

**SPİN-1/2 ISING MODELİNİN CREUTZ “CELLULAR
AUTOMATON” PROGRAMININ İNCELENMESİ**

İsa ERDEM

**Mayıs 2006
DENİZLİ**

**SPİN-1/2 ISING MODELİNİN “CREUTZ CELLULAR”
AUTOMATON PROGRAMININ İNCELENMESİ**

**Pamukkale Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Yüksek Lisans Tezi
Fizik Anabilim Dalı**

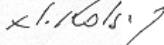
İsa ERDEM

Danışman: Yrd. Doç. Dr. Mestan KALAY

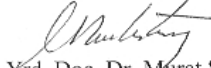
**Mayıs 2006
DENİZLİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ ONAY FORMU

İsa ERDEM tarafından Yrd. Doç. Dr. Mestan KALAY yönetiminde hazırlanan “Spin-1/2 Ising Modelinin Creutz “Cellular Automaton” Programının İncelenmesi” başlıklı tez tarafımızdan okunmuş, kapsamı ve niteliği açısından bir Yüksek Lisans Tezi olarak kabul edilmiştir.



Prof. Dr. Nuri KOLSUZ



Yrd. Doç. Dr. Murat SARI



Yrd. Doç. Dr. Mestan KALAY
(Danışman)

Pamukkale Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim kurulu' nun
.../.../.....tarih vesayılı kararıyla onaylanmıştır.

Prof. Dr. Mehmet Ali SARIGÖL
Müdür

Bu tezin tasarımı, hazırlanması, yürütülmesi, arařtırmalarının yapılması ve bulgularının analizlerinde bilimsel etięe ve akademik kurallara özenle riayet edildiđini; bu çalışmanın doğrudan birincil ürünü olmayan bulguların, verilerin ve materyallerin bilimsel etięe uygun olarak kaynak gösterildiđini ve alıntı yapılan çalışmalara atfedildiđini beyan ederim.

İmza :
Öğrenci Adı Soyadı : İsa ERDEM

TEŞEKKÜR

Öncelikle bu çalışmanın ortaya çıkmasında çok büyük katkısı olan değerli hocam Yrd. Doç. Dr. Mestan KALAY'a teşekkür ederim.

Ayrıca Pamukkale Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü'nün tüm öğretim elemanlarına, özellikle simülasyonların yapılmasında TBAG-HD/49 (105T261) proje koduyla TÜBİTAK destekli Pentium 3.4 XEON HP8200 tipi iş istasyonunu kullandıran Dr. Hasan Hüseyin KART hocama tekrar tekrar teşekkür ederim.

Çalışmalarım süresince maddi ve manevi desteklerini esirgemeyen başta ailem olmak üzere emeği geçen herkese teşekkürü bir borç bilirim.

ÖZET

SPİN-1/2 ISING MODELİNİN CREUTZ “CELLULAR AUTOMATON” PROGRAMININ İNCELENMESİ

Erdem, İsa
Yüksek Lisans Tezi, Fizik ABD
Tez Yöneticisi: Yrd. Doç. Dr. Mestan KALAY

Mayıs 2006, 58 Sayfa

Doğrusal boyutu $L=10, 12$ olan örgülerde en yakın komşu spin etkileşmelerini içeren beş boyutlu Ising modelinin Creutz “cellular automaton”ında simülasyonlar yapılmaktadır. Daha önce yapılan beş boyutta Ising modelinin Creutz “cellular automaton” simülasyonlarından farklı olarak demon sayısı artırılmış ve simülasyonların bir kısmı da dış manyetik alanın varlığında gerçekleştirilmiştir. Bunları yapabilmek için simülasyon programı detaylı bir şekilde incelenmiş ve gerekli değişiklikler yapılmıştır. Dış manyetik alanın varlığında üç bitli ve dört bitli demonlar kullanılarak elde edilen sıcaklık değerleri ve bu sıcaklık değerlerine karşılık gelen manyetizasyon değerleri hesaplanmış ve sonucun ortalama alan teorilerinin öngördüğü şekilde olduğu ve artık $H=0$ 'ın T_c kritik sıcaklığında faz geçişi olmadığı görülmüştür. İkinci olarak da yine $L=10, 12$ örgü uzunlukları için simülasyonlar demon sayısı dörde artırılarak yapılmıştır. Sıcaklığa karşı manyetizasyon, Binder parametresi, öz ısı ve manyetik alınganlık grafikleri çizilmiştir. Binder parametresi $L=10$ ve $L=12$ eğrilerinin kesişme noktasından kritik sıcaklık $T_c=8,7797(9)$ olarak bulunmuş ve bunun da daha önce yapılan beş boyutlu çalışmalarla uyumlu olduğu gözlenmiştir.

