir. Burada  $d_0$  kılcal damar (boru) uzunluğu olup şöyle tanımlanır;

$$d_0 = \frac{\gamma}{k_B T \cdot \rho} \quad (2.1.2.8)$$

Lineer (doğrusal) hız düzeltmesi boyut bakımından ele alınırsa  $\beta_0 \sim (a_0\omega)^{-1}$  bulunur. Burada  $\omega_0$  erime ve katılaşma için bir karakteristik frekans,  $a_0$  ise bir karakteristik uzunluktur (mesela, çekirdek büyüklüğü ya da

kılcal damar (boru) uzunluğu). Aktivasyon hız yaklaşımı kullanılarak fonksiyon yapısının daha detaylı (ayrıntılı) biçimde ele alınması aşağıdaki sonuca götürür. Büyüme hızı katılaşma ve erime hızları arasındaki farkın, olay sırasında kazanılan a mesafesi ile çarpımı olarak ifade edilebilir.

$$v = a\omega_0 \left[ \left( 1 + e^{\frac{-\Delta S}{k_B}} \right)^{-1} - \left( 1 + e^{\frac{+\Delta S}{k_B}} \right)^{-1} \right] \quad (2.1.2.9)$$

Ancak;

$$\Delta S = \frac{(\mu_s - \mu_l)\Delta N + \gamma d\sigma}{T} \quad (2.1.2.10)$$

$$\nabla N = \rho a^2 \quad (2.1.2.11)$$

dir. Böylece denklem (2.1.2.1) elde edilir ve

$$\beta_0 = \frac{2}{a\omega_0} \quad (2.1.2.12)$$

bağıntısı bulunur.



### 2.1.3 Kristalleşmede Anizotropi

Anizotropi desen oluşumunda temel rol oynar. Anizotropi fiziki olayların uzayda belirli yönleri diğer yönlere tercih etmesinin sebebidir. En basit örnek kristal yapıya sahip bir katı örgüsüdür. Hem yüzey gerilimi hem de yüzey kinetiği örgüye göre yönelime bağlıdır. Ara yüzey atomları arasındaki ortalama bağlanma, ara yüzeyin yönelimine göre değişir. Böylece, farklı yönlerdeki ara yüzeyleri bükme için farklı miktarlarda enerjiye gerek vardır. Matematiksel olarak bu,  $d_0$ 'ın  $\theta$  ile değiştiği anlamına gelir. ( $\theta$ , uzaydaki sabit bir yön ile ara yüzeye dik (normal) yön arasındaki açıdır).  $d_0$ 'ın  $\theta$ 'ya nasıl bağlı olduğu ( $\theta$  ile nasıl değiştiği) incelenen özel sisteme bağlı bir özelliktir. Burada anlatımı basitleştirmek için iki boyutlu uzayda aşağıdaki fonksiyon kullanılacaktır:

$$d_\theta \rightarrow d_0 (1 - d_1 \cos m\theta) \quad (2.1.3.1)$$

Burada  $d_1$ , m-katlı anizotropinin büyüklüğüdür. Yüzey kinetiği de  $\theta$  açısının bir fonksiyonudur; bir atom, yüzeyin yönelimine bağlı olarak ara yüzeye farklı hızlara bağlanır. Bu da  $\beta_0$ 'ın  $\theta$ 'ya  $d_0$  gibi bağlı olması sonucunu verir:

$$\beta_\theta \rightarrow \beta_0 (1 - \beta_1 \cos m\theta) \quad (2.1.3.2)$$

## 2.2 Kümeyi Temel Birimlerinden Büyütme Modeli

### (“Atomistic” Model)

Bu model, kümeyi temel birimlerinden (atom, molekül, tanecik) oluşturmayı sağlayan basit kurallardan oluşur. “Cellular automaton” lar bu amaç için en uygun modellerdir. Bu tür (“atomistic”) modellerden bir diğeri Eden modeli olup, küme şu kurala göre büyür: kümeleşmenin bir adımında kümenin çevresine ait rastgele bir hücre seçilerek doldurulur; bu işlemin tekrarlanması ile küme büyür. Yapı birimlerinin eklenmesi ile büyüme modellerinden en yaygın biçimde kullanılanı difüzyonla sınırlı kümeleşme (DLA) modelidir; büyüme kuralı şöyledir: Kümeleşmenin bir anında kümeden çok uzaktan (küme merkezli bir küre yüzeyi) bir tanecik rastgele yürümeye başlar. Küme çevresinin bir boş gözüne ulaşırsa oraya yerleşir. Küme dışına çıkarsa ihmal edilerek yeni bir tanecik rastgele yürümeye başlar. Bu işlemin tekrarlanması ile küme büyür.

## 2.3 Yayılma – Faz Geçiş Modeli

Bu model aşırı doymuş bir çözeltinin katılaşmasını incelemek üzere geliştirilmiş, “atomistik” ve sürekli ortam yaklaşımlarının birlikte kullanıldığı karma (melez, hibrit) bir modeldir. İdeal bir çözelti göz önüne alalım. Bu çözeltinin kimyasal potansiyeli

$$\mu_\ell = k_B T \ln c \quad (2.3.1)$$

bağıntısı ile verilmektedir.  $c$  konsantrasyon alanının zaman ile değişimi;

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\nabla^2 c \quad (2.3.2)$$

bağıntısını sağlamakta olup, D madde için yayılma sabitidir.  $\Delta$ , boyutsuz aşırı doyum seviyesi;

$$\Delta = \frac{c_{\infty} - c_{eq}}{1 - c_{eq}} \quad (2.3.3)$$

eşitliği ile tanımlanmaktadır. Burada  $c_{\infty}$  sınırlardaki konsantrasyon,  $c_{eq}$  ise düz bir ara yüzeyin sıvı-katı denge konsantrasyonu olup

$$c_{eq} = e^{-\frac{\mu_s}{T}} \quad (2.3.4)$$

denklemini ile ifade edilmektedir;  $\mu_s$  katının kimyasal potansiyelidir.

Modeldeki dinamiğin ikinci kısmı, ara yüzeydeki faz geçişidir. Faz geçiş işlemini tek başına hücrelerin erime ve katılaşması şeklinde yerel işlemlere ayırabiliriz. Yalnız katıya komşu olan sıvı hücreleri katılaşabilir ve katının yalnız çevre hücreleri eriyebilir.

Faz geçişi ve yayılma işlemleri kare örgü üzerinde peş peşe uygulanır. Önce karakteristik yayılma zamanına ( $(\text{örgü sabiti})^2 / D$ ) ve faz geçiş zamanına (aşağıda tartışılacaktır) kıyasla küçük bir  $\Delta t$  zaman aralığında (süresinde) difüzyon (yayılma) denklemini çözülecektir. Bu basamakta düzen parametresinin korunumunu garantilemek için sıfır türevli sınır şartları

kullanılmaktadır. Sonraki adımda, aşağıda tartışılan ihtimallere uygun olarak ara yüzeydeki erime ve katılma işlemleri yerine getirilecektir. Faz geçişi sırasında ara yüzeydeki çevre gözlerdeki konsantrasyon değişir. Sonra yeni bir yayılma ve faz geçiş çevrimi başlatılarak çevrimler tekrarlanır.

Bir hücrenin faz geçiş hızı yerel dengenin var olduğu farz edilerek hesaplanmaktadır. Bu durumda sistemin bir mikroskobik durumunun entropisinin

$$S(s^1) = -k_B \ln p_{s^1} \quad (2.3.5)$$

olduğu bilinmektedir. Burada  $P_{s^1}$ ,  $s^1$  mikroskobik durumunda bulunma olasılığıdır. Mikroskobik durumlar arasındaki geçiş hızları

$$\omega_M = \text{erime hızı} = \omega_0 p(\Delta S_M) \quad (2.3.6)$$

$$\omega_s = \text{katılma hızı} = \omega_0 p(\Delta S_s) \quad (2.3.7)$$

denklemleri ile ifade edilmektedir. Burada,

$$\frac{p(\Delta S_M)}{p(\Delta S_s)} = e^{\frac{-(\Delta S_M - \Delta S_s)}{k_B}} \quad (2.3.8)$$

ve  $\omega_0$  faz geçişinin karakteristik hızıdır.

Erime işlemi ve katılma işlemi esnasında entropi değişimi,

$$\Delta S = \frac{\Delta E}{T} = \frac{\mu_{s1} - \mu_{\ell}}{T} \Delta N \quad (2.3.9)$$

burada  $\mu_s$ ,  $a^2$  büyüklüğünde tek bir katı hücrenin kimyasal potansiyelidir. Katılma esnasında, yeni katı hücre  $c=1$  ve  $\Delta N=1$  değerlerine sahiptir. Erime esnasında, yeni sıvı hücresindeki konsantrasyonun 1 değerinde kalması gerekir. Fakat erime ve katılma işlemleri arasındaki simetriden dolayı konsantrasyon hücrenin en yakın komşuları ve hücrenin kendisi üzerine dağıtılır. Enerjideki farka tek katkı ara yüzey enerjisinden gelir. Bu ara yüzey enerjisi, bir sıvı ve bir katı hücre arasındaki her bir sınırın  $E_B$  (bağ enerjisi) kadar enerji katkısı yapacağı farz edilerek hesaplanır. Bu model kare hücreli yapısından dolayı yüzey enerjisinde anizotropiye sahiptir. Örneğin makroskobik birim uzunluk başına yüzey enerjisi (1,1) yönünde (1,0) yönündeki enerjiden  $2^{0.5}$  daha büyüktür. Böyle bir yüzey enerjisi Ising modelinde de bilinmektedir.

$$J_{\text{ising}} = 2E_B \quad (2.3.10)$$

Bir tek hücrenin faz geçişi esnasında entropi değişiminin (denklem 2.3.9) hesaplanmasında sıvıdaki konsantrasyon gradyentleri (değişme eğilimleri) ve ara yüzey entropisi ihmal edilmektedir.

Modelin tamamlanması için (2.3.8) denklemindeki olasılık fonksiyonunun belirlenmesi gerekir. Bu fonksiyon temel bağıntılara dayanarak türetilemez. Doğal olarak seçilebilecek bir fonksiyon

$$P = (1 + e^{\frac{\Delta s}{k_B}})^{-1} \quad (2.3.11)$$

şeklinde olabilir. Modelin parametrelerini sürekli ortam modeli ile şöyle ilişkilendirebiliriz.

$$c_{int} = c_{eq} (1 + d_o \kappa + \beta_o v_n) \quad (2.3.12)$$

Ortalama kılcak damar (boru) uzunluğu

$$d_o = \frac{\gamma}{k_B T \rho} = \frac{E_B}{k_B T \rho a} \quad (2.3.13)$$

dır.

Burada  $\gamma$  yüzey enerjisi,  $\rho$  katı fazda birim alan başına mikroskobik tanecik sayısı ve  $a$  hücrenin büyüklüğüdür.  $d_o$ 'ın anizotropisi, Ising ferro mıknatısının denge yüzey gerilimi için anizotropisinin geçerli olduğu kabul edilerek hesaplanabilir. Kinetik katsayı için, denklem (2.3.11)'deki geçiş fonksiyonlarının geçerli olduğu varsayılarak

$$\beta_o = \frac{2}{a \omega_o} \quad (2.3.14)$$

sonucu elde edilir.

## 2.4 Faz – Alan Modeli

Kararlı bir halin (katı) az kararlı bir hale (aşırı soğumuş eriyik) ilerlemesini incelemek için dengeye ulaşmamış bir hali (gelişmekte olan bir hali) kapsayan ifadelere gerek vardır. Bu ifadeleri Ginzburg – Landau teorisi

sağlamaktadır. Bu yaklaşıma göre bir düzen parametresinin (faz)  $\emptyset$  fonksiyonu olan bir serbest enerji denge durumundan sapmaları kontrol eder. Düzen parametresi konum ve zamanın, sürekli değerler alan bir fonksiyonu olup sistemin, dengeden ayrıldığında, halini tanımlar. Ancak, teori doğal olayların gözlemine dayandığından dolayı düzen parametresinin kesin bir tanımı yoktur. Mikroskobik tanımlamaya dayanan kesin bir üretimde yoktur. Düzen parametresinin bir tanımı şöyledir: Fazların birinde sıfırdan farklı değerler, diğerinde sıfır değeri alan bir niceliktir. Belirli bir sistemi tanımlamak için düzen parametresinin seçimi serbesttir. Aşırı soğumuş eriyikten katılaşma örneğini göz önüne alalım. Erime sıcaklığı civarında serbest enerjinin iki kolu vardır: birisi katı faz, diğeri sıvı faz. Her biri serbest enerjinin bir yerel minimumuna karşılıktır. Erime sıcaklığının altında katı faza ait kolun serbest enerjisi en aşağıdadır. Sıvı-katı faz geçişini tanımlamak için fazlardan bir parametre (düzen parametresi) ve serbest enerjilerin de düzen parametresinin bir fonksiyonu haline getirilmesi gerekir. Erime noktasında her iki faz (T, P,  $\mu$ ) yoğun parametreleri bakımından aynı, fakat yaygın özellikler (özhacim, özentropi) bakımından farklıdırlar. Bundan dolayı, öz hacim ve özentropi düzen parametresi olarak seçilebilirler. Eğer basıncın hemen hemen düzgün olduğu, sıcaklığın ise değiştiği (konumla ve zamanla) bir durum ile ilgileniliyorsa, tabii olan, öz entropiyi düzen parametresi olarak seçmektir. Kolaylık olsun diye,  $\emptyset$  çoğunlukla katı için +1, sıvı için -1 seçilir. (T= T<sub>M</sub> de). Bu iki fazın birbirine göre kararlılığı sıcaklığa bağlı olarak değişir. Serbest enerji çoğu kere iki kısımdan oluşur: bir potansiyel enerji F( $\emptyset$ , T), bir de çiftlenim enerjisi  $\frac{1}{2} \xi^2 |\vec{\nabla} \emptyset|^2$ , bu durumda serbest enerji,

$$F[\emptyset] = W \int d\vec{x} [F(\emptyset, T) + \frac{1}{2} \xi^2 |\vec{\nabla} \emptyset(\vec{x}, t)|^2] \quad (2.4.1)$$

şeklinde ifade edilir. İntegral hacim üzerinden alınmaktadır.  $\xi$ , faz değişimlerinin karakteristik uzunluğu, W'de bir karakteristik enerji

yoğunluğudur.  $F(\Phi, T)$ ,  $\Phi$ 'ye göre çoğu kere  $T = T_M$ 'de çift kuyulu simetrik bir fonksiyondur.  $T \neq T_M$ 'de  $\lambda c_p (T - T_M) / L$  terimi ilave edilir. Bu terim katıyı  $T < T_M$ 'de daha kararlı yapacak şekilde potansiyeli etkiler.

$\Phi$ 'nin zamana bağımlılığını inceleyebilmek için dinamiğinin belirlenmesi gerekir. Genellikle, makroskobik sistemin dengeye doğru aşırı sönümlü bir hareket yaptığı kabul edilir. Yani, serbest enerji zamana göre, azalma hızı değişmeden azalır. Bu şartı sağlayan basit bir denklem Ginzburg-Landau denklemi (faz denklemi) dir:

$$\tau \frac{\partial \Phi}{\partial t} = - \frac{\delta(F[\Phi]/W)}{\delta K \Phi(\vec{x})} \quad (2.4.2)$$

veya  $f = \frac{-\partial(F/W)}{\partial \Phi}$  olmak üzere

$$\tau \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \xi^2 \nabla^2 \Phi + f(\Phi, T) \quad (2.4.3)$$

$\tau$ , düzen parametresinin karakteristik durulma zamanı olup, mikroskobik dinamiğin zaman ölçeğini yansıtmaktadır. Dalgalanma – sönümlenme ilkesi kabul edilmedikçe,  $\tau$  serbest enerjiden türetilmemektedir. Faz denkleminde sıcaklığın kontrol edildiği kabul edilmektedir. Katılaşma sırasında erime ısıyı açığa çıkar ve fazla ısı ara yüzeyden uzaklaşarak yayılır. İkinci bir denklem (alan ya da difüzyon denklemi) ısının korunumundan yararlanarak yazılmaktadır. Bundan dolayı,  $\Phi$ 'deki değişme difüzyon denklemine bir kaynak terimi olarak girer:



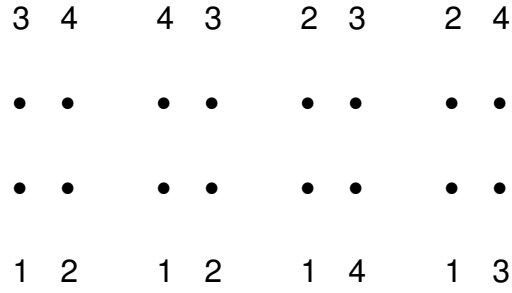
$$C_p \frac{\partial T}{\partial t} = c_p D \nabla^2 T - \frac{L}{2} \frac{\partial \Phi}{\partial t} \quad (2.4.4)$$

D, ısı için yayılma sabiti (genellikle,  $\Phi$ 'nin bir fonksiyonu olmalıdır),  $C_p$  sıvının öz ısısı, L de erime ısısıdır. Bir diğer parametre aşırı soğuma  $\Delta$  (eriyiğin,  $T_M$ 'nin altındaki ve ilerleyen katı – sıvı ara yüzeyinden uzaktaki sıcaklığı) olup, işlemdeki sürücü kuvvetin bir ölçüsüdür. (2.4.3) ve (2.4.4) denklemleri faz-alan katılaşma modelini tanımlamaktadır. Faz alan modeli ile serbest sınır modeli arasındaki ilişkiler ve bu ilişkilerin matematik dayanağı incelenmiş olup, faz-alan modelinin simülasyonları serbest sınır modelinin simülasyonları ile nitelik bakımından uyuşmaktadır.

### 3. TANECİK KÜMELEŞME MODELLERİ

#### 3.1 Temel Kümeleşme Modelleri

##### 3.1.1 Eden Modeli



**Şekil 3.1.1** Kare örgüde  $b = 2$  kenarlı bir hücre için, Eden modeline göre, 1 numaralı gözdeki bir çekirdekten başlayarak dört gözü dolu bir küme elde etmek için dört farklı yol

Şekil 3.1.1'den renormalizasyon dönüşümü için

$$K' = 4K^3 + 4K^4 \quad (3.1.1.1)$$

ifadesi elde edilir. Buradan fraktal boyut değeri için  $d_f = 1,72$ , hücre kenarı  $b = 3$  iken ise  $d_f = 1,73$  bulunur. Fraktal boyut en sonunda varacağı değere çok yavaş yakınsamaktadır, bundan dolayı daha büyük kenarlı hücrelerle  $d_f$ 'nin yakınsama tarzının incelenmesi gereklidir.

### 3.1.2 Difüzyonla Sınırlı Tanecik Kümeleşme Modeli

#### 3.1.2.1 Kararlılık Analizi

Difüzyonla sınırlı kümeleşmede, büyüme sırasında ortaya çıkan simetriyi meydana getirmek için difüzyon gereklidir. Bunu görebilmek için, Eden'in büyüyen yaratıkları (hayvanları) da denilen [16] benzer, ancak difüzyonsuz büyüme modelini göz önüne alacağız. Bu modelde küme çevresine ait her göz her adımda aynı ihtimalle büyür. Kümeler uzayın bir parçasını tamamen doldurur, yani kümenin fraktal boyutu (df) uzay boyutuna (d) eşittir. DLA kümelerindeki çok dallılık Eden kümelerinde ortaya çıkmaz. DLA kümelerinde en dışarıdaki uçlar içeridekilerden çok daha çabuk büyür, çünkü rastgele yürüyen tanecikler içeriye ulaşmadan yakalanırlar. DLA kümeleri gibi karmaşık yapıların nereden kaynaklandığını ayrıntılı biçimde göstermek için elektrostatik benzerlikten faydalanılabilir. En sonunda kümeye dahil olan bir rastgele yürüyüş göz önüne alalım. Yürüyüşün  $\vec{x}$  konumundaki göze k'inci adımda ulaşma ihtimali  $u(\vec{x}, k)$  olsun. Herhangi bir rastgele yürüyüşte olduğu gibi  $u(\vec{x}, k)$  şu bağıntıyı sağlar:

$$u(\vec{x}, k+1) = \frac{1}{c} \sum_{\vec{l}} u(\vec{x} + \vec{l}, k) \quad (3.1.2.1.1)$$

Burada  $\vec{l}$ ,  $\vec{x}$ 'in c tane komşusu üzerinden toplamı göstermektedir. Yukarıdaki eşitlik sürekli ortamlar için difüzyon denkleminin, değişken değerlerinin kesikli olduğu halidir.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \eta \nabla^2 u \quad (3.1.2.1.2)$$

$\eta$  difüzyon sabitidir. Çevre hücrelerine uğrayan yürüyüşler orada son bulduklarından bu hücreler ve küme hücreleri için, (3.1.2.1.1) eşitliğinin sağ tarafında  $u=0$  alınmalıdır. Çevreye ait bir gözün  $(k+1)$  inci adımda bir tanecik alma ihtimali, (3.1.2.1.1) eşitliğindeki gibidir:

$$u(\vec{x}, k+1) = \frac{1}{c} \sum_{\vec{l}} u(\vec{x} + \vec{l}, k) \quad (3.1.2.1.3)$$

Dik birim vektörü  $\hat{n}$  olan düzgün bir yüzey için  $\hat{n}$  yönündeki büyüme hızı  $V_n$  aşağıdaki şekilde ifade edilebilir:

$$V_n = \eta \hat{n} \cdot \vec{\nabla} u|_s \quad (3.1.2.1.4)$$

(3.1.2.1.2) ve (3.1.2.1.4) eşitlikleri büyüme çalışmalarında yaygın biçimde kullanılan ifadelerdir [57,58].  $u$  için bir diğer sınır şartı şudur: Difüzyonla sınırlı kümeleşmede  $u$  alanı kümeden uzaklarda, yüzeye kararlı bir akı sağlar. Şimdi  $u$ 'nun zamana nasıl bağlı olduğuna bakalım: Çok uzaktan gelen kararlı bir akı için tek zamana bağımlılık kaynağı (3.1.2.1.4)'deki sınır şartı olup, kümenin büyümesi yolu ile ortaya çıkmaktadır. Simülasyonlarda

büyüme yeterince yavaş olduğundan (3.1.2.1.4)'deki  $\frac{\partial u}{\partial t}$  ihmal edilebilir. Bu durumda çözülmesi gereken,  $u = 0$  olan bir sınır (bir "iletken" yüzey) var iken  $u$  için Laplace denklemdir. Yüzeydeki bir bölgenin büyüme hızı  $V_n$  oradaki  $\vec{\nabla} u$  "elektrik alanı" ile orantılıdır.

Elektrik alanı bir iletkenin sivri noktaları civarında daha büyük olduğundan, bu noktalarda kararsız büyüme meydana gelir; gerçekten de

DLA kümelerinin yapısı, elektrik boşalmalarından kaynaklanan yapılara (desenlere) (şimşek, yıldırım gibi) benzemektedir. İki boyutlu uzay için kararlılık analizi [57,58] aşağıda yapılmaktadır: Yarıçapı

$$r = R + \delta_m \cos (m\theta) \quad (3.1.2.1.5)$$

olan bir disk düşünelim. Burada  $\delta_m$  küçüktür.  $u$ , diskin dışında Laplace denkleminin bir çözümüdür:

$$U=A\ln(r) + B+C_m \cos ((m\theta) / r^m) \quad (3.1.2.1.6)$$

Eşitlik (3.1.2.1.4) ve  $u(r) = 0$  kullanılarak aşağıdaki ifadeler elde edilebilir:

$$\frac{dR}{dt} = \frac{A}{R} \quad (3.1.2.1.7)$$

$$\frac{d\delta_m}{dt} = (m-1) \delta_m \frac{A}{R^2} \quad (3.1.2.1.8)$$

$$\left( \frac{\dot{\delta}}{\delta} \right) / \left( \frac{\dot{R}}{R} \right) = (m-1) \quad (3.1.2.1.9)$$

$\dot{\delta}$  ve  $\dot{R}$ ,  $\delta$  ve  $R$ 'nin zamana göre türevleridir. Yukarıdaki ifadeye (3.1.2.1.9) göre, diskin çevresindeki bütün şekil bozuklukları (çember şeklinden farklılaşmalar)  $m > 1$  için kararsız büyürler,  $m > 2$  için de yarıçapın kendinden daha hızlı büyürler. Böylece küçük miktarlardaki etkiler bile düzgün bir

yüzeyde geriye dönüşsüz değişiklikler meydana getirir. Üç ve daha yüksek boyutlu uzaylarda da benzer durum geçerlidir.

### 3.1.2.2 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 örgülerdeki ve örgüsüz simülasyonlarda fraktal boyut ( $D_f$ ) için aynı değer hesaplanmasından anlaşılmaktadır[76]. Evrenselliğin bir ikinci yanı, dallanarak büyümenin incelenme tarzı [2,4,5,6,57,58] ile karşılaştırılarak aşağıda incelenmektedir: (3.1.2.1.2) ve (3.1.2.1.4) bu kaynaktakilerle aynıdır, fakat  $u|_s = 0$  sınır şartı, yüzey geriliminin sıfır olduğu durum hariç, aynı değildir. Gerçek bir dallanarak büyüyen kümenin büyüme ucunun (tomurcuk) yarıçapını, Gibbs – Thomson sınır şartındaki

$$u|_s = \Gamma K \quad (3.1.2.2.1)$$

kılcal damar (boru) uzunluğu  $\Gamma$  belirler;  $K$ , yüzeyin yerel eğriliğidir. DLA da rastgele 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, rastgele yürüyen taneciğin kümeye yapışma ihtimalinin  $s \leq 1$  olduğu kabul edilmektedir; bu difüzyon denkleminde bir uzunluk parametresi getirmektedir. Bu parametrenin

DLA da nasıl bir deęişiklik yaptığını anlamak için bir (2) boyutlu uzayda aşığıdaki analiz yapılmaktadır:

$$u(l, k+1) = (1-s) u(\theta, k) + \frac{1}{2} u(2l, k) \quad (3.1.2.2.2)$$

$$u(\theta, k+1) = \frac{1}{2} u(l, k) \quad (3.1.2.2.3)$$

Bu ifadelerdeki  $\theta$  küme çevresine ait bir gözü,  $l$  ve  $2l$  de boş uzayı belirtmektedir. Kararlı hal söz konusu ise  $k$  ya bağımlılıęı kaldırarak denklem (3.1.2.2.4) ve (3.1.2.2.5) eşitliklerinden,

$$s u(l) = u(2l) - u(l) \quad (3.1.2.2.4)$$

bulunur. Sürekli ortamlar için de

$$s u \Big|_s = \ell \hat{n} \cdot \vec{\nabla} u \Big|_s \quad (3.1.2.2.5)$$

elde edilir.  $u$ 'nun logaritmik türevinin yüzeydeki deęeri yeni bir uzunluk ölçeęi verir:

$$\lambda = \frac{\ell}{s} \quad (3.1.2.2.6)$$

Bu uzunluk ölçeęi istenildięi gibi ayarlanabilir.  $\lambda$ , alışagelmış incelemelerdeki kılcal damar (boru) uzunluęu görevini üstlenmektedir. Daha önce

elektrostatik ile yapılmış olan benzerlikten yararlanarak (3.1.2.2.5) eşitliği yeniden yorumlanabilir. Bir küre yüzeyi düşünelim;  $\lambda \ll R$  ise,

$\vec{\nabla} U|_s \approx U_\infty / R$  olur, ve  $\lambda$  için birinci mertebeden

$$u|_s = u_\infty \lambda / R \quad (3.1.2.2.7)$$

yazılabilir; bu da (3.1.2.2.1) eşitliğindeki şart ile aynı yapıdadır. (3.1.2.2.5) eşitliğinin ne ifade ettiğini ortaya koymak için, yukarıdaki yeni sınır şartı kullanılarak kararlılık analizi yeniden yapılırsa iki boyutlu uzayda şu ifadeler elde edilir:

$$\frac{d\delta_m}{dt} = \frac{(m-1)\delta_m A}{R(R+m\lambda)} \quad (3.1.2.2.8)$$

$$\left( \frac{\dot{\delta}}{\delta} \right) / \left( \frac{\dot{R}}{R} \right) = \frac{(m-1)R}{(R+m\lambda)} \quad (3.1.2.2.9)$$

$\lambda \gg \frac{R}{m}$  için  $\frac{d\delta}{dt}$  (3.1.2.2.6) 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.



### 3.1.2.3 Yoğunluk Korelasyon Fonksiyonu

Bir kümenin yoğunluk korelasyon fonksiyonundan, taneciklerin kümedeki dağılımları hakkında bilgi edinilebilir. Kare örgüde tanecik yoğunluğu  $\rho(\vec{r})$  işgal edilmiş örgü gözü için 1, boş örgü gözü için 0 olarak tanımlanır. N tanecikli bir küme için yoğunluk korelasyon fonksiyonu,

$$C(\vec{r}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{r}'} \rho(\vec{r}') \rho(\vec{r}' + \vec{r}) \quad (3.1.2.3.1)$$

kümeler topluluğunda bulunan ortalama korelasyon fonksiyonuna  $\langle \rho(\vec{r}) \rho(\vec{r} + \vec{r}') \rangle / \langle \rho(\vec{r}') \rangle$  bir yaklaşımdır. Bu fonksiyonun (Eşitlik(3.1.2.3.1)) yalnızca kapalı kare örgüdeki iki gözü ayıran r uzaklığına bağlı olduğu kabul edilmektedir. Bu kabul r büyüklüğünün alacağı değerler kümenin boyutlarından çok küçük ise doğru olabilir; daha büyük değerler için anlamsızdır.

Eşitlik (3.1.2.3.1)'e göre hesaplanan yoğunluk korelasyon fonksiyonunun küme merkezinden uzaklığın bir kuvveti ile ifade edilebildiği gösterilmiştir[3].

$$C(r) = kr^{-\alpha} = Kr^{D-d} \quad (3.1.2.3.2)$$

K ve k birer sabit, d kümenin bulunduğu uzayın boyutu, D ise kümenin fraktal (Hausdorff, topolojik) boyutudur. Fraktal cisimlerde yeterince büyük bir tanecik sayısı N için

$$N(R) = R^D \quad (3.1.2.3.3)$$

bağıntısı sağlanır. Burada R, N taneciği kapsayan bölgenin yarıçapıdır.

Fraktal cisimler için (3.1.2.3.2) ve (3.1.2.3.3) eşitlikleri, fraktal boyutları elde etmek için iki bağımsız ifade olup, aynı fraktal boyut değerini vermeleri gerekir.

**Tablo 3.2.1** İki ve üç boyutlu uzayda oluşan farklı tanecik k için yoğunluk korelasyon fonksiyonuna ait üsler ( $\alpha$ ) kümeleri.

	İki Boyutlu ( $\alpha$ )	Üç Boyutlu ( $\alpha$ )
Difüzyonla sınırlı kümeleşme (DLA), modeli kullanılarak oluşturulan kümeler : Kare Örgüde, 2079-3609 parçacıklı altı kümenin ortalaması	0.343±0.004	
Üçgen örgüde,1500-2997 parçacıklı üç kümenin ortalaması	0.327±0.01	
Tanecik sayısı – yarıçap bağıntısına göre, 999-3000 parçacıklı altı küme için hesaplanan $\alpha$ değerlerinin ağırlıklı ortalaması	0.299±0.02	
$\alpha=2D=0.416$ değerli Koch eğrisi, rasgele ötelenmiş ve döndürülmüş yedi korelasyon fonksiyonun ortalama ölçülmüş değeri	0.42	
Metal parçacıklardan oluşan kümeler resimlerdeki yoğunluklar kullanılarak elde edilen korelasyon fonksiyonları.	0.32±0.01	1.32±0.01
Kendi yörüngesini kesmeden yürüme (uçma), adım yoğunluğunun korelasyonları	0.667	1.33
Perkolasyon eşik durumuna ait kümeler için tanecik sayısı – yarıçap bağıntısına göre	0.2	0.9
Rasgele hayvanlar, tanecik sayısı yarıçap bağıntısına göre	0.46	1.18

### 3.1.2.4 Topolojik Boyut

Topoloji, iki ya da çok boyutlu uzayda sistemi oluşturan nesnelerin kümeleşmesi farklı olmasına rağmen değişmeyen geometrik niceliklerini inceleyen matematiğin bir koludur.

Tamamen nesnelere ile doldurulmuş bir örgünün boyutu Öklit boyutu  $d$  ile tanımlanır. Bu durumda boyut 1,2,3...gibi tam sayı değerlerini alır. Mesela Öklit boyutu, sürekli doğru için 1, sürekli düzlem için 2'dir. Bir tanecik kümesi en uç durumda içinde bulunduğu uzayı tamamen doldurabildiğinden dolayı kümenin topolojik boyutu  $D$  ile içinde bulunduğu uzayın boyutu  $d$ ,  $D \leq d$  bağıntısını sağlamak zorundadır.

Bir tanecik kümesinin topolojik boyutunu hesaplamada kullanılan yaklaşımlardan biri kutu-sayma yöntemidir. Fraktala ait nesnelerin bulunduğu  $R$  yarıçaplı bölge içindeki  $N(R)$  dolu gözler sayılır.

$$N(R) = R^D \quad (3.1.2.4.1)$$

bağıntısının log – log grafiğinin ( $\log N$  nin  $\log R$  ye karşı grafiği) eğimi topolojik boyutu verir.

Topolojik boyutun artması örgü içerisinde kümeyi meydana getiren nesnelerin yoğunluğunun arttığını gösterir. Difüzyon ile sınırlı tanecik kümeleşme (DLA) modeline göre oluşan tanecik kümesinin topolojik (fraktal, Hausdorff) boyutu 1,585 olarak hesaplanmıştır.

### 3.1.3 Perkolasyon Kümeleri

Bir örgü, örgü gözleri ve örgü bağlarından oluşur. Aşağıdaki işlem gözler için yapılırsa gözlerden oluşan kümeler, bağlar için yapılırsa bağlardan oluşan kümeler elde edilir. Bir örgünün bağları  $p$  ihtimali ile dolu ( $1-p$ ) ihtimali ile boş olsunlar ve her bağ için bu ihtimaller diğer bağların durumuna bağlı olmasın. Dolu bağlar ya tek başlarına bulunurlar ya da en yakın komşulardan bir küme oluştururlar.  $p$  özel bir  $p_c$  değerini aldığı anda, diğer kümelerle birlikte, örgünün bir tarafından diğer tarafına veya taraflarına uzanan bir küme oluşur. Bu kümeye kapsayan (“sonsuz”) küme (ağ) denir ve sadece bir tanedir ve bir sıvının gözenekli bir ortamda (mesela, kum) süzülerek (sızarak) oluşturduğu ıslak gözenekler ağına (bölgesine) benzerlik gösterir.  $p_c$ 'ye perkolasyon (süzülme) eşiği denir.  $p < p_c$  ise süzülen küme yoktur,  $p \geq p_c$  ise sadece bir tane süzülen küme vardır. Buna göre perkolasyon bir faz geçişi olup  $p = p_c$ 'de meydana gelir. Bir örgü gözü (bağı) için şunlardan sadece bir tanesi mümkündür:

1.  $(1-p)$  ihtimali ile boş

2.  $p \cdot P_\infty$  ihtimali ile “sonsuz” kümeye ait

3.  $p \cdot (1 - P_\infty)$  ihtimali ile başka bir kümeye ait. Örgüdeki dolu gözlerin “sonsuz” kümeye ait kesrine süzülme ihtimaliyeti  $P_\infty$  denir.  $p > p_c$  olmak üzere  $(p - p_c)$  çok küçük ise  $P_\infty$ ,

$$P_\infty \propto (p - p_c)^\beta \quad (3.1.3.1)$$

şeklinde davranır;  $\beta$  bir kritik üstür. Bir örgü gözünün  $S$  elemanlı bir kümeye ait olma ihtimaliyeti  $P_s$ ,

$$P_s = s \cdot n_s \quad (3.1.3.2)$$

dir;  $n_s$ ,  $s$  gözlü küme sayısının bütün gözlerin sayısına oranıdır. Bütün bu ihtimallerin toplamı 1 (bir)'e eşittir

$$(1-p) + p \cdot P_\infty + \sum_S s \cdot n_s = 1 \quad (3.1.3.3)$$

Küme sayılarının  $n_s$ , süzülme olayının incelenmesinde temel nicelik olduğu anlaşılmaktadır.  $p$  ihtimali ile doldurulan bir örgüdeki  $s$  elemanlı küme sayısını aşağıdaki ifade verir:

$$n_s(p) = \sum_t g_{st} p^s (1-p)^t \quad (3.1.3.4)$$

Burada  $t$ , bir kümenin çevresi olup kümenin dolu gözlerinin en yakın komşusu olan boş örgü gözü sayısıdır;  $g_{st}$  ise çevresi  $t$  olan  $s$  gözlü bir kümenin, geometrileri birbirinden farklı konumlarının sayısıdır.  $g_{st}$ ,  $n_s(p)$ 'den daha temel bir nicelik olup  $p$ 'den bağımsızdır, örgü yaratıkları (hayvanları) da denilen kümelerin sayısını verir. Aşağıda iki boyutlu kare örgüde çeşitli örgü hayvanları için örnekler verilmektedir.