Anahtar Kelimeler: Faz Geçişleri, Ising Model, “Cellular Automaton”, Dış Manyetik Alan

Prof. Dr. Nuri KOLSUZ
Yrd. Doç. Dr. Murat SARI
Yrd. Doç. Dr. Mestan KALAY

ABSTRACT**INVESTIGATION OF THE SPIN-1/2 ISING MODEL CREUTZ “CELLULAR AUTOMATON” PROGRAM**

Erdem, İsa

M. Sc. Thesis in Physics

Supervisor: Asst. Prof. Dr. Mestan KALAY

May 2006, 58 Pages

The five-dimensional nearest-neighbour Ising model is simulated on the Creutz “cellular automaton” using the finite-size lattices $L=10,12$. Simulations are made by increasing the number of demons distinctly from those being made before in five dimensions on the Creutz “cellular automaton”, some of the simulations are made in the presence of the external magnetic field. In order to achieve these, the simulation program was studied in detail and was modified necessarily. First of all, temperatures and their corresponding magnetization values are calculated by using three and four demons in the presence of the external magnetic field and results are in accordance with those of mean field theories, hence phase transition from ferromagnetism to paramagnetism does not occur anymore at the critical temperature T_c of $H=0$. Next, simulations for $L=10,12$ are made by increasing the number of demons to four. Then, temperature versus magnetization, Binder parameter, specific heat and magnetic susceptibility are illustrated. The critical temperature T_c is found to be 8,7797(9) from the intersection point of Binder parameter curves of $L=10$ and $L=12$, as a result this value is compatible with the studies done before in five dimensions.

Key Words: Phase Transitions, Ising Model, “Cellular Automaton”, External Magnetic Field

Prof. Dr. Nuri KOLSUZ

Asst.Prof. Dr. Dr. Murat SARI

Asst.Prof. Dr. Dr. Mestan KALAY

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
İçindekiler.....	vi
Şekiller Dizini.....	vii
Tablolar Dizini.....	viii
Simgeler ve Kısaltmalar Dizini.....	ix
1. GİRİŞ.....	1
2. FAZ GEÇİŞLERİNİN TARİHSEL GELİŞİMİ.....	5
2.1. Faz Geçişleri.....	5
2.1.1 Evrensel davranış.....	6
2.1.2 Düzen parametresi.....	8
2.1.3 Termodinamik potansiyeller.....	8
2.1.4 Kritik üsler.....	10
2.2. Ising Model.....	14
2.3. Ortalama Alan Teorisi.....	17
2.4. Üslerin Klasik Landau Teorisi.....	23
2.4.1. Kritik nokta civarında açılımlar.....	23
2.4.2. Landau teorisinin varsayımları.....	24
2.4.3. Landau teorisinin kritik nokta tahminleri.....	26
2.5. Korelasyonlar.....	28
2.6. Ölçekleme Teorisi.....	30
3. ALGORİTMALAR VE SİMÜLASYONLAR.....	34
3.1 Ising Modelinin Simülasyonu İçin Algoritmalar.....	34
3.1.1. Metropolis algoritması.....	35
3.1.2. Spin kümesi (cluster) algoritmaları.....	38
3.1.2.1. Swendsen Wang algoritması.....	38
3.1.2.2. Wolff algoritması.....	38
3.1.3. Creutz' un gezgin demon algoritması.....	39
3.1.4. "Cellular automaton"lar.....	40
3.2. Ising Modelin Simülasyonu İçin "cellular automaton"lar.....	42
3.2.1. Q2R "cellular automaton".....	42
3.2.2. Creutz "cellular automaton".....	43
3.3. Demon Enerjisinin Hesaplanması.....	44
3.4. Creutz "Cellular Automaton"ında Termodinamik Niceliklerin Hesabı.....	45
4. MATERYAL VE METOT.....	48
5. BULGULAR VE TARTIŞMA.....	50
6. SONUÇLAR.....	55
KAYNAKLAR.....	56
ÖZGEÇMİŞ.....	58