1.

$$\begin{array}{c}
 x \\
 x \bullet x \\
 x \\
 g_{st} = 1 \\
 n_1 = 1 \cdot p^1 \cdot (1-p)^4
 \end{array}$$

2.

$$\begin{array}{c}
 x \quad x \qquad \qquad \qquad x \\
 x \bullet \bullet x \qquad \qquad \qquad x \bullet x \\
 x \quad x \qquad \qquad \qquad x \bullet x \\
 \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad x \\
 g_{st} = 2 \\
 n_2 = 2 \cdot p^2 \cdot (1-p)^6
 \end{array}$$

3.

$$\begin{array}{c}
 x \quad x \quad x \qquad \quad x \qquad \quad x \qquad \quad x \qquad \quad x \quad x \qquad \quad x \quad x \\
 x \bullet \bullet \bullet x \quad x \bullet x \quad x \bullet x \quad x \bullet x \quad x \bullet \bullet x \quad x \bullet \bullet x \\
 x \quad x \quad x \quad x \bullet x \quad x \qquad \quad x \bullet \bullet x \qquad \quad x \qquad \quad x \\
 \qquad \quad x \bullet x \quad x \bullet \bullet x \qquad \quad x \qquad \quad x \bullet x \qquad \quad x \bullet x \\
 \qquad \quad \quad x \qquad \quad x \quad x \quad x \bullet x \qquad \quad x \qquad \quad x \\
 \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad x \\
 g_{st} = 2+4 = 6 \\
 n_3 = 2p^3(1-p)^8 + 4p^3(1-p)^7
 \end{array}$$

### 3.1.4 Yörüngesini Kesmeksizin Yürüyüş

Örgülerde doğrusal veya dallı polimerleri temsil etmek üzere kümeler oluşturmak, perkolasyon kümesi elde etmek gibi amaçlarla başvurulan bir yöntemdir. Yörüngesini kesmeden yürüyüşle perkolasyon kümesi aşağıda elde edilmektedir. Örgünün dolu bir gözünden,  $S_0$ , başlayarak buna bağlı gözlere sadece bir defa uğranılır.  $t = 1$  adımında  $S_0$ 'un  $z$  tane en yakın komşusu  $p$  ihtimaliyeti ile doldurulup  $(1-p)$  ihtimaliyeti ile boş bırakılır. Yürüyüşün bir anında  $\{S_1\}$  dolu gözler (dallanma uçları) kümesini gösterebilir;  $t = 2$  adımında  $\{S_1\}$ 'e komşu olan ve daha önce ziyaret edilmemiş olan bütün gözler benzer şekilde doldurulup veya boş bırakılarak  $t = 2$  adımı için dallanma uçları kümesi  $\{S_2\}$  elde edilir. İşlemler bu şekilde yinelenerek elde edilen küme perkolasyon kümesi ile aynı evrensellik sınıfına aittir. Kendini kesmeyen yürüyüş elde etmenin bir yöntemi, rastgele yürüyüşü oluşturduktan sonra oluşan halkaları ortadan kaldırmaktır.

## 3.2 Temel Kümeleşme Modellerine Renormalizasyon

### Grup Yaklaşımı

Konum uzayı renormalizasyon grup yaklaşımı, Eden modeli, DLA modeli ve örgü yaratıkları (hayvanları) da denilen kümeleri incelemek için uyarlanmaktadır.

Konum uzayı renormalizasyon grup (PSRG) yaklaşımında, ardışık uzunluk ölçeklemeleri yaparak kümenin bağıntısındaki değişme tayin edilir. Bunun için örgü  $b$  kenarlı hücrelere bölünür, kümedeki her dolu göze bir

ağırlık verilir ve hücreler tek bir noktaya ölçeklenir. Renormalizasyon dönüşümü

$$K' = R(K) \quad (3.2.1)$$

eşitliğiyle şöyle tanımlanmaktadır: eğer bir yörünge hücreyi kapsıyor ise bu hücre dolu diye tanımlanır.  $R(K)$ ,  $b$  kenarlı hücredeki bütün kapsayan konumları içerir. Fraktal boyut ( $d_f$ )

$$d_f = \frac{\ln \lambda_K}{\ln b} \quad (3.2.2)$$

ifadesi ile verilir.  $\lambda_K$ 'yı bulmak için

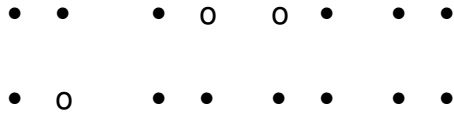
$$\lambda_K = \left( \frac{\partial K'}{\partial K} \right)_{K=K^*} \quad (3.2.3)$$

tanımı kullanılır;  $K^*$  kritik sabit noktadır.

Konum uzayı renormalizasyon grup yaklaşımının farklı kümelere uygulanışı aşağıda verilmektedir.



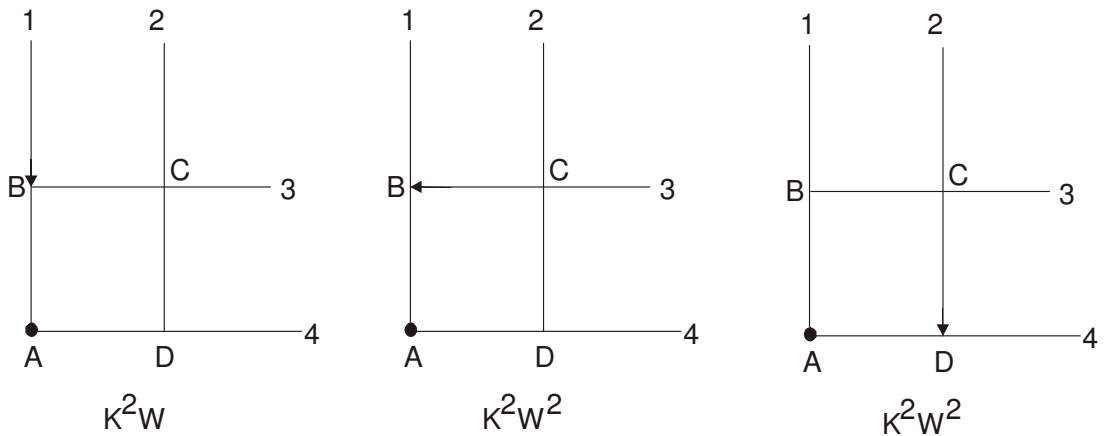
### 1. Örgü yaratıkları (hayvanları)



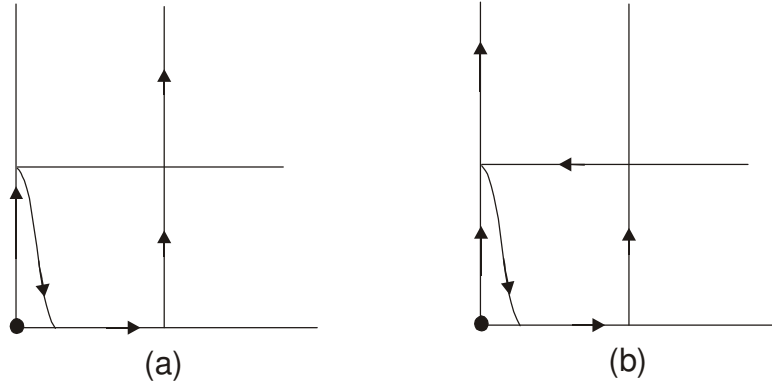
**Şekil 3.2.1** Kare örgüde  $b=2$  kenarlı bir hücre için kapsayan örgü yaratığı konumları

Tanecik sayısı  $S$  olan, geometrileri farklı bütün kümelere  $K^S$  çarpanı ağırlık olarak verilir (Şekil 3.2.1). Kapsayan yörüngeleri bulmak için hücrenin sol alt köşesinden başlanmaktadır. Kapsayan konumlar sayılarak  $K' = 3K^3 + 1K^4$  renormalizasyon dönüşümü elde edilir. Buradan  $d_f = 1,66$  ve örgü, kenarı  $b = 3$  olan karelere bölünerek de  $d_f = 1,60$  bulunur[78].

### 3.2.1 DLA modeli



**Şekil 3.2.1.1** Difüzyonla sınırlı kümeleşmeye göre AB kümesini büyütmenin yolları.



**Şekil 3.2.1.2** (a) Beş adımlı rastgele yürüyüş (b) Altı adımlı rastgele yürüyüş.

DSRG yaklaşımı ile DLA modelini incelemek için en az iki parametre gereklidir:  $K$  ağırlığı dolu göz için,  $W$  ağırlığı da kümeye eklenen taneciğin rastgele yürüyüşünün her adımı için renormalizasyon dönüşümü şöyle yapılmaktadır:

$$K' = \sum_{s,t} C_{st} K^s W^t \quad (3.2.1.1)$$

$C_{st}$ ,  $s$  tanecikli bir kapsayan kümeyi  $t$  adımlı rastgele yürüyüşle büyütmenin farklı yollarını vermektedir. Çekirdeğin bulunduğu göz, hücrenin sol alt köşesinde bulunduğundan, rastgele yürüyüşlerin hücreye yalnız kuzey ve doğudan girmesine izin vardır. Şekil 3.2.1 kenarı  $b = 2$  olan bir hücre için kapsayan kümelerin üretilmesini göstermektedir. İki gözlü kümelerin (AB ve AD), A'daki çekirdekten başlayarak bütün büyütme yolları sayılmaktadır. Şekil 3.2.2'de AB kümesini büyütmenin üç yolu ağırlıkları ile birlikte gösterilmektedir. Her iki gözlü küme için ağırlık  $2K^2W(1+2W)$ 'dir. Üç farklı üç gözlü küme için daha önceden mevcut olan iki gözlü bir hücreye gitmesi mümkün olan bütün yürüyüşler göz önüne alınmaktadır. Hücrede mümkün

olan bütün rastgele yürüyüşler ve bütün mümkün kapsayan kümeler sayılırsa şu yineleme bağıntısı elde edilir:

$$K' = 6 K^3 W^2 (1+2W) + 8 K^4 W^3 (1+2W) \quad (3.2.1.2)$$

W için yineleme bağıntısı şöyle elde edilmektedir: Sonlu bir hücrede, sonsuz sayıda kapsayan rastgele yürüyüşü sayma probleminden kaçınmak için kritik ağırlıkta sadece  $\xi = \frac{1}{N^2}$  uzunluğundaki yürüyüşlerin önemli olduğuna dikkat edilmelidir; N, yürüyüşteki adım sayısıdır. Buna göre bir yürüyüşteki adım sayısı uçtan uca yer değiştirmenin karesinden büyük ise o yürüyüş ihmal edilmektedir (Şekil 3.2.1).

Bu durumda

$$W^1 = W^2 + 2W^3 + 5W^4 + 14W^5 \quad (3.2.1.3)$$

elde edilir. DLA kümelerinin fraktal boyutu,  $K'$  ve  $W'$  için yukarıdaki eşitliklerden,  $\lambda_K$  nın  $K = K^*$  ve  $W = W^*$  daki değeri kullanılarak bulunmaktadır: Kenarı  $b = 2$  olan hücre için  $D_f = 1,71$  ve kenarı  $b = 3$  olan hücre için de  $d_f = 1,64$  değerleri Monte Carlo sonucu olan  $d_f = 1,67$  ile iyi uyum göstermektedir [7,8].

### 3.3 Kümeleşme Deneyleri

Buharlaştırılan metal soğuk ve yoğun gazda birleşerek duman tanecikleri, bunlar da birleşerek gevşek kümeler oluştururlar. Demir (Fe), çinko (Zn) ve SiO<sub>2</sub> (Cab-O-Sil) kümelerinin düzlemde fotoğrafları karelenerek

dolu gözler 1(bir) ile tanımlanıp bilgisayar ortamında küme temsilleri elde edilmektedir. Hesaplanan yoğunluk korelasyon fonksiyonları

$$\langle \rho(r) \rho(0) \rangle - \langle \rho(0) \rangle^2 \propto r^{-A} \quad (3.3.1)$$

bağıntısını sağlamaktadır.  $0,1 \leq A \leq 0,3$  değerleri fraktal boyutu için  $1,9 \geq d_f \geq 1,7$  değerlerini vermektedir.

### **3.4 Eden Modelini Temel Alan Kümeleşme Modelleri**

#### **3.4.1 Magnetik Momentli Tanecikler İçin Eden Modeli**

Eden büyüme modelinde, büyüme elemanları birden daha fazla serbestlik derecesine sahiptir. Büyüme modelleri kritik orijinden bağımsızdır. Bu model tek boyutlu yarı açık zinciri ve korelasyon fonksiyonunu ile ifade edilir. İki boyutta, kümelerin simülasyonu çevre büyüme üssünün yarıçapına bağımlı olduğunu gösterir. Durum diyagramları üzerindeki büyüyen bulutların morfolojileri laküner bulutlar ile karışık bulutlar arasındaki geçişi ifade eder[74].

#### **3.4.2 Elektrik Yüklü Tanecikler İçin Eden Modeli**

Yüklü taneciklerin iki boyutlu kare örgüde kümeleşmesi için Eden modeli temel alınmaktadır. Tanecikler, kümenin oluşturduğu elektrostatik itici kuvvet engelini aşarak kısa menzilli bir çekici kuvvet yardımı ile kümeye yapışmaktadır. Modeldeki iki parametre, perdeleme uzunluğu  $\lambda$  ve çekim

enerjisi E, kümenin büyüme tarzını tayin etmektedir[75]. Modelin kuralları şunlardır:

1. Çekirdek örgü merkezinde bulunmaktadır.

2. Kümenin çevresinde rastgele bir j gözü seçilerek elektrostatik potansiyel enerjisi U hesaplanır ve E ile kıyaslanır.

$$U(j) = \sum_i \frac{q^2 a_{ij}}{r_{ij}} \quad (3.4.2.1)$$

Burada  $r_{ij}$  kümenin i'inci taneciği ile j'inci göz arasındaki uzaklık, q bir taneciğin elektrik yüküdür.  $r_{ij} < \lambda$  ise  $a_{ij}=1$ , aksi halde  $a_{ij} = 0$  dir.

3. Eğer  $U \leq E$  ise j'inci göze tanecik yerleştirilerek kümeye dahil edilir ve kümenin çevresinde yeni bir göz seçilir.  $U > E$  ise j-gözü hiç işgal edilmez.

Simülasyonlarda şu küme desenleri oluşmaktadır: Solucan görünümlü, yoğun dallı, çekirdekli yoğun dallı, yoğun, doğru, bir kısmı doğru.

### **3.5 DLA Modelini Temel Alan Kümeleşme Modelleri**

#### **3.5.1 Kare Örgüde Küme Büyümesi İçin Bir “Stochastic” Modelin Simülasyonu**

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.

$$V(\underline{x}) = A[1-s(\underline{x})] n(\underline{x}) D(\underline{x}, \ell_D) \quad (3.5.1.1)$$

Bu ifadedeki terimlerin anlamları şöyledir:

$$s(x) \begin{cases} 1, & x \text{ dolu ise} \\ 0, & x \text{ boş ise} \end{cases}$$

$n(x)$  :  $x$  in en yakın dolu komşularının sayısı

$-n(x)$  : kümedeki yüzey geriliminin karşılığıdır;

$(x)$  deki yüzeyin eğriliği ile orantılıdır ve sadece yüzeydeki gözlerden büyümeye imkân verir.

$D(x; \ell_D)$  : etkin difüzyon sabitidir.  $x$  merkezli,  $\ell_D$  yarıçaplı bir bölgedeki dolu gözlerin,  $x$  de sebep oldukları perdeleme etkisini belirler.

A: birleme sabitidir. Kümenin geometrisine etkisi yoktur.

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

Tek bir çekirdekten büyüyen kümelerde,  $\ell_D$ 'nin aldığı değerlere göre kümelerin şekilleri farklılaşmakta ve  $\ell_D \approx 8$  için ağaç görünümlü kümeler oluşmaktadır. Ancak fraktal boyut  $d_f \approx 2$  olup, DLA kümeleri için hesaplanmış değerden,  $d_f = 1,66$ , büyüktür[7,8].

### 3.5.2 Kümeleşme Modellerinde Katılma Desenlerinin Oluşumu

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 incel enilmektedir; bunun için taneciklerin yapışma ihtimaliyetlerinin, ara yüzeyin bölgesel yönelimine bağlı olarak değiştiği kabul edilmektedir. Tercihli rastgele 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.

Katılma cephesinin hareketini difüzyon alanı  $u(x,t)$  tayin eder, eğer ara yüzeyin yavaş ilerlediği farz edilirse  $\nabla^2 u(x,t) = 0$  denklemini sağlar. Yüzeyden çok uzaklarda harekete geçen bir taneciğin rastgele yürüyerek  $x$  noktasına  $t$  anında varma ihtimali, yukarıdaki denkleme, denklem  $x$  ve  $t$ 'nin kesikli değerler almasına uygun olarak düzenlendiğinde uymaktadır[7,8]. Bu denklemin ara yüzey sıcaklığı  $T_{int}$  ile erime sıcaklığı  $T_M$  arasındaki Gibbs-Thomson bağıntısı,

$$T_{int} = T_M \left( 1 - \frac{\gamma K}{H} \right) \quad (3.5.2.1)$$

dikkate alınarak çözülmesi gerekir. Bu ifadede  $\gamma$  yüzey gerilimini,  $K$  ara yüzeyin bölgesel eğriliğini,  $H$ 'da erime ısısını göstermektedir. Bu şartın etkilerini göz önüne alabilmek için DLA'da şu değişiklik yapılmaktadır: Küme yüzeyine yapışma ihtimaliyeti ara yüzeyin bölgesel eğriliğine bağlıdır. Gibbs-Thomson bağıntısına göre,  $K > 0$  ise  $T_{int} < T_M$  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 ara yüzeye karşılıktır. Yapışma ihtimaliyetinin eğriliğe bağımlılığı için

$$\rho(n) = A(n-n_0) + B \quad (3.5.2.2)$$



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

$$B = T_M \quad (3.5.2.3)$$

$$\frac{A}{B} = \frac{\gamma}{H} \quad (3.5.2.4)$$

$$(n_o - n) = K \quad (3.5.2.5)$$

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 rastgele yürür.
2. Taneciklerin büyümekte olan küme yüzeyine yapışma ihtimali ara yüzeyin eğriliğine bağlıdır.
3. Tanecik, en yakın komşu sayısı en fazla olan (potansiyel enerjisi en düşük olan) bir konumda kararlı duruma gelir.

Bu model ile [30]'deki model arasındaki farklılık ara yüzeydeki yerel eğriliğin hesaba katılma tarzından kaynaklanmaktadır [30] ve ara 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.

### 3.5.3 Tanecikler Arasında Dipol Etkileşmesi Var İken 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 momenti ve  $\vec{\mu}$  yönünde birim vektör olmak üzere etkileşme enerjisi,

$$U_{ij} = \mu^2 u_{ij} \quad (3.5.3.1)$$

$$u_{ij} = \left[ \vec{u}_i \cdot \vec{u}_j - 3(\vec{u}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{u}_j \cdot \vec{r}_{ij}) / r_{ij}^2 \right] / r_{ij}^3 \text{ dir.} \quad (3.5.3.2)$$

$\vec{r}_i$  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 rastgele yürüyüşleri

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

$$u_T = \sum_{i=1}^{(n-1)} U_{ni} \quad (3.5.3.3)$$

dir. Tanecik Brown hareketi (rastgele hareket) yaparak ve her adımda tanecik çapı (d) kadar ve rastgele 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 değişme olmaktadır. Eğer  $\Delta u_T < 0$  ise, bu hareket geçerli kabul edilir. Eğer  $\Delta u_T > 0$  ise, hareket

$$P = e^{-K(\Delta u_T)} \quad (3.5.3.4)$$

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

$$K = \frac{\mu^2}{d^3 k_B T} \quad (3.5.3.5)$$

$K^{-1} = 0$  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 rastgele yürüyüş (Brown hareketi) yapar ve model temel DLA modeline indirgenir.

### 3.5.4 İki Boyutlu Uzayda Uzun Menzili Çekici Etkileşmelerin Etkisinde Büyüme Şekilleri

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  $r_o$  olmak üzere,  $r_{iç} = \frac{4}{3} r_o$  ve dış yarıçapı da  $r_{dış} = \frac{5}{3} r_o$  olan bir bölge tanımlanmaktadır.
3. Yukarıda sözü edilen bölgede rastgele bir örgü noktası (i, j) seçilip, sonsuzdan bir tanecik bu noktaya atlatılmaktadır; bu sırada taneciğin enerjisinde küme tanecikleri ile etkileşmesinden dolayı,  $\Delta U$  kadar değişme olur.

$$\Delta U = U_{ij} = \sum_{k=1}^N \frac{\rho}{r_{ij,k}^2} \quad (3.5.4.1)$$

Bu atlama,

$$P(\Delta U) = \frac{1}{2} \left( 1 - \tanh \left( \frac{1}{2} \Delta U \right) \right) \quad (3.5.4.2)$$

Glauber ihtimaliyetine göre gerçekleşir ya da gerçekleşmez.

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

5. Yukarıdaki adım (4), tanecik büyüme noktasından  $2r_0$  uzaklığına ulaşana kadar yinelenir.

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

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

### 3.6 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.

6

### 3.7 Büyüme Modeli Olarak “Cellular Automaton”lar

“Cellular automaton”lar değişkenleri (konum, zaman, hal) kesikli değerler alan dinamik sistemler olup, kendiliğinden düzene girerek karmaşık desenler oluştururlar. Bundan dolayı, doğadaki karmaşık sistemlere model olarak başvurulmaktadır. Von Neumann tarafından biyolojideki sistemlerin kendi benzerlerini üretmelerine, Ulam tarafından da büyümeye model oluşturmak üzere önerilmişlerdir. Wolfram tarafından teorisi geliştirilerek 1 (bir) boyutlu uzaydaki “cellular automaton”ların dört sınıfta toplanabileceği gösterilmiştir. Konumların bulunduğu örgünün türü, sınır şartları ve “cellular automaton”ın zaman içinde gelişimini sağlayan kuralın seçimi araştırmacıya kalmaktadır. Bir “cellular automaton”ın  $(t+1)$ 'nci anda (zaman adımında) aldığı hal (bütün örgü gözlerinin aldığı haller),  $t$ 'nci zaman adımındakine bağlıdır. Dinamiği ise, herhangi bir  $i$ 'nci örgü gözü için ve 1(bir) boyutlu uzayda en yakın komşuların göz önüne alındığı aşağıdaki gibi bir yerel fonksiyon (“cellular automaton” kuralı) sağlar:

$$x_i^{(t+1)} = f(x_{i-1}^t, x_i^t, x_{i+1}^t) \quad (3.7.1)$$

Bir kar tanesinin büyümesini göz önüne alalım: Altıgen şeklinde bir buz kristali atmosferdeki su buharının içinden, üzerine buz ekleyerek geçip yere iner. Basit bir model şu özellikleri sağlamalıdır: Difüzyon gibi işlemlerin ayrıntılarını bulundurmamalı; bir uzunluk ölçeğinde, parça oluşturmaya karşı kararsız olmalıdır. Buzun eklendiği yerde erime ısı serbest kalır, kristalin o bölgesi ısınır ve o bölge civarında büyümeyi önler. Buna göre model, bir önceki adımda buz ilave olunan gözün komşularına çok az ihtimalle buz eklenmesini sağlamalıdır. Bu şartları sağlayan bir “cellular automaton” kuralı bulunabilir; altıgen gözlü bir örgü seçimi de gerekli simetriyi sağlar.

DLA kümelerini “cellular automaton” ile elde etmek mümkün olup, her iki yonteme göre oluşturulan kümeler aynı fraktal boyuta sahiptir. Bakteri ve mantar kümelerinin büyümesi için geliştirilen “cellular automaton”lar DLA kümelerinin çok benzerlerini üretmektedirler.

#### 4. DİFÜZYONLA SINIRLI TANECİK KÜMELEŞME ALGORİTMASI

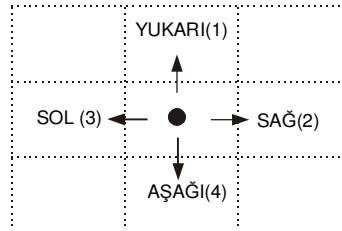
Difüzyon ile sınırlı tanecik kümeleşme (DLA) modelinde  $L$  doğrusal boyutlu bir kapalı kare örgü ve yerleşeceği tahmin edilen parçacık (tanecik) sayısı belirlenir. Bu örgü içerisinde taneciklerin etrafında kümeleşeceği tohum (çekirdek) tanecik, koordinatları keyfi olarak belirlenen bir göze (hücreye) yerleştirilir. Kare örgünün kenarlarındaki göz sayısı  $4L$  ve örgünün toplam göz sayısı  $L^2$  dir. Bilgisayar  $0,001$  ile  $0,999$  arasında rastgele sayılar ( $R$ ) üretir. Taneciğin harekete başlayacağı gözü kare örgü üzerine bulmak için, çekirdekten  $R_1$  ve  $R_2$  ( $R_1 < R_2$  olmak üzere) yarıçaplı çember alınarak  $R_1 < l = RL/2 < R_2$  hesaplanır. Eğer  $R_1 < l$  olan durum A modeli olarak ve  $R_1 < l = RL < R_2$  olan durum ise B modeli olarak tanımlanır. Böylece A ve B modeli için elde edilen  $l$  değerinin tamsayı kısmı alınarak taneciğin harekete başlayacağı çekirdekten  $R$  yarıçap uzaklıklı örgü gözü konumu hesaplanır.

Taneciğin yürüyeceği yeni gözü bulmak için tekrar bir rastgele 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 4.1'de bir taneciğin olası yürüme yönleri gösterilmektedir. Kapalı kare örgünün koordinatı  $(\hat{I}, J)$  olan herhangi bir gözde bir tanecik için; eğer  $0,001 \leq R \leq 0,249$  ise taneciğin koordinatları  $(\hat{I}, J+1)$ ,  $0,250 \leq R \leq 0,499$  ise  $(\hat{I}, J-1)$ ,  $0,500 \leq R \leq 0,749$  ise  $(\hat{I}+1, J)$ ,  $0,750 \leq R \leq 0,999$  ise  $(\hat{I}-1, J)$  yürümesi gerçekleşir. Bu işlemler, küme temsilini üretmek için yapılan simülasyonlarda başlangıçta önerilen tanecik sayısına ulaşıncaya kadar tekrarlanır. Algoritmaya rastgele yürüyüş ek olarak yapışma olasılık  $P$ ,



büyüyen kümenin çevresinde bulunan boş komşu gözlere eklenen parçacıkların yörünge davranışını ve büyüyen yüzey üzerinde kompleks reaksiyon dinamiklerini temsil etmek üzere kullanılmaktadır. Özellikle yapışma olasılığı  $P$ , numune yüzeyinde geri dönüşümsüz katyonların indirgenerek azalmasını gerektiren kimyasal aktivasyon enerjisi ile ilişkili bir simülasyon parametresi olarak kullanılmaktadır. Yürüme boyunca bir parçacık  $P$  olasılığıyla sürüklenme doğrultusundaki bir örgü birimi ile ya da  $1-P$  olasılık ile dört komşusundaki birine doğru hareket eder.  $A$  ve  $B$  modellerinde tanecikler yapışma olasılığı  $P$  değeri ile küme çevresinde aktif boş sitlere yerleşerek kümeye yapışmaktadır. Yapışma olasılığı  $P=t^{3-B}$  bağıntısı ile verilir. Burada  $t$ , yapışma olasılığı parametresi olup  $0<t<1$  değerleri alabilir. Küme çevresindeki herhangi bir taneciğin çevresindeki aktif üç boş sitin dolma olasılığı  $B=1$  değerliden daha fazladır.

Modeller tanecik sürüklenmesinin zıt doğrultusundaki büyüme eğilimi ile küme temsillerini üretmektedir. Taneciğin küme ile etkileşmesi birbirlerine yapışma olasılığı  $P$ , ortamın sıcaklığı ve kimyasal dinamikler ile doğru orantılıdır. Sıcaklığın azalması, taneciklerin ortalama serbest yolların 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.



**Şekil 4.1** Bir taneciğin gidebileceği komşu gözler.

Harekete başlatılan ve rastgele yürütülen tanecik, merkezi taneciğın (çekirdek) bir komşu gözüne ulařıncaya 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 simülasyon başlangıcında belirlenen tanecik sayısına ulařıncaya kadar devam eder.

Sistemde bulunan tanecikler sıcaklık etkisi ya da diğeri oluşum parametrelerinin etkisi ile küme oluşturmaktadır. Brown hareketi olarak isimlendirilen taneciklerin bu hareketi difüzyon ile sınırlı olduđu için Monte Carlo yöntemi ile doğrudan incelenebilir.

## 5. BULGULAR VE TARTIŞMA

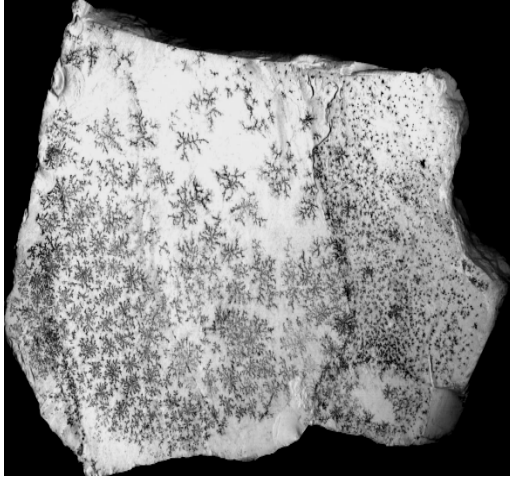
Bu bölümde Monte Carlo simülasyon tekniği ve DLA modeli algoritması kullanılarak üretilen küme temsilleri ve bunlara ait istatistiksel parametreleri yer almaktadır. Bölüm, küme temsillerinin üretiminde kullanılmak için algoritmanın hazırlanması, geçerlilik kontrolü ve kümeyi karakterize eden temel geometrik ve istatistiksel parametrelerin tanımlanması ile başlamaktadır. Bu amaç ile küme temsilleri bilgisayar ekranının çözünürlüğüne göre en küçük karelere bölünerek ölçeklenmekte ve bunlar kullanılarak üzerlerinde nümerik hesaplamalar yapılmaktadır. Daha sonra küme temsilleri, simülasyon üretim değerleri sonucu morfolojik yapıdaki geometrik ve istatistiksel olarak tanımlanmış değerlerindeki değişiklikler referans alınarak gruplanmaktadır. Ayrıca, simülasyon yöntemi kullanılarak üretilen küme temsilleri doğal oluşum ve deneysel çalışmalar ile karşılaştırılmaktadır.

Doğal oluşmuş ve deneysel üretilmiş malzemelerin yüzey ve ara yüzeylerindeki farklı oluşum yapıların fiziksel ve kimyasal özelliklerine önemli katkısı vardır. Böylece bu yapıların tanımlanması ve oluşum mekanizmalarının tartışılması teknolojik uygulamalardaki kullanımından dolayı son zamanlarda dikkat çekici bir konu olmuştur. Bu yapılar fiziksel, kimyasal ve biyolojik etkileşimler sonucu oluşmaktadır. Özellikle kimyasal elektrodepozisyonda, buhar depozisyonu kullanılarak film büyütmelerinde ve bakteri küre büyümelerinde gözlenmektedir. Deneysel çalışmalarda, Petri kabı kullanılarak ya da film üretimi esnasında oluşmakta ve elektron tarama mikroskopu kullanılarak yüzey karakterizasyonu ile belirlenmektedir. Bunlar kristal büyüme ya da quazi kristal olarak tanımlanabilir. Geometrik ve istatistiksel bakış açısı ile makro yapısı dikkate alınarak incelenmektedir.

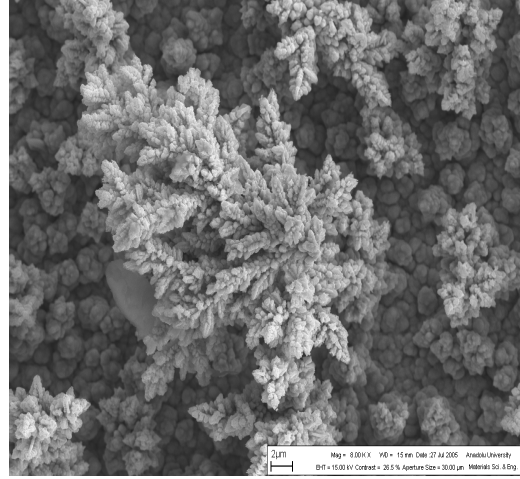
Yapılar gerek oluşum sürecinde gerekse final durumunda kendine benzer (self-similarity) özellik göstermektedir. Bu yüzden quazi kristallerle ilgili çalışmalar, deneysel, simülasyon ve reel yapıları ölçekleyerek nümerik ve geometrik hesaplamalar üzerine odaklanmıştır. Manyezit cevheri yüzeyine mangan (Mn) ve demir (Fe) içerikli bileşikler sızarak veya çökerek düşük yoğunluklu saçaklı yapılar oluşturmaktadır. Şekil 5.1'de doğal koşullarda oluşan ve farklı deneysel şartlarda üretilen küme yapıları sunulmaktadır. Bunlar kaotik ve düzensiz yapılardır. Parçacıkların numune üzerinde yayılması ve bir küme oluşturması Laplace denklemi çözüm yaklaşımı ile tanımlanmaktadır. Şekil 5.1 doğal manyezit cevheri yüzeyinde oluşan mangan dendritleri (a), kimyasal elektrodepozisyonu ile nikel-bakır (Ni-Cu) yapıları (b) ve Mogi ve arkadaşları Petri kabı kullanarak gerçekleştirdikleri deneysel çalışmalarda çinko sülfat ( $ZnSO_4$ ) çözeltisi elektro deposizyonu sonucu üretilen çinko (Zn) metal katyonlarının indirgenmesi sonucu oluşan kümeleri (c-d) göstermektedir[81].

Küme temsillerini üretmek için farklı Monte Carlo simülasyon modelleri vardır. Bunlardan en önemlisi ve algoritmasının basitliğinden dolayı difüzyonla sınırlı kümeleşme (DLA) modelidir. Bu çalışmada, DLA modeli algoritması kullanılmaktadır. Yarı çapı  $40 \text{ \AA}$  olan kolloidal taneciklerin kümeleşmesini tanımlamak için geliştirilen bir Monte Carlo simülasyon modeli olarak öneminden dolayı DLA modeline genelleştirme ile A ve B modelleri tanımlanmaktadır. Özellikle taneciklerin yörüngeleri ve bu yörüngede öteleme davranışı (random veya doğru buyunca yürüyüş) referans alınarak araştırmalar yapılmaktadır. Bu modellerde parçacık yörüngesi kısa adım mesafeli ise fraktal boyut değeri  $D_f = 2$  değerli kümeler temsilleri elde edilmektedir. Buna karşın uzun adım mesafeli rastgele yürüyen parçacıkların oluşturduğu kümelerin fraktal boyut değeri  $D_f = 1$  ile gösterilmektedir. Sonuç olarak,  $\ell$  büyüklüğünde bir tanecik kümesinin kütlesi

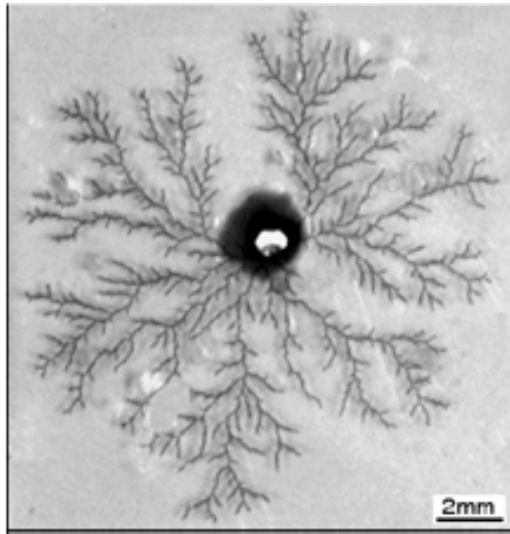
$$M(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} f(l/\xi) \quad (5.1)$$



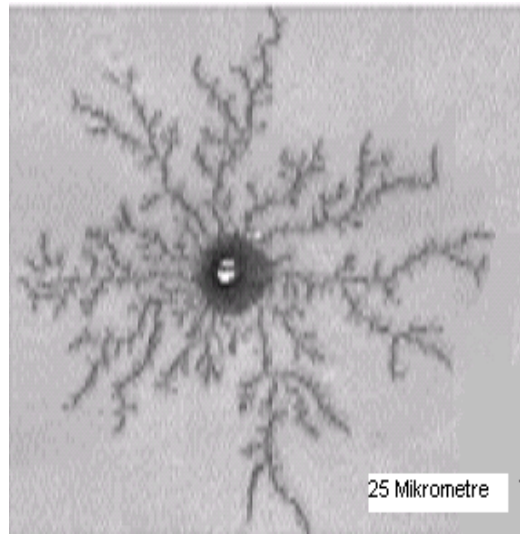
(a)



(b)



(c)



(d)

**Şekil 5.1** Doğal manyezit cevheri yüzeyinde oluşan mangan dendritleri[5,6] (a), kimyasal elektrodepozisyon yöntemi kullanılarak üretilen nikel-bakır yapıları[9] (b) ve Petri kabında Mogi ve arkadaşları tarafından gerçekleştirilen çinko sülfat çözeltisi kullanılarak üretilen yapılar (c), (d)[81].

bağıntısı ile verilebilir. Bu da  $\ell/x = r$  yaklaşımı ile tanımlanabilir.

$$f(x) \sim \begin{cases} \text{Sabit eğer } x \ll 1 \text{ ise} \\ x^{d-D_f} \text{ eğer } x \gg 1 \text{ ise} \end{cases} \quad (5.2)$$

Burada M kümede biriken kütle,  $\ell$  küme büyüklüğü, d uzay boyutu,  $D_f$  fraktal boyut değeri ve r morfolojik DLA rejiminden radyal benzeri ölçekleme rejimine genetik (morfolojik) geçiş yarıçapını temsil etmektedir.