ŞEKİLLER DİZİNİ

	Sayfa
Şekil 1.1 Termodinamik Kare.....	9
Şekil 2.1 İki boyutlu örgü konumlarının aşağı ve yukarı yönlü spinler tarafından rastgele doldurulmuş bir konfigürasyonu.....	16
Şekil 2.2 Eşitlik (2.3.14)'ün sağ ve sol taraflarının M'ye karşı grafikleri. M=0 bütün T değerleri için çözüm varken, M≠0 için Brillouin fonksiyonunun eğimi 1'den büyük olduğu için sadece yeterince küçük T değerleri için çözüm olacaktır.....	20
Şekil 3.1 Bir spinin 4 komşusuyla etkileşmesi. Merkezdeki spin alt-üst olduğunda, enerjiye farklı katkılarda bulunan 5 durum oluşabilir.....	37
Şekil 4.1 Manyetik bir sistemin H>0 ve H→0 için M(T,H) grafiği. Burada M ₁ Sistemin kritik sıcaklık altındaki bir sıcaklıkta T ₁ <T _c kendiliğinden mıknatıslanmasını gösterir.....	51
Şekil 4.2 3 demon kullanılarak dış manyetik alan yokluğunda H=0 ve dış manyetik alan varlığında simülasyondan elde edilen M-T grafiği.....	51
Şekil 4.3 4 demon kullanılarak dış manyetik alan yokluğunda H=0 ve dış manyetik alan varlığında simülasyondan elde edilen M-T grafiği.....	52
Şekil 4.4 4 demon kullanılarak L=10 ve L=12 iki farklı örgü uzunluğu için düzen dış manyetik alan yokluğunda parametresinin sıcaklıkla değişimi.....	52
Şekil 4.5 4 demon kullanılarak L=10 ve L=12 iki farklı örgü uzunluğu için dış manyetik alan yokluğunda Binder parametresinin sıcaklıkla değişimi.....	53
Şekil 4.6 4 demon kullanılarak L=10 ve L=12 iki farklı örgü uzunluğu için dış manyetik alan yokluğunda öz ısının sıcaklıkla değişimi.....	53
Şekil 4.7 4 demon kullanılarak L=10 ve L=12 iki farklı örgü uzunluğu için dış manyetik alan yokluğunda manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişimi.....	54

TABLolar DİZİNİ

	Sayfa
Tablo 1.1 Üç bitli demon' un enerji düzeyleri.....	45
Tablo 4.1 Poyraz (2004)' dan alınan ve bu çalışmada elde edilen kritik sıcaklık (T _c) değerleri.....	54

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

A	Helmholtz serbest enerjisi
a_{ij}	Kare örgüde ij konumlu hücredeki bir değişken
a'_{ij}	Kare örgüde ij konumlu hücredeki bir değişkenin t anındaki değeri
a_H	Manyetik alanla ilgili ölçekleme parametresi
a_t	Sıcaklıkla ilgili ölçekleme parametresi
B_i	Ising spini
$B_s(y)$	Brillouin fonksiyonu
bcc	Hacim merkezli kübik örgü
C	Öz ısı
c_v	Sabit hacim öz ısısı
C_H	Sabit alan öz ısısı
C_M	Sabit manyetizasyon öz ısısı
C_a	Konfigurasyon uzayında herhangi bir nokta
CA	Cellular Automaton
CPU	Central processing unit
D	Spin boyutu
D_n	n. demon
d	Uzay boyutu
E	Enerji
E_I	Ising enerjisi
E_D	Demon enerjisi, momentum değişkenine karşılık gelen kinetik enerji
E_D^i	i. örgü noktasına ait demon' un enerjisi
$\langle E_D \rangle$	Demon enerjisinin beklenen değeri
f	serbest enerji
fcc	Yüzey merkezli kübik örgü
G	Gibbs serbest enerjisi
g	Lande faktörü
g_L	Binder parametresi
g_{ij}	i. ve j. Spinler arasında korelasyon
$g(r)$	Korelasyon fonksiyonu
H	Entalpi
H	Manyetik alan
$H_{amiltonyen}$	Hamilton fonksiyonu
h	Ölçeklenmiş manyetik alan
H_I	Ising spin enerjisi, iç enerji
H_K	Örgünün toplam kinetik enerjisi
$H\{\sigma_i\}$	Sistemin Hamilton fonksiyonu
H_m	Ortalama alan teorisinde spin etkileşmelerinin manyetik alana katkısı

H_{etkin}	Ortalama alan teorisinde dış alanın da dahil edildiği toplam alan
J	Açısal momentum kuantum sayısı
J	İzotropik durumda spin eşleşme sabiti
J_{ij}	Değiş-tokuş enerjisi sabiti
J_z	Açısal momentumun z bileşeni
$\langle ij \rangle$	i ve j konumlarına yerleşmiş en yakım paralel komşu spinler
k	Boltzmann sabiti
k_B	Boltzmann sabiti
K_{ij}	İki spin arasındaki Coulomb etkileşmesi
L	Gizli ısı
L	Doğrusal boyut, bir boyuttaki spin sayısı
M	Manyetizasyon
m	Hacim başına manyetik dipol momenti, mıknatıslanma
m	Ölçeklenmiş manyetizasyon
M_{\uparrow}	Yukarı yönlü spinlerin oluşturduğu manyetizasyon
M_{\downarrow}	Aşağı yönlü spinlerin oluşturduğu manyetizasyon
m_0	Spin başına manyetik moment
$m_0(T)$	Sıfır dış alanda mıknatıslanma
$\overline{M}(H, T)$	Mıknatıslanmanın beklenen değeri
$\overline{M}(0, T)$	Kendiliğinden mıknatıslanma
MC	Monte Carlo
N	Sistemdeki spin sayısı
p	Genelleştirilmiş momentum
p	Korelasyon fonksiyonunun $t=0$ 'da bozunmasıyla ilgili üs
p_x	Momentumun x bileşeni
p_y	Momentumun y bileşeni
$P(C)$	Sistemin C noktasında bulunma olasılığı
RG	Renormalizasyon grup
RNG	Random number generator (rastgele sayı üretici)
S	Spin kuantum sayısı
S	Entropi
sc	Basit kübik örgü
S_z	Spinin z bileşeni
S_i	i konumlu örgü noktasındaki spin
S_{iz}	i konumundaki spinin z bileşeni
T	Herhangi bir sıcaklık
T_c	Kritik sıcaklık, Curie sıcaklığı
T_t	Geçiş sıcaklığı
T_L	L doğrusal boyutlu bir sistemin kritik sıcaklığı
t	İndirgenmiş sıcaklık
Tr	Trace (İz)
U	İç enerji