Küme simülasyonları için özellikleri Ek-1'de verilen kişisel bilgisayar kullanılmıştır. Bölüm 4'de DLA modeli için tanımlanan Monte Carlo simülasyon algoritması kullanılarak bilgisayar yazılımı hazırlanmaktadır. Kapalı kare örgü merkezine çekirdek parçacık yerleştirilmektedir. Kapalı kare örgü kenarlarından rastgele tanecikler random yörüngede sabit sürüklenme hızlı yürüyen parçacıklar gönderilerek merkezi çekirdeğin komşu gözüne yerleşmesi sağlanmaktadır. Eğer bir parçacık rastgele yürüyüşü esnasında kapalı kare örgünün dışına çıkarsa, o iptal edilerek yeni bir parçacık önerilerek işleme devam edilmektedir. Algoritmaya rastgele yürüyüşe ek olarak yapışma olasılık P, büyüyen kümenin çevresinde bulunan boş komşu gözlere eklenen parçacıkların yörünge davranışını ve büyüyen yüzey üzerinde karmaşık reaksiyon dinamiklerini temsil etmek üzere kullanılmaktadır.

Özellikle yapışma olasılığı P, numune yüzeyinde geri dönüşümsüz kationların indirgenerek azalmasını gerektiren kimyasal aktivasyon enerjisi ile ilişkili bir simülasyon parametresi olarak kullanılmaktadır. Yürüme boyunca bir parçacık P olasılığıyla sürüklenme doğrultusundaki bir örgü birimi ile ya da 1-P olasılık ile dört komşusundaki birine doğru hareket eder. Model sürüklenmenin zıt doğrultusundaki büyüme eğilimi ile küme

temsillerini üretmektedir. Genelleştirilmiş DLA 'da tanecikler yapışma olasılığı P değeri ile küme çevresinde aktif boş sitlere yerleşerek kümeye yapışmaktadır. Yapışma olasılığı

$$P=t^{3-B} \quad (5.3)$$

bağıntısı ile verilir. Burada t, yapışma olasılığı parametresi olup  $0 < t < 1$  değerleri alabilir. Küme çevresindeki herhangi bir taneciğin çevresindeki aktif üç boş gözün dolma olasılığı  $B=1$  değerliden daha fazladır.

Simülasyon çalışmasında, önce algoritmanın güvenilirliği ve geçerliliği, ölçekleme yöntemi kullanılarak test edildi. Lineer örgü boyut  $L=4 \cdot 10^2$  nokta birimli (pixel),  $N=10^4$  tanecikli (çekirdek parçacık hariç) ve yapışma olasılık parametresi  $t=1$  değerli küme temsili üretildi ve bilgisayar ekran çözünürlüğü referans alınarak kümeler karelendi. Bunların yoğunluk korelasyon fonksiyonu  $C(r)$ , benzer küme topluluğundan elde edilen ortalama korelasyon fonksiyonuna bir yaklaştırma olarak, aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır.

$$C(r) = N^{-1} \sum_{\vec{r}} \rho(\vec{r}) \rho(\vec{r} + \vec{r}) \quad (5.4)$$

Burada N, kümedeki tanecik sayısı ya da normalizasyon parametresi ve  $\rho(r)$  ise r konumlu iki hücredeki tanecik yoğunluğudur. Bu fonksiyonun yalnızca iki örgü gözünü ayıran r uzaklığına bağlı olduğu kabul edilmektedir. Bu kabul r'nin değeri kümeni boyutlarından küçük ise geçerlidir. Bir fraktal kümenin korelasyon yoğunluk fonksiyonu

$$C(r)=Ar^{-\alpha} \quad (5.5)$$

r'nin bir kuvveti şeklinde deđiřir. Bu ifadedeki A bir sabit,  $\alpha$  ise yođunluk korelasyon fonksiyon üs deđeri olup log-log grafiđinden lineer regresyon kullanılarak hesaplanan ( $\log(C)$ 'nin  $\log(r)$ 'ye karřı grafiđi) eđim deđeridir. Dolayısı ile korelasyon yođunluk fonksiyon üs ile fraktal boyut arasında

$$D_f = d - \alpha \quad (5.6)$$

iliřkisi vardır. Burada  $d=2$  deđerlini alan Öklid boyutudur.

Ayrıca fraktal boyut kritik üs ile karřılařtırmak için farklı yöntem kullanılarak hesaplanabilir. Bir küme kapalı kare örgüyü tamamen parçacıklar ile doldurulmuř ise boyutu Öklid boyutu  $d$  ile tanımlanır. Bu durumda Öklid boyutu  $d=1, 2, 3...$  gibi tam sayı deđerleri alır. Bir küme en uç durumda kendine ait içinde bulunduđu uzayı tamamen dolduramadıđından dolayı kümenin fraktal boyutu  $D_f$ , içinde bulunduđu uzay Öklid boyutu  $d$  den küçük yani  $D \leq d$  iliřkisini sađlamak zorundadır.

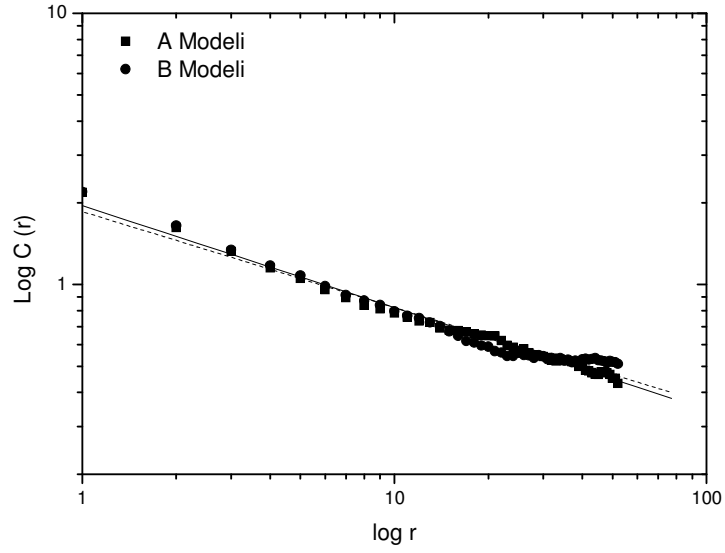
Bir tanecik kümesinin fraktal boyutu hesaplamada kullanılan metotlardan biri, kütle-yarıçap (mass-radius) oranı yöntemidir. Kümeye ait taneciklerin merkezi çekirdekten küme çevresine dođru radyal  $r$  yarıçaplı bölge içinde  $N(r)$ 'deki dolu gözler sayısı belirlenir. Böylece fraktal boyut deđeri

$$N(r) \sim (1/r)^{D_f} \sim r^{-D_f} \quad (5.7)$$

bađıntısının log - log grafiđinin ( $\log N$ 'nin  $\log 1/r$ 'ye bađlı deđiřim grafiđi) lineer regresyon yöntemi kullanılarak dođruyu temsil eden veri dađılımı için hesaplanan eđimi fraktal boyutu  $D_f$  verir. Dolayısı ile (5.5) ve (5.7) eřitlikleri, fraktal karakterli kümeleri tanımlamak için iki bađımsız ifade olup, (5.6) denklemini sađlaması gerekir. Őekil 5.2'de Lineer örgü boyutu  $L=4.10^2$  nokta



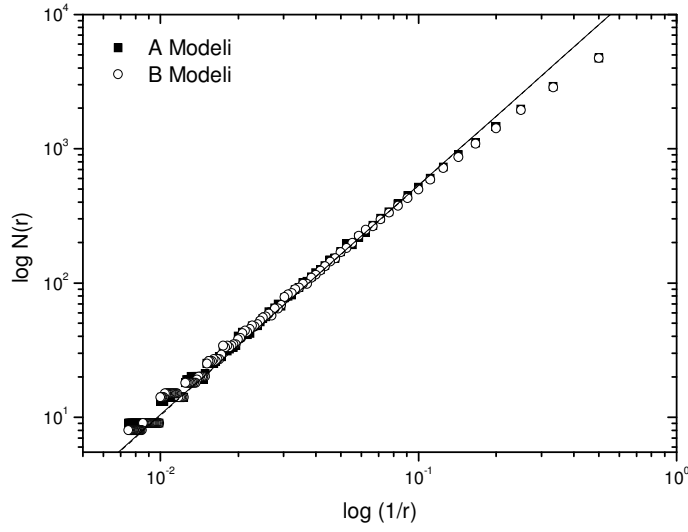
birimli  $N=10^4$  tanecikli küme temsillerinin korelasyon yoğunluk fonksiyonunun radyal yarıçapa bağlı logaritmik değişimi göstermektedir. Kritik üs random hareketli taneciklerin oluşturduğu kümelerin yoğunluk korelasyon fonksiyonunun radyal yarıçapa bağlı logaritmik grafikte 1-52 arası lineer regresyon uygulanarak  $\alpha=0.376\pm 0.005$  ve balistik hareketli tanecikler için ise  $\alpha=0.353\pm 0.011$  olarak hesaplandı.



**Şekil 5.2** Lineer örgü boyutu  $L=400$  nokta birimli  $N=10000$  tanecikli küme temsillerinin korelasyon yoğunluk fonksiyonunun radyal yarıçapa bağlı değişimi.

Random ötelemeli yörüngeye sahip DLA modeli tanecikleri ile üretilen küme temsillerine ait kritik üs  $\alpha=0.343\pm 0.001$  olarak T. A. Witten ve L. M. Sander tarafından hesaplanmıştır[13]. Ayrıca küme temsillerinin fraktal boyut değerleri sırası ile model A için  $D_f=1.709\pm 0.154$  ve model B için ise  $D_f=1.711\pm 0.014$  olarak hesaplanmıştır. Şekil 5.3'de küme temsillerinin parçacık sayısı  $N(r)$ 'nin radyal yarıçap  $r$ 'ye bağlı logaritmik grafikleri gösterilmektedir. DLA random hareketli tanecikleri için fraktal boyut değeri

$D_f \sim 1.71$  civarındadır. Bu çalışmada hazırlanan algoritmalara ait kritik üs  $\alpha$  ve fraktal boyut  $D_f$  değerleri, literatürde üretilen DLA modeli kümeleri değerleri ile uyumlu olduğu gözlenmektedir. Böylece, hazırlanan algoritma geçerli, Monte Carlo simülasyonu tekniğiyle küme temsilleri üretilebilir ve morfolojik geçişleri belirlemek amacı ile uygun olabilir.



**Şekil 5.3** Lineer örgü boyutu  $L=400$  nokta birimli  $N=10^4$  parçacıklı küme temsillerinin  $N(r)$  nin  $r$  bağlı logaritmik değişimi.

Yapışma olasılığı  $t=1$  için random yürüyüşü ile oluşturulan küme temsillerinin fraktal boyut değeri  $D_f=1.71 \pm 0.02$  olarak elde edilmektedir. Bu değerler literatürle uyum içindedir.

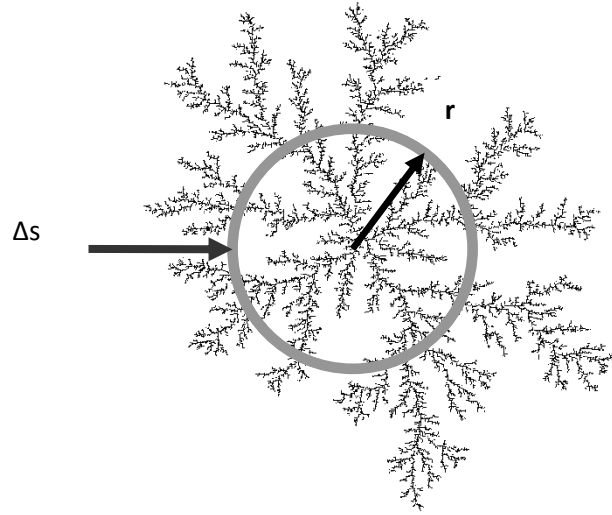
Küme temsillerinde morfolojik faz geçişlerini belirlemek için yapışma olasılık parametresi  $t$  olan kümeler için ölçekleme yöntemi kullanılarak nümerik hesaplamalar yapıldı. Üretilen küme temsilleri binary (1,0) olan BMP resim formatına dönüştürüldü. Siyah beyaz formattaki küme temsillerinin dolu ve boş hücreler için  $\rho(r)$  yoğunluğu

$$\rho(r) = \begin{cases} 1 & \text{dolu} \\ 0 & \text{boş} \end{cases} \quad (5.9)$$

alınarak hesaplama yapılmaktadır. Morfolojik faz geçişini belirleme her bir küme temsilinin iç bölgedeki ortalama radyal parçacık yoğunluğu hesaplanmaktadır. Ortalama radyal parçacık yoğunluğu  $\overline{\rho(r)}$  Şekil 5.4'de gösterildiği gibi merkezdeki çekirdek referans alınarak merkezden küme çevresine doğru

$$\overline{\rho(r)} \sim (\Delta n / \pi(r_j - r_i)^2) \quad (5.10)$$

yüzeyindeki tanecik sayısının yüzeye oranı olarak tanımlanmaktadır.



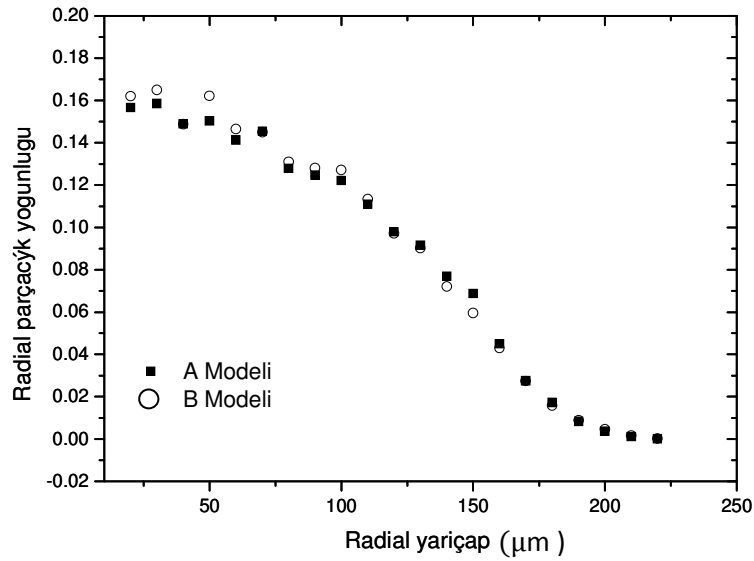
**Şekil 5.4** Lineer boyutu  $L=400$  nokta birimli kapalı kare örgüde  $N=10^4$  tanecikli standart ve radyal algoritma kullanılarak yapışma olasılık parametresi  $t=1$  için üretilen küme temsillerine ait tanecik yoğunluğunun radyal yarıçapa göre değişimi.

Burada  $(\Delta n)$ ,  $\Delta s = \pi(r_j - r_i)^2$  yüzeyi üzerindeki tanecik sayısını göstermektedir. Küme morfolojisi yapışma olasılık parametresi  $0.5 < t \leq 1$  değerleri arasında asimptotik olarak fraktal beklendiğinden parçacık yoğunluğu yarıçapın artış değerinde limit değere ulaşmak zorundadır. Böylece radyal parçacık yoğunluğu

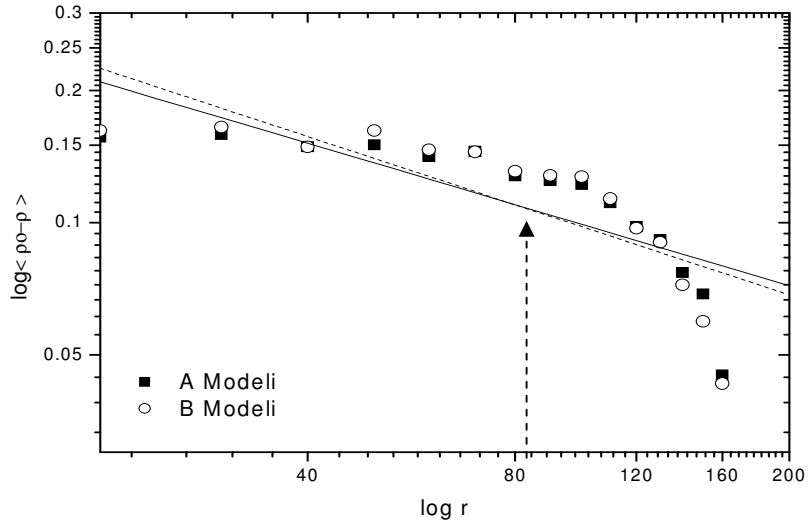
$$\overline{\rho(r)} = \rho_0 + Ar^{-\gamma} \quad (5.11)$$

denklemini kullanılarak hesaplanmaktadır. Burada  $\rho_0$  kümenin bağıl parçacık yoğunluğu,  $\gamma$  ise kümenin fraktal boyut ile orantılı evrensel bir kritik üs değeridir. Şekil 5.5'de yapışma olasılık parametresi  $t=1$  değerine göre  $\bar{\rho} - \rho_0$ 'ın yarıçapa bağlı değişimi, Şekil 5.6'da ise ortalama parçacık yoğunluk değişiminin  $\bar{\rho} - \rho_0$ , yarıçap  $r$ 'ye göre logaritmik değişimi gösterilmektedir. Ayrıca genelleştirilmiş A modelinden B modeline geçiş yarıçapı kesik çizgiler ile radyal yarıçap eksenine dik şekilde gösterilmektedir.  $\rho_0$  yoğunluğu en geniş doğrusal veri dağılımını temsil eden aralık için lineer regresyon metodu kullanılarak hesaplanmaktadır. Küme üzeri hesaplamalarda aktif bölgeden kaçınmak için kümenin radyal tanecik yoğunluğu, kümenin radyal yarıçapının yarısı alınarak hesaplanmaktadır. Ayrıca, çekirdek etkini ihmal etmek için radyal parçacık yoğunluğu  $10 < r$  dikkate alınmaktadır. Morfolojik faz değişimi belirlemek için yapışma olasılık  $t=1, 0.7, 0.5, 0.3, 0.1, 0.09, 0.07, 0.05, 0.03, 0.01, 0.009, 0.007, 0.005$  ve  $0.003$  parametresine göre lineer örgü boyutu  $L=4 \cdot 10^2$  nokta birimli kapalı kare örgüde, merkezi çekirdek etrafında  $N=10^4, 10^5, 10^6$  parçacık sayılı A ve B modeli kullanılarak birbirinden bağımsız yedi farklı temsilleri elde edilmektedir. Yaklaşık 1500 civarında farklı morfolojik tapılı küme temsili üretilmekte ve kümeyi tanımlayan parametre değerleri ortalama üzerinden hesaplanmaktadır. İstatistiksel yorumlama için küme sayısı yeterlidir. Tipik A ve B modelleri küme temsilleri Şekil 5.7 ve Şekil 5.8'de gösterilmektedir. Kümeler incelendiğinde merkezi çekirdekten çıkan beş ana saçak, ana dala eklemli alt dallar ve alt dallara eklemli diğer alt saçaklar yapısında olduğu gözlemlenmektedir. Düşük tanecik yoğunluklu

yapıdadırlar. Yapı düzensiz, ancak kendi içinde simetrik ya da yarı simetrik özellik göstermektedir. Küme temsillerinde merkezi çekirdekten dışa ana dallar, bu ana dallara eklemli alt dallar ve bu dallara eklemli ince saçaklardan oluşmaktadır. A ve B modellerinde yapışma olasılık parametresi  $t < 0.3$ 'de kritik bir değişim gözlenmektedir. A modeli küme temsillerinde dallar yoğun bir şekilde kalınlaşırken, B dekiler gözenekli yapıyla birbirine eklemli daha geniş yüzeye yayılmaktadır. Yapışma olasılık parametresi  $t < 0,09$  değerindeki küme morfolojileri nerede ise birbirinin benzeri, sıkı ve yoğun yapıları "Eden modeli" ile temsil edilen kümeler ile benzer özellik göstermektedir.

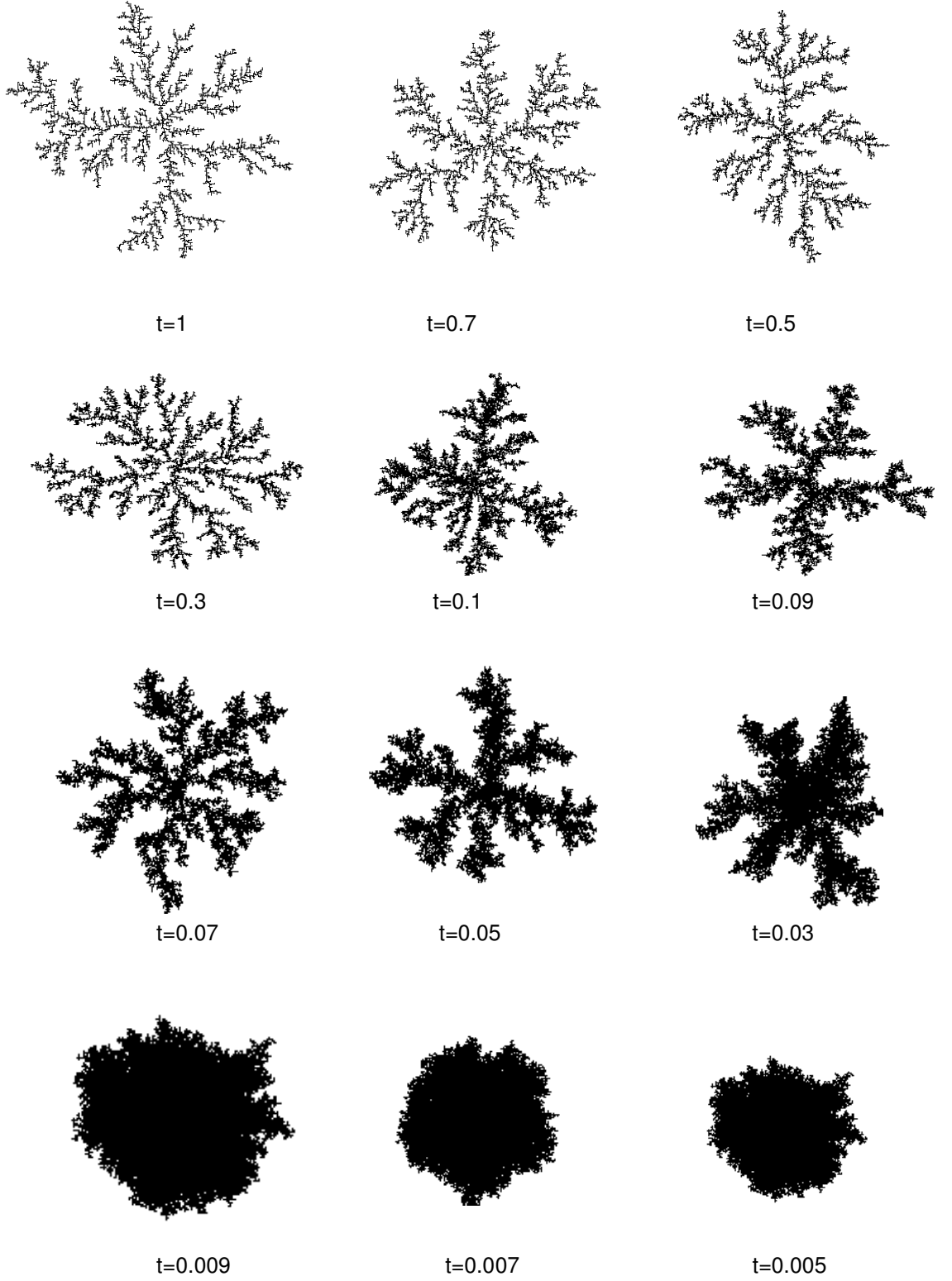


**Şekil 5.5** Lineer boyutu  $L=400$  nokta birimli kapalı kare örgüde  $N=10^4$  tanecikli A ve B modeli algoritması kullanılarak yapışma olasılık parametresi  $t=1$  için üretilen küme temsillerine ait tanecik yoğunluğunun radial yarıçapa göre değişimi.

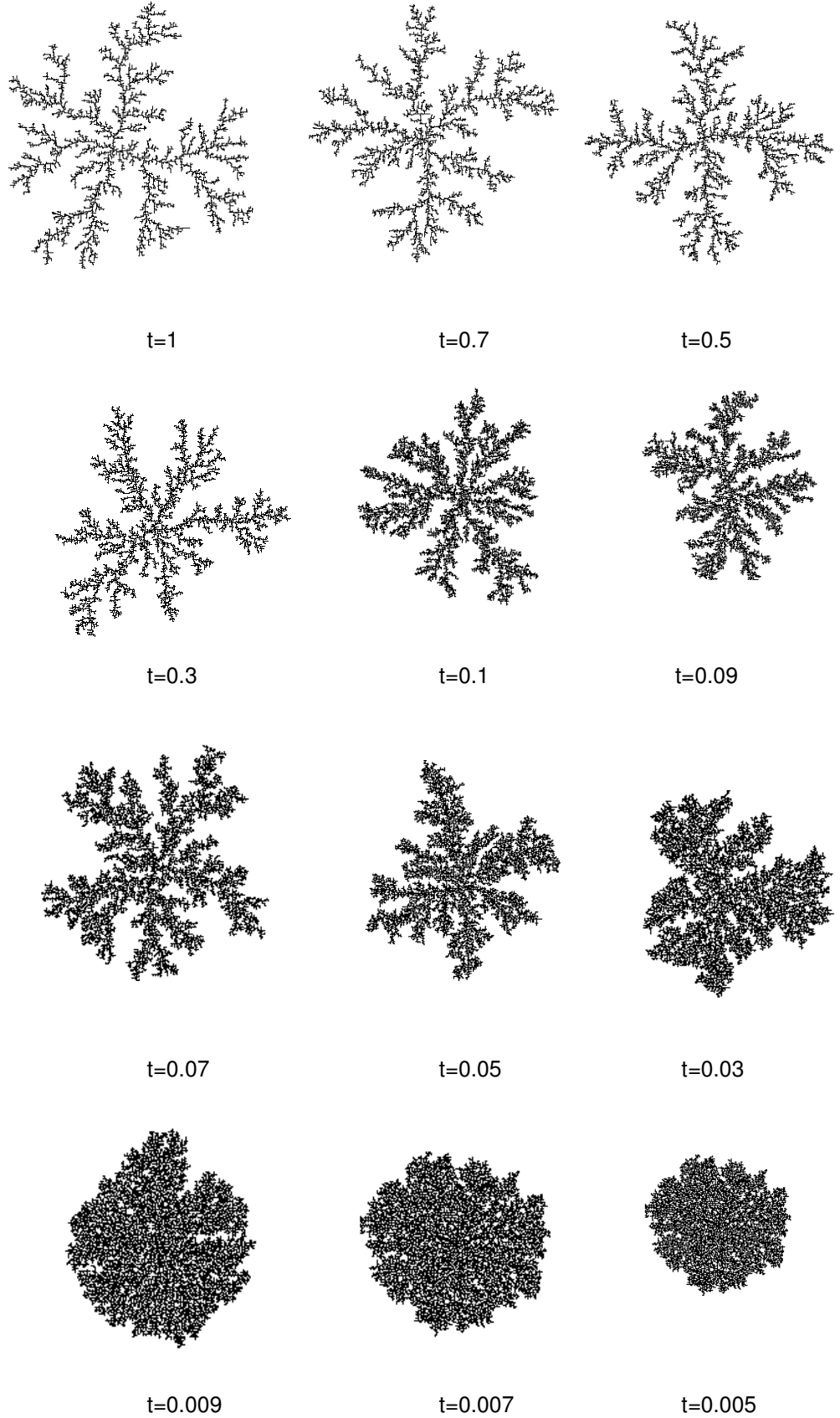


**Şekil 5.6** Lineer boyutu  $L=400$  nokta birimli kapalı kare örgüde  $N=10^4$  tanecikli A ve B modeli algoritma kullanılarak yapışma olasılık parametresi  $t=1$  için üretilen küme temsillerine ait tanecik yoğunluğunun radyal yarıçapa göre logaritmik değişimi.

Keyfi yapışma olasılık parametresi  $t$  değeri ile üretilen küme temsillerinde morfolojik farklılıkları belirlemek için kritik üs değeri her küme için hesaplandı. Denklem (5.11) denkleminde yararlanarak  $\log(\rho(r)-\rho_0) / \log r$  grafiğinden kritik üs  $\gamma$  değerini her bir yapışma olasılık parametresi için elde edilmiştir. Bulunan kritik üs değeri  $\gamma$  ile yapışma olasılık parametresi  $t$ 'ye bağlı değişimi Şekil 5.7'de gösterilmektedir. Yapışma olasılık parametresi  $t=1$  için her iki algoritmaya göre üretilen küme temsillerinin kritik üs değerleri Tablo 5.1'de sunulmaktadır.



**Şekil 5.7** Lineer boyutu  $L=4 \cdot 10^4$  nokta birimli kapalı kare örgüde  $N=10^4$  tanecikli standart algoritma kullanılarak üretilen küme temsilleri.



**Şekil 5.8** Lineer boyutu  $L=4 \cdot 10^4$  nokta birimli kapalı kare örgüde  $N=10^4$  tanecikli radyal algoritma kullanılarak üretilen küme temsilleri.



A ve B modeli algoritması ile üretilen küme temsillerinin bağlı parçacık yoğunluğu  $\rho_0=0.063$  değerindedir. Radyal parçacık yoğunluğuna ait ölçekleme kritik üs değerleri ve bağlı tanecik yoğunluğu Tablo 5.1'de sunulmaktadır.

**Tablo 5.1** A ve B modeli küme temsilleri için radyal parçacık yoğunluğuna ait ölçekleme ile hesaplanan kritik üs ve fraktal boyut değerleri.

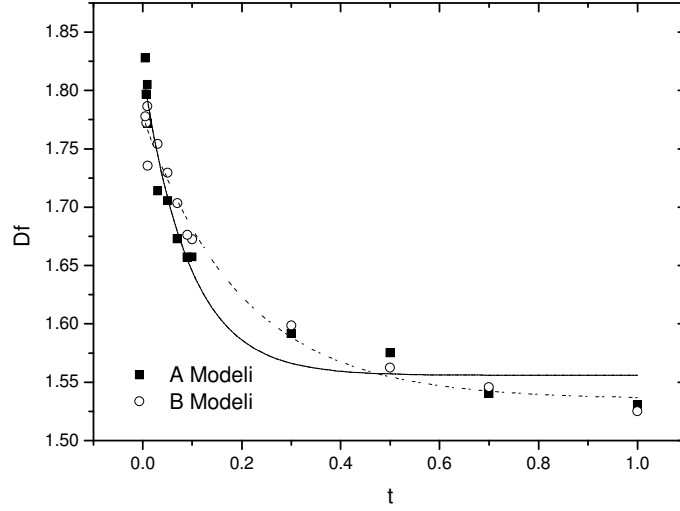
	Bağlı yoğunluk( $\rho_0$ )	Kritik üs ( $\gamma$ )	Fraktal Boyut ( $D_f$ )
A Modeli	0.063	0.515±0.106	1.709±0.154
B Modeli	0.063	0.464±0.096	1.711±0.014

Her iki model kullanılarak üretilen küme temsillerinde tanecik sayısı çekirdek tanecik hariç olmak üzere sabit  $N=10^4$  alındı. Dolayısı ile bağlı tanecik yoğunluğu  $\rho_0=0.069$  olarak hesaplandı. Yapışma olasılık parametresi  $t$  değeri küçüldüğünde kümelerin işgal ettiği alan küçülerek dairesel bir yapıya dönüştüğü gözlemlendi.

Fraktal boyut  $D_f$  ile yapışma olasılık parametresi  $t$  arasındaki ilişki nümerik olarak üstel bir fonksiyon ile çözümlendi. Bu amaç ile A ve B modeli kullanılarak bir birinden bağımsız yedi farklı küme temsili üretildi. Bunların fraktal boyut ortalamaları hesaplanarak  $D_f$ 'nin  $t$ 'ye bağlı değeri Şekil 5.9'da gösterilmektedir. Bu A ve B modeline ait dağılım üstel birinci düzen fonksiyonuna göre fit edildi. Böylece

$$D_f = D_{f(0)} + Ae^{-(t/k)} \quad (5.12)$$

bağıntısı ile tanımlanabilir. Burada  $D_{f(0)}$ ,  $t=1$  ile elde edilen fraktal boyut değeri A ve k veri dağılımını tanımlayan sabitlerdir. Nümerik çözümünün parametreleri Tablo 5.2'de sunulmaktadır.



**Şekil 5.9** A ve B modeli küme temsilleri için  $D_f$ 'nin  $t$ 'ye bağlı dağılımı ve birinci derecen üstel regresyon eğrileri.

**Tablo 5.2** A ve B modeli küme temsilleri için  $D_f$ 'nin  $t$ 'ye bağlı birinci derecen üstel regresyon değerler.

	$D_{f(0)}$	A	k	$R^2$
A Modeli	$1.555 \pm 0.010$	$0.259 \pm 0.015$	$0.093 \pm 0.014$	0.9667
B Modeli	$1.535 \pm 0.010$	$0.242 \pm 0.011$	$0.197 \pm 0.030$	0.980

A ve B modeli ile üretilen küme temsillerini fraktal boyut ve kritik üs değerleri ve morfolojik görünümleri referans alınarak sekiz farklı grupta incelemek mümkündür.

Radyal tanecik yoğunluğuna ait kritik üs  $\gamma$  hesaplanırken, güç–yasa (power-law) rejimi  $r > 10$  için geçerli olduğu gözlenmektedir. Çünkü çekirdek sabit ve numune yüzeyindeki örkü kusurlarının olduğu bölge olarak

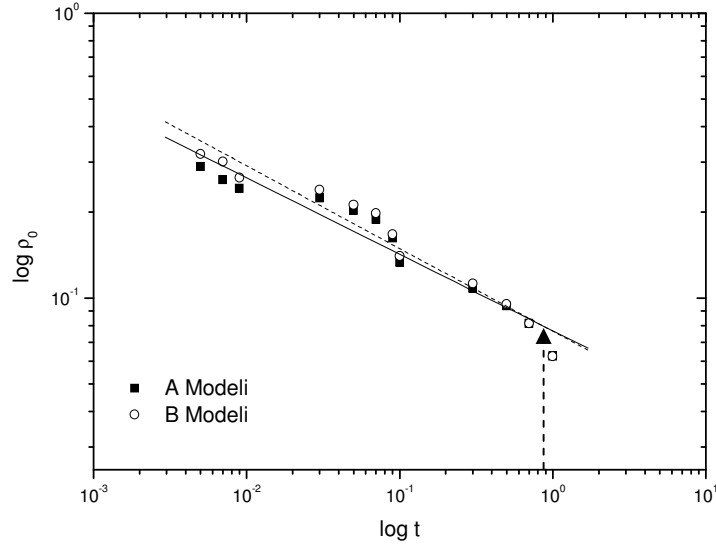
tanımlanabilir. Asimptotik radyal tanecik yoğunluğu  $\rho_0$  ve  $\gamma$  üs değeri t'nin bir fonksiyonu olarak davranmaktadır. Böylece

$$\rho_0 \sim t^{-\beta} \quad (5.12)$$

ilişkisini gösterdiği kritik nokta bir düzen parametresi olarak davranmaktadır. Burada  $\beta$  ölçekleme ile hesaplanan kritik bir üs değeridir. Yapışma olasılık parametresi t değeri azalırken küme temsilinin kapladığı alan küçülmekte olduğu gözlenmektedir. Kapalı kare örgüyü yaklaşık tamamen dolduracak küme temsilini üretmek için tanecik sayısı arttırılmaktadır. t=1'de ortalama  $N=10^4$  tanecik,  $L=4.10^2$  nokta birimli kapalı kare örgüyü yerleşirken, t=0.003'da ortalama  $10^5$  tanecik kapalı kare örgüye yerleştirilebildiği gözlendi.

Denklem (5.9)'daki ölçekleme yöntemi ve Denklem (5.12) kullanılarak kritik üs  $\beta$  değerleri hesaplandı. Şekil 5.9, bağıl tanecik yoğunluğu  $\rho_0$  değerinin yapışma olasılık parametresi t değerine bağlı logaritmik değişimini göstermektedir.

A ve B modeli algoritma kullanılarak sırası ile  $L=4.10^2$  lineer kapalı kare örgü boyutlu kümeler için kritik üsler  $\beta=0.268\pm 0.022$  ve  $\beta=0.290\pm 0.021$  değerleri hesaplanmıştır. Bu değerler, random hareketli genelleştirilmiş A ve B modeli parçacıkları için referansla yer alan değerler ile uyumludur. Bununla birlikte bu yaklaşım yavaş ve sapmadan bağımsız olarak kritik üs değeri ile birlikte güç yasasında bir azalmayı ifade etmektedir. Şekil 5.10'da A ve B modeli için bağıl parçacık yoğunluğunun bütün yapışma olasılık parametrelerine ( $0 < t \leq 1$ ) göre değişiminden yararlanılarak  $\beta$  kritik üs eğim değeri hesaplanmaktadır.

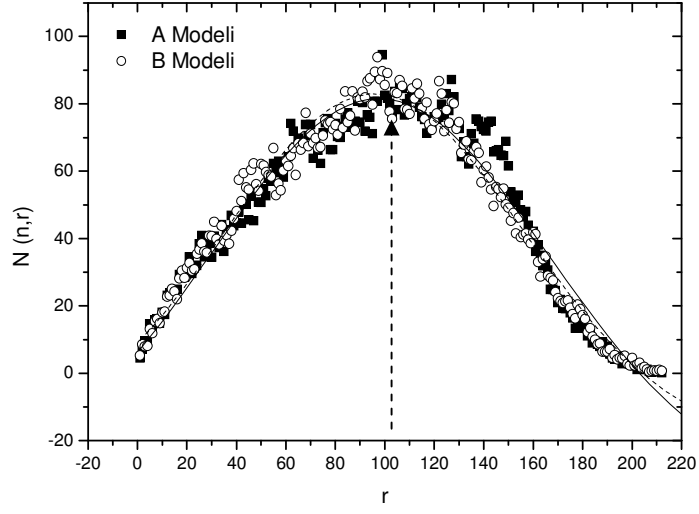


**Şekil 5.10** Radyal tanecik yoğunluğu  $\rho_0$ 'ın t'ye göre değişimi sonucu  $\beta$  değerlerinin değişimi

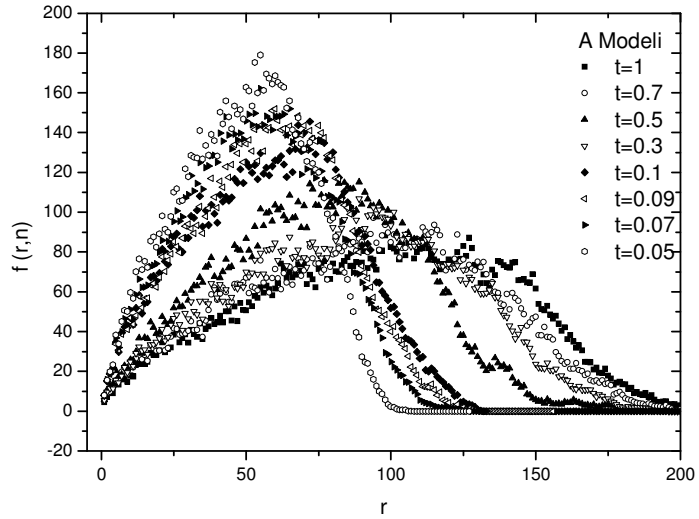
A ve B modeli ile üretilen küme temsillerinde radyal parçacık dağılımı, merkezi çekirdekten küme çevresine doğru bir Gauss dağılımı ile temsil edilebilir. Böylece,  $r=1$  den  $r=R$  ye kadar radyal parçacık dağılımı

$$f(r, n) = f(r_0, n_0) + \frac{a}{\xi\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-b\left[\frac{r-r_G}{\xi}\right]^2\right\} \quad (5.13)$$

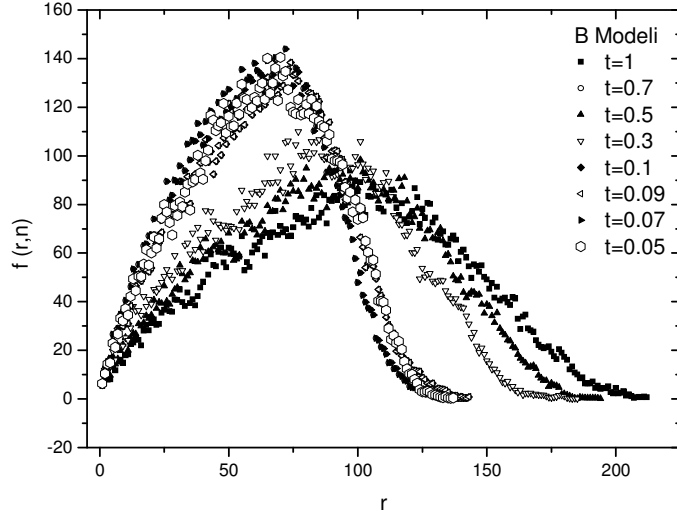
bağıntısı ile tanımlanabilir. Burada  $f(r_0, n_0)$ , parçacık dağılımına çekirdek taneciğin katkısı  $\xi$  dağılım genişliği ve  $r_G$  jirasyon yarıçapıdır. Lineer boyutu  $L=4.10^4$  nokta birimli kapalı kare örgüde  $N=10^4$  tanecikli A ve B modeli küme temsillerinin radyal tanecik dağılımı Şekil 5.10'da gösterilmektedir. Ayrıca Şekil 5.11'de A modeline, Şekil 5.12'de ise B modelinin parçacık dağılım grafikleri gösterilmektedir.



**Şekil 5.11** A ve B modelleri ile yapışma olasılık parametresi  $t=1$  için üretilen küme temsillerine ait radyal parçacık dağılımı



**Şekil 5.12** A modeli ile farklı yapışma olasılık parametresine göre üretilen küme temsillerine ait radyal parçacık dağılımı.

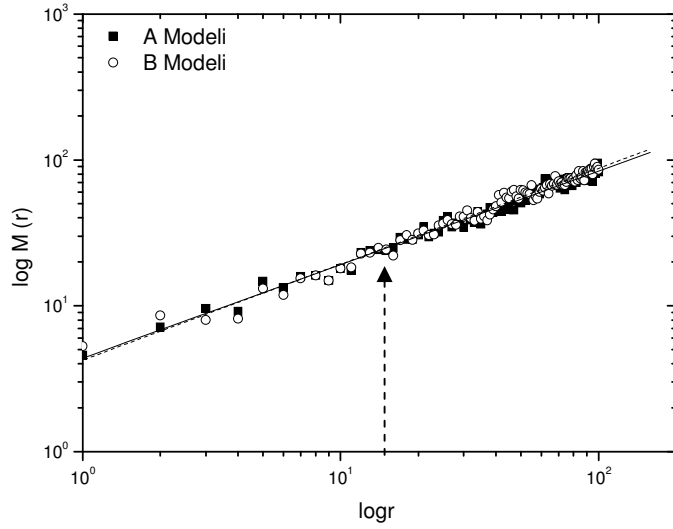


**Şekil 5.13** B modeli ile farklı yapışma olasılık parametresine göre üretilen küme temsillerine ait radyal parçacık dağılımı.

Küme temsillerinde yaklaşık tanecik dağılımı  $r_G$  değerine kadar artarken  $r_G$  değerinden sonra azalmaya başlamaktadır.  $r < r_G$  çaplı bölgede parçacık konumları sabitlenerek pasif bölge temsil edilmektedir.  $r_G > r$  bölgesi ise aktif bölge olup taneciklerin artma olasılığı daha yüksektir.  $t=1$  değerli küme temsillerinin dağılım parametrelerini belirlemek için birbirinden bağımsız yedi tanecik kümesi üretilmekte ve tanecik dağılımı Gaussian regresyon sırası ile A modeli kümeleri için  $\xi_A = 136.05 \pm 6.55$  ve  $r_{G(A)} = 97.82 \pm 0.49$ , B modeli küme temsilleri için  $\xi_B = 121.10 \pm 3.55$  ve  $r_{G(B)} = 95.73 \pm 0.39$  değerleri hesaplanmaktadır. Bu değerler izafi değerler olup kümenin oluşum parametrelerine göre değişmektedir. Ancak A ve B modeli kümelerde  $r < r_G$  bölge için yapışma olasılığına bağlı değişimi bir üstel bir yasa ile tanımlanabilir. Böylece pasif bölgedeki parçacık niceliğinin değişimi  $M(r) \sim r^D$  ilişkine sahiptir.

A ve B modelleri arasında morfolojik geçiş denklem (5.1) ve (5.2) geçit yarıçapı  $\xi$  ile karakterize edilebilir. Orijinde merkezleşmiş  $r$  yarıçaplı

daire alanı tarafından sınırlandırılmış bir bölge içinden küme çevresine doğru  $M(r)$  parçacık sayısı hesaplanmaktadır.  $M$  ve  $r$  eğrileri A ve B modeli benzeri ölçekleme rejimleri arasında çok ince geçişi göstermektedir. Şekil 5.14'da bu geçişin bir örneği sunulmaktadır.



**Şekil 5.14** A ve B modelleri ile üretilen  $t=1$  değerli kümelerinde yarıçapa bağlı kütle değişimi.

Küçük uzunluk ölçkleri için DLA da olduğu gibi büyüyen model numune ve geçit  $\xi$  değerini hesaplamak için Denklem (5.7)'de olduğu gibi  $M(r) \sim r^{D_f}$  eğrisi  $r/2$  yarıçapı referans alınarak lineer regresyon ile eğimi hesaplanmaktadır. Denklem (5.7)'de tanımlanan çekirdekte dışarı doğru mevcut olan parçacık sayısı  $N(r) \sim M(r)$  küme kütlesi ile doğru orantılıdır. Burada Öklid örgü boyutu  $d=2$  ve kapalı kare örgüyü tamamen dolduramayan DLA küme temsillerinin fraktal boyutu  $D_f \sim 1.71$  ilk ve son eğri bölgeleri kullanılmaktadır. Bu yöntem ile elde edilen geçiş uzunlukları Şekil 5.14'de olduğu gibi geçiş noktasından uzaklığın bir fonksiyonu olarak çizilmektedir. A ve B modelleri DLA benzeri yapılar olduğundan morfolojik geçit  $\xi \sim P^{-1} \sim t^{-1}$  ile

yakınsamaktadır. Böylece  $\xi$  uzaklığı bir güç-yasa ile yapışma olasılık parametresi  $t$  arasında

$$\xi \sim |t|^{-\gamma} \quad (5.14)$$

ilişkisi ile tanımlanır. Burada  $\gamma = 0.61$  değeri  $t=1$  de yakınsamaktadır. Üstelik kritik noktada küme temsilindeki kütle miktarı ise

$$M_\xi \sim |t|^{-\alpha} \quad (5.15)$$

bağıntısı ile tanımlanabilir. Burada sırası ile A modeli için  $\alpha = 0.641 \pm 0.009$  ve B modeli için  $\alpha = 0.657 \pm 0.008$  değerlerinde  $t=1$  de yakınsamaktadır. Burada  $\alpha=0.97$  değerli küme kütlesi  $M_\xi$ 'nin yapışma olasılık parametresi  $t$  arasındaki ilişkiyi tanımlayan bir kritik üs değeridir. Böylece denklem (5.11) kullanıldığında farklı geçitte ortalama yoğunluk ile yapışma olasılık parametresi arasında

$$\bar{\rho}_\xi = A_1 |t|^\beta + A_2 |t|^{\nu\gamma} \quad (5.16)$$

ilişkisi vardır. Burada  $A_1$  ve  $A_2$  üretim parametrelerine ait birer sabittir. Fakat bir geçitte ortalama parçacık yoğunluğu

$$\bar{\rho}_\xi \sim M_\xi / (\xi^2) \sim |t|^{2\nu-\alpha} \quad (5.17)$$

bağıntısı ile tanımlanabilir. Böylece denklem (5.16) ve (5.17) kullanılarak ölçekleme ilişkileri

$$\beta = \nu\gamma \quad \text{ve} \quad \beta = 2\nu - \alpha \quad (5.18)$$

şeklinde tanımlanabilir. Bu değerler birbirinden bağımsız iki kritik üsleridir.  $L=4.10^2$  nokta birimli  $N=10^3$  kapalı kare örgü de sırası ile A modeli için  $\beta=0.26$  B modeli için  $\beta=0.29$  ve  $2\nu-\alpha = 0.25$  değerleri hesaplanmıştır.



Ayrıca A ve B modeli ile üretilen küme temsillerini doğal manyezit cevheri yüzeyinde oluşmuş mangan dendritleri (Örnek-1), deneysel üretim değerleri 0.01M, 2.6V (Örnek-2) ve 0.06M, 10V potansiyel altında çinko sülfat çözeltisi ile üretilen çinko metali küme kümeleri ile karşılaştırılmaktadır. Bu amaç ile küme resimleri bilgisayar ortamına taşınmakta ve bu resimler BMP formatına dönüştürülerek karelenmektedir. Böylece mangan dendrit ve çinko metali kümelerinin bağıl parçacık yoğunluğu  $\rho_0$ , radyal parçacık yoğunluğu kritik üs değeri  $\gamma$ , bu kümelere ait yapışma olasılık parametresi  $t$  ve fraktal boyut  $D_f$  değerleri hesaplanmıştır. Sonuçlar Tablo 5. 3 de sunulmaktadır.

**Tablo 5. 3** Doğal mangan dendritleri (örnek-1), farklı üretim değerlerine göre çinko kümelerine ait (Örnek-2, Örnek-3), bağıl tanecik yoğunluğu, kritik üs, olasılık parametresi ve fraktal boyut ve değerlerinin karşılaştırılması.

	Bağıl yoğunluk ( $\rho_0$ )	Kritik üs ( $\gamma$ )	Olasılık ( $t$ )	Fraktal Boyut ( $D_f$ )
Örnek-1	0.063	1.181±0,005	0.119	1.630
Örnek-2	0.157	0.651±0,026	0.158	1.602
Örnek-3	0.092	0.669±0,034	0.292	1.624

Monte Carlo simülasyon tekniği ve DLA algoritması referans alınarak tanımlanan A ve B modelleri kullanılarak üretilen küme temsilleri ile reel sistemdeki kümelerin ölçekleme nicelikleri uyum göstermektedir.

## 6. SONUÇ

Bu tez çalışmasında, Monte Carlo simülasyon tekniğiyle DLA kümeleşme modeli algoritması kullanılarak kristal büyümede morfolojik yapı farklılıkları ve morfolojik geçişler incelendi. Algoritma değiştirilerek yeni A ve B Modelleri tanımlanarak, farklı simülasyon değerleri ile küme temsilleri üretildi. Bunların istatistiksel ve geometrik nicelikleri hesaplandı. Modeller morfolojik olarak kendi içinde, birinden diğerine morfolojik geçiş geometrik açısından ve kümeyi tanımlayan parametre değerlerine göre karşılaştırıldı. Ayrıca çinko ve mangan bileşiklerinin kümeleşme mekanizmaları tartışıldı. Böylece Petri kabında üretilen çinko kümeleri A modeli, doğal mangan dendritlerinin morfolojisini B modeli ile açıklamak mümkündür.

## KAYNAKLAR

[1] Kepler, J., De Nive Sexangula godfrey Tampach (Frankfurtham Main),1611.

[2] Langer, J.S., "Instability and Pattern Formation in Crystal Growth", Rev. Mod. Phys., 52, (1980) 1.

[3] Langer, J.S., Müller-Krumbhaar, H., "Theory of Dendritic Growth – I. Elements of Stability Analysis", Acta Metallurgical, 26, (1978) 1681-1687.

[4] Langer, J.S., Müller-Krumbhaar, H., "Theory of Dendritic Growth – II. Instabilities in Limit of Vanishing Surface Tension", Acta Metallurgica, 26, (1978) 1689-1695.

[5] Bayirli, M., "The Geometrical Approach of the Manganitive Compound Deposition on the Surface of Manganisite Ore", Physica A, 353, (2005) 1-8.

[6] Bayirli, M., Kockar, H., "A Numerical Application Using Diffusion – Limited Aggregation for the Manganese Dendrites", Zeitschrift for Natuforschung Section A-A Journal of Physical Sciences, 6510, (2010) 777-780.

[7] Chopard, H., Herrmann, H.J., Vicsec, T., "Sturacture and Growth Mechanism of Mineral Dendrites", Nature, 353, (1991).

[8] Garcia-Ruiz, J., Otalora, F., Sanches-Navas, A., Higes-Rolando, F.J., "The Formation of Mangane Dendrites as the Mineral Record of Flow Structures", Newyork (1994),p.307.

[9] Kockar, H., Bayirli, M., Alper, M., "A New Example of the Diffusion – Limited Aggregation: Ni-Cu Film Patterns", Applied Surface Science, 2569, (2010) 2995-2999.

[10] Viscek, T., "Fractal Growth Phenomena", World Scientific, (1989) 140-145.

[11] Stauffer, D., "Scaling Theory of Percolation Clusters", Physics Reports, 54, (1974) 1-74.

[12] Eden, M., In Proceedings of the Fourth Berkeley, "Symposium on Mathematical Statistics and Probability", Edited by F. Neyman, Vol. 4, (1999) (University of California Press, Berkeley).

[13] Witten T.A., Sender, L.M., "Diffusion Limited Aggregation, A Kinetic Critical Phenomenon", Phys. Rev. Lett., 47, (1981) 1981-1403.

[14] Witten, T.A., Sender, L.M., "Diffusion Limited Aggregation", Phys. Rev. B., (1983) 5686.

[15] Halsey T.C., "Diffusion Limited Aggregation as Branched Growth", 72, (1994) 1228.

[16] Lopez Salvas, M.Q., Saues, F., Claret, J., Bassas, J., "Fingering Instability in Thin-Layer Electrodeposition: General Trends and Morphological Transitions", Journal of Electroanalytical Chemistry, 421, (1997) 205-212.

[17] Ferreira, S.C., Alves, S.G., Faissal Brito, A., Moreira, J.G., Morphological Transition between Diffusion-Limited and Ballistic Aggregation Growth Patterns, (2006) 156-158.

- [18] Xiao Jun Xu, Ping Gen Cai, Quan Lee Ye, A.Gen Xia, Gao Xiang Ye, "Effects of Long Range Magnetic Interactions on DLA Aggregation", Phys. Lett.A 338 (2005) 1-7
- [19] Ivenenko, Y.V., Lebovka, N.I., Vygornitskii, N.V., "Eden Growth Model for Aggregation of Charged Particals", Eur. Phys. J.B., 11, (1999) 469-480.
- [20] Mizuseki, H., Tanak, K., Ohno, K., Kawazoe, Y., "A New Crystal Growth Model Bosed on a Stochastic Method Under an External Field", Modeling Simul. Mater Sci. Eng., 8, (2000) 1-11.
- [21] Ausloos, M., Vandewalle N., Cloots, R., "Magnetic Eden Model", Europhys. Lett., 24, (1993) 629-634.
- [22] Ausloos, M., Vandewalle, N., "Magnetic Diffusion Limited Aggregation", Phys. Rev. E., (1995) 597-603.
- [23] Mansur Filho, J.C., Silva, A.G., Carvalho, A.T.G., Martins, M.L., "Electrocrystallization Under Magnetic Fields: Experiment and Model", Physica A, 350, (2005) 393-406.
- [24] Gurin, V.S., Poroshkov, V.P., "Off-lattice Simulation of the Fractal Growth with Attractive Radial Drift and Mobility, Nonlinear Phenomena in Complex Systems", 3:1, (2000) 87-92.
- [25] Meakin, P., "Diffusion –Controlled Cluster Formation In 2-6 Dimension Space", Physical Review Letters 52(12), (1983) 1033-1036.
- [26] Sawada, Y., Hyosu, H., "Growth Velocity of Electrochemical Deposition and its Concentration Dependence", Physica D, 38, (1989) 299-303.

- [27] Matsushita, M., Sano, M., Hayakawa, Y., Honjo, H., Sawada, y., “Fractal Structure of Zinc Metal Leaves Grown by Electrodeposition”, *Phys. Rev. Lett.*, 53, (1984) 286-289.
- [28] Grier, D., Ben-Jacop, E., Clarke, R., Sender, L.M., “Morphology and Microstructure in Electrochemical Deposition of Zinc”, *Phys. Rev. Lett.*, 56, (1986) 1264-1267.
- [29] Niemeyer, I., Pietronero, L., Wiesmann, H.J., “Fractal Dimension of Dielectric Breakdown”, *Phys. Rev. Lett.*, 52, (1984) 1033-1036.
- [30] Li, B., Wang, J., Wang, B., Liu, W., Wu, Z., “Computer Simulations of Bacterial-Colony Formation”, *Europhys. Lett.*, 30 (4), (1995) 239-243.
- [31] Fujikawa, H., Matsushita, M., “Fractal Growth of Bacillus Subtilis on Agar Plates”, *Journal of the Physical Society of Japan*, 58 (11), (1989) 3875-3878.
- [32] Benguigui, L., A “Fractal Analysis of the Public Transportation System of Paris”, *Environment and Planning A*, 27, (1995) 1147-1161.
- [33] Iandiveri, G., Scalas, E., Levi, A.C., Gliozzi, A., “Morphologies in Two-Dimensional Growth with Attractive Long-Range Interactions”, *Physica A*, 273, (1999) 217-230.
- [34] Tan, Zhi-Jie at all., “Influence of external field on diffusion- limited aggregation”, *Physics Letters A*, (2000) 268, 112-116.
- [35] Vanderwalle, N., Ausloos, M., “Magnetic Diffusion – Limited Aggregation”, *Physical Review E*, 51, (1995) 597-603.

- [36] Meakin, P., , “Formation of Fractal Clusters and Networks by Irreversible Diffusion–Limited Aggregation”, *Physical Review Letters*, 51, (1983) 1119-1122
- [37] Kolb, M., Botet, R. And Julien, R., “Scaling of Kinetically Growing Clusters”, *Physical Review Letters*, 51, (1983) 1123-1126.
- [38] Meakin, P., “off-Lattice Simulations of Cluster – Cluster Aggregation in Dimensions 2-6”, *Physics Letters*, 107A, (1985) 269-272.
- [39] Niemeyer, L., Pietronero, L. Wiesmann, H.J., “Fractal dimension of Dielectric Breakdown”, *Physical Review Letters*, 52, (1984) 1033-1036.
- [40] Family, F., Masters, B.R., Platt, D.E., , “Fractal Pattern Formation in Human Retinal Vessels”, *Physica D*, 38, (1989) 98-103.
- [41] Kalampokis, A., Kotsavasiloglou, C. Argyrakis, P., Baloyannis S., , Robutsness in Biological Neural Networks, *Physica A*, 317, (2003) 581-590.
- [42] Grey, F., Kjems, J.K., , Aggregates, Broccoli and Cauliflower, *Physica D*, 38, (1989) 154-159.
- [43] Fujkawa, H., Matsushita, M., , “Fractal Growth of *Bacillus Subtilis* on Agar Plates”, *Journal of Physical Society of Japon*, 58, (1989) 3875-3878
- [44] Batty, M., Longley, P., Fotheringham,S., , Urban Growth and Form: Scaling, Fractal Geometry, and Diffusion–Limited Aggregation, *Environment and Planning A*, 21, (1989) 1447-1472.
- [45] Matsushita, M., Sano, M., Hayakawa,Y., Honjo, H., Savada,Y., , “Fractal Structures of Zinc Metal Leaves Grown by Electrodeposition”, *Physical Review Letters*, 53, (1984) 286-289.

- [46] Grier, D., Ben –Jacop, A., Clarke, R., Sander, L.M., “Morphology and Microstructure in Electrochemical Deposition of Zinc”, *Physical Review Letters*, 56, (1986) 1264-1267.
- [47] Sawada, Y., Dougherty, A., Gollup, J.P., “Dendritic and Fractal Patterns in Electrolytic Metal Deposits”, *Physical Review Letters*, 56, (1986), 1260-1263.
- [48] Argoul, F., Arneodo, A., Grasseau, G., Swinney, H.L., “Self-Similarity of Diffusion – Limited Aggregates and Electrodeposition Clusters”, *Physical Review Letters*, 61, (1988) 2558.
- [49] Li, G., Sander, L.M., Meakin, P., Comment on “Self-Similarity of Diffusion–Limited Aggregates and Electrodeposition Cluster”, *Physical Review Letters*, 63, (1989) 1322.
- [50] Sawada, Y., Hyosu, H., “Growth Velocity of Electrochemical Deposition and its Concentration Dependence”, *Physica D*, 38, (1989) 299-303.
- [51] Paterson, L., “Diffusion-Limited Aggregation and Two-Fluid Displacements in Porous Media”, *Physical Review Letters*, 52, (1984) 1621-1624.
- [52] Lenormand, R., “Applications of Fractal Concepts in Petroleum Engineering”, *Physica D*, 38, (1989) 230-234.
- [53] Maloy, K.J., Feder, J., Jossang, T., “Viscous Fingering Fractals in Porous Media”, *Physical Review Letters*, 55, (1985) 2688-1691.
- [54] Maloy, K.J., Boger, F., Feder, J., Jossang, T., Meakin, P., “Dynamics of Viscous-Fingering Fractals in Porous Media”, *Physical Review A*, 36, (1987) 318-324.



[55] Feder, J., Hinrichsen, E.L., Maloy, K.J., Jossang, T., "Geometrical Crossover and Self-Similarity of DLA and Viscous Fingering Clusters", Physica D, 38, (1989) 104-111.

[56] Couder, Y., Argoul, F., Arneodo, A., Maurer, J., Rabaud, M., "Statistical Properties of Fractal Dendrites and Anisotropic Diffusion-Limited Aggregates", Physical Review A, 42, (1990) 3499-3503.

[57] Mullins, W.W., Sekerka, R.F., "Morphological Stability of a Particle Growing by Diffusion or Heat Flow", Journal of Applied Physics, 34, (1963) 323-329.

[58] Mullins, W.W., Sekerka, R.F., "Stability of a Planar Interface During Solidification of a Dilute Binary Alloy", Journal of Applied Physics, 35,(1964) 444-451.

[59] Turan, Ş., "Difüzyonun iki Boyutlu Uzayda Cellular Automaton ile İncelenmesi", Doktora Tezi, (Fizik), Gazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, (1997) Ankara.

[60] Eken, M., "Üç Boyutlu Uzayda Dengede Olmayan Difüzyonun Cellular Automaton ile Simülasyonu", Doktora Tezi (Fizik), Gazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü,(1999) Ankara.

[61] Eken, M., Turhan, Ş., Aktekin, N., "Simulation of Diffusion on a Cellular Automaton in two-Dimensional Space", 2.İstatistik Fizik Günleri,(1995) İstanbul.

[62] Turhan, Ş., Eken, M., Aktekin, N., "Difüzyonun iki Boyutlu "Cellular Automaton"da Sistemik İncelenmesi", Türk Fizik Derneği, 15. Fizik Kongresi, (1995) Antalya.

[63] Turhan, Ş. Eken, M. Aktekin, N., "İki ve üç Boyutta Difüzyonun "Cellular Automaton" metodu ile Simülasyonu", 4. Ulusal Nükleer Bilimler ve Teknoloji Kongresi, (1996) İstanbul.

- [64] Eken, M., Turhan, Ş., Aktekin, N., "Simulation of nonequilibrium diffusion on a cellular automaton in three-dimensional Space", 3. İstatistik Fizik Günleri, (1996) İstanbul.
- [65] Eken, M., Turhan, Ş., Aktekin, N., "Effect of varying the rules for the cellular automaton of Chopard-Droz-Kolb for diffusion", 4. İstatistik Fizik Günleri, (1997) İstanbul.
- [66] Turhan, Ş., Eken, M., Aktekin, N., "Dynamical behaviour of diffusion on the cellular automaton of Chopard-Droz-Kolb", 4. İstatistik Fizik Günleri, (1997) İstanbul.
- [67] Çağınalp, G. Fife, P.C., 1986, "Phase-Field Methods for Interfacial Boundaries", Physical Review B, 33, (1986) 7792-7794.
- [68] Çağınalp, G., Fife, P.C., "Dynamics of Layered Interfaces Arising from Phase Boundaries", SIAM Journal of Applied Mathematics, 48,(1986) 506-518.
- [69] Frahm, H., Ullah, S., Dorsey, A.T., "Flux Dynamics and the Growth of the Superconducting Phase", Physical Review Letters, 66, (1991) 3067-3070.
- [70] Liu, F., Mondello, M., Goldenfeld, N., "Kinetics of the Superconducting Transition", Physical Review Letters, 66,(1991) 3071-3074.
- [71] Jullien, R., Botet, R., "Surface thickness in the Eden model", Physical Review Letters, 54,(1985) 2055.
- [72] Wu, Z.Q., Li, B. Q., "Random Successive Growth Model for Pattern Formation", Physical Review E, 51, (1995) R16-R19.
- [73] Li, B., Wang, J., Wang, B., Liu, W., Wu, Z., "Computer Simulations of Bacterial Colony Formation", Europhysics Letters, 30, (1995) 239-243.

- [74] Ausloos, M., Vandewalle, Cloots, R., "Magnetic Eden Model", Europhysics Letters, 24, (1993) 629-634.
- [75] Ivanenko, Y.V., Lebouka, N.I., Vigornitskii, N.V., "Eden Growth Model for Aggregation of Charged Particles", European Physical Journal B, II, (1999) 469-480.
- [76] Meakin, P., "Diffusion-controlled cluster formation in 2-6 dimensional space", Physical Review A, 27, (1983) 1495-1507.
- [77] Gould, H., Family, F., Stanley, H.E., "Kinetics of Formation of Randomly Branched Aggregates: A Renormalization Group Approach", Physical Review Letters, 50,(1983) 686-689.
- [78] Family, F., "Cluster Renormalization Study of Site Lattica Animals in Two and Three Dimensions", J. Phys. A: Math Gen., 16, (1983) L97-L104.
- [79] Forrest, S.R., Witten, T.A., "Long-Range Correlations in Smoke-Particle Aggregates", J.Phys. A: Math. Gen, 12, (1979) L109-L117.
- [80] Von Neumann, J., "Theory of Self-Reproducing Automata, University of Illinois Press", (1966) Urba
- [81] Magi, N., Kamiko, M., "Novel Electrochemical Phenomena in Magnetic Fields", Sci. Rep. RİTU (1996) 2, 315-320
- [82] Bayırlı, M., "İki Boyutlu Uzayda Tanecik Kümeleşmesi, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, (2003)

**Ek – 1**

## **BİLGİSAYARIN ÖZELLİKLERİ**

Üretici: Hewlett-Packard

Model: HP Pavilion dv6 Notebook PC

İşlemci: AMD Turion™ X2 Dual-Core Mobile RM-74 2.20 GHz

Bellek (RAM): 4 GB

Sistem Türü: 32 bit İşletim Sistemi

Ekran Kartı: ATI Mobility Radeon HD 4530 Serisi

Windows sürümü: Windows Vista Home Premium Service Pack 2

## Ek – 2

### SÖZLÜK

Pixel	Ekrandaki bir nokta; en küçük çizim parçası
Simulation	Simülasyon, taklit, benzetim
Azoic	Cansız
Non-azoic	Canlı
Polar	Kutuplu
Percolation	Süzülme, sızma, perkolasyon
Monte Carlo Method	Olayları ihtimaliyet temeline göre inceleme yöntemi
Colony	Aynı türden canlılar topluluğu, koloni
Peak	Tepe, zirve
Self-similarity	Kendine benzerlik
Brownian motion	Brown hareketi, mikroskobik bir taneciğin rasgele hareketi
Lattice	Örgü
Square lattice	Kare gözlü örgü
Manganese dendrite	Mangan dendriti, mangan çiçeği, mangan kümesi
Interface	Ara yüzey
Boundary	Sınır
Latent heat	Bir maddenin 1(bir) gramının sıcaklığı değişmeden hal değiştirmesi için gerekli ısı miktarı
Diffusion	Yayıma, difüzyon
Order parameter	Düzen parametresi
Melt	Eriyik
Solution	Çözelti
Curvature	Eğrilik
Instability	Kararsızlık
Under cooling	Aşırı soğuma
Super saturation	Aşırı doyma
Ensemble	Aynı türden sistemler topluluğu x
Particle	Tanecik, parçacık
Fractal dimension	Fraktal boyut, Hausdorff boyutu, topolojik boyut
Dilute	Seyrek, seyreltik, seyreltilmiş
Dilation	Genişleme, açılma, şişme
Ramification	Dallanma, çatallanma, kollara ayrılma
Scale	Ölçek
Rescale	Yeniden ölçeklemek
Scale-invariance	Ölçek ile değişmezlik
Stability	Kararlılık
Self-organization	Kendiliğinden düzene girme
Discrete variable	Sonlu sayıda değer (kesikli değer) alabilen değişken

Continuum	Sürekli (sonsuz sayıda noktaya sahip) ortam,
Perimeter	Çevre; çevrenin uzunluğu
Critical dimension	Kritik boyut
Deformation	Şekil bozukluğu
Noise	Gürültü; düzensiz etki
Perturbation	Tedirginlik
Correlation	İki nesne arasında karşılıklı ilgi, alaka, korelasyon
Universality	Evensellik
Power-law function	Bağımsız değişkenin sadece bir kuvvetini içeren fonksiyon
Dendrite	Çalı, yosun, ağaç görünümlü küme, dallı küme
Dendrite structure	Dallı yapı
Dendrite growth	Dallanarak büyüme
Boundary condition	Sınır şartı
Surface tension	Yüzey gerilimi
Tip	Uç, tepe büyüme ucu, tomurcuk
Radius of gyration	Bir disk, küre veya soyut kürenin doğrusal boyutu
Capillarity	İnce boru (ince damar) özelliği, kılcallık
Linear polymer	Çizgi şeklinde polimer
Branched polymer	Dallı polimer
Branched	Dallı, çatallanmış
Limit	Sınır, uç
Spanning	Kapsayan
Suppress	Etkisini bastırmak
Quench	Etkisini bastırmak, soğutmak
Profile	Şekil, görüntü
Vertex	En yüksek uç, en uzak uç
Renormalization	Yeniden (peş peşe, ardışık) normalizasyon
Irreversible	Başlangıç haline dönemeyen, geriye dönüşsüz
Reversible	Başlangıç haline dönebilen, geriye dönüşlü
Dangle	Sarkmak, asılı durup sallanmak
Turbulent	Çalkantılı, karışık, kargaşalı
Nucleation	Çekirdekleşme
Seed	Tohum, çekirdek
Tumor	Yumru, ur, tümör
Gel	Jel, pelte
Gelation	Jelleşme, pelteleşme
Span	Kapsamak
Site	Örgü noktası
Bond	Örgü bağı
Cell	Örgü hücresi, örgü gözü
Cluster	Küme
Aggregate	Küme
Recursion	Yineleme, tekrarlama
Approach	Yaklaşım
Approximation	Yaklaştırma
Threshold	Eşik, sınır
Phase transition	Faz geçişi, hal değiştirme
Critical exponent	Kritik üs
Probability	İhtimaliyet, olasılık
Configuration	Konum
Spontaneous	Kendiliğinden
Pattern	Desen, görünüm
Complex	Karmaşık

Process	İşlem
Equilibrium	Denge
Non-equilibrium	Denge dışı
Phenomenon	Doğal olay
Phenomenology	Doğal olayları inceleme ilmi
Accretion	Ekleme, ilave etme
Adsorption	Yüzeyinde tutma
Absorption	Soğurma, yapısına katma
Instability	Kararsızlık
Self-avoiding walk	Yörüngesini kesmeden yürüyüş
Random walk	Rastgele yürüyüş
Coordination number	Bir noktadan çıkan bağ sayısı
Empty	Boş
Occupied	Dolu
Colloid	Koloid
Deposition	Birikme, kümeleşme
Dielectric breakdown	Yalıtıktan elektrik geçmesi, elektrik boşalması
Viscosity	Akabilirlik
Compact	Sıkı, derli toplu, yoğun
Screening length	Perdeleme uzunluğu
Biased	Tercihli
Front	Cephe
Determinate	Niceliklerin kesin değerler aldığı
Non - lattice	Örgüsüz uzay
Dimensionality	Uzay boyutu
Diffusion - limited	Difüzyonla sınırlı
Nearest neighbor	En yakın komşu, birinci dereceden komşu
Next nearest neighbor	İkinci dereceden komşu
Linear dimension	Doğrusal boyut
Criticality	Kritiklik
Vapor	Buhar
Smoke	Duman, is
Crystallite	Kristalcik
Anomalous	Anormal
Order parameter	Düzen parametresi
Intensive property	Yoğun özellik
Extensive property	Yaygın özellik
Specific heat	Öz ısı
Specific entropy	Özel entropi
Specific volume:	Öz hacim
Macroscopic	Duyu organlarıyla algılanabilen, makroskopik
Microscopic	Bir araç yardımıyla algılanabilen, mikroskopik
Over damped	Aşırı sönümlü
Relaxation	Durulma
Fluctuation	Dalgalanma
Dissipation	Sönümlenme
Solidification	Katılaşma
Quantitative	Nitelikçe, nitelik bakımından
Self-reproduction	Miktarca, miktar bakımından

## ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı: Özlem SAVAŞ PEKDUR

Doğum Yeri: İzmir

Doğum Tarihi: 1982

Medeni Hali: Evli

Yabancı Dili: İngilizce

### Eğitim Durumu (Kurum ve Yıl)

Lise : İzmir Suphi Koyuncuoğlu Anadolu Lisesi 1996- 2000

Lisans : Ankara Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Fizik Mühendisliği  
Bölümü 2000- 2004

Yüksek Lisans: Dokuz Eylül Üniversitesi İngilizce işletme Yüksek lisansı  
2005-2007

2005-2007 Celal Bayar Üniversitesi Fizik Öğretmenliği Yüksek Lisansı

Balıkesir Üniversitesi Fizik bölümü 2008-2010

### Çalıştığı Kurum/ Kurumlar ve Yıl

- ERNA Makine Ltd Şti 2005-2007

- Ufotek Limited Şti 2007-2008