u_{ij}	Etkileşme potansiyeli
z	Dinamik kritik üs
Z	Bölüşüm fonksiyonu
Z_N	Bölüşüm fonksiyonu
q	Rasgele bir sayı
q	Genelleştirilmiş koordinat
q	Koordinasyon sayısı, en yakın komşu sayısı
Q2R	Quatre 2 reversible
$W()$	Geçiş olasılığı
α	Öz ısı kritik üssü $T > T_c$
α'	Öz ısı kritik üssü $T < T_c$
α_H	Manyetizasyonun sıcaklığa göre birinci kısmi türevi
α_M	Manyetik alanın sıcaklığa göre birinci kısmi türevi
β	Düzen parametresinin sıcaklıkla ilgili kritik üssü
β	Değeri $1/k_B T$ ile belirlenen sıcaklıkla ilgili katsayı
$\Gamma(x)$	Korelasyon fonksiyonu
γ	Manyetik alınganlık kritik üssü
δ	Durum denklemleri kritik üssü
ΔH_I	Ising spin enerjisi değişimi
$\varepsilon_{\uparrow\uparrow}$	Paralel spinlerin enerjisi
$\varepsilon_{\uparrow\downarrow}$	Antiparalel spinlerin enerjisi
η	Korelasyon fonksiyonunun üstel bozunmasıyla ilgili kritik üs
λ	Kritik üssün genel gösterimi
μ	Manyetik moment
μ_B	Bohr manyetonu
ν	Korelasyon uzunluğu kritik üssü
ξ	Korelasyon uzunluğu
ρ	Yoğunluk
σ	Spin
τ	Dekorelasyon zamanı
χ	Manyetik alınganlık
χ_T	İzotermal alınganlık
χ_T^0	Paramanyetiğin alınganlığı
ψ	Düzen parametresi
$\langle \rangle$	Zaman ve örgü üzerinden ortalama

1. GİRİŞ

Bu tez çalışmasının amacı bilimsel arařtırmalarda deneysel çalışmalarla teorik çalışmaların arasında kendisine yer edinmiř, köprü görevi gören ve teknolojinin geliřmesiyle önemi her geen gün daha da artan simülasyon çalışmalarının bir örneğini vermektir. Birinci bölümde tezin kısa bir özeti niteliğinde olan giriş yapıldıktan sonra ikinci bölümde faz geişleriyle ilgili temel noktalara dikkat çekilmiřtir. Önce faz geişleri tanımlanmıř sonra da faz geişlerinin sınıflandırılmasında en çok kullanılan Ehrenfest ve Fisher sınıflandırmaları karşılařtırmalı olarak ele alınmıřtır. Faz geişlerinin teorik olarak açıklanması çabaları yeni yeni modellerin ortaya atılmasını da beraberinde getirmiřtir. Faz geişlerinin iki farklı örneğinden sıvı-buhar yoğunlukları farkının sıcaklıęa bağımlılıęını belirleyen kritik üssün, tek doęrultu eksenli bir miknatista manyetizasyon farkını sıcaklıęa baęlayan kritik üsle aynı olması çok řařırtıcı ve bir o kadar da heyecan verici bir bulgudur. Bu durum ancak 20. yüz yılın son çeyreğinde “evrensellik” terimiyle açıklamasını bulmuřtur Moore (2003). Sistemin faz geişini gözlememize yarayan en belirgin özellięi düzen parametresi olarak seçilmektedir ve bu parametrenin uzay ve zaman dalgalanmalarına ya da uzun bir periyot üzerinden termal ortalamasına bakılarak olay yorumlanmaktadır. Faz geişinin gerekleřtięi kritik sıcaklık T_c civarında sistemin termodinamik özelliklerini açıklarken bu özelliklere ait fonksiyonların davranıřları hakkında bilgi veren kritik üsler denilen bir dizi sabitler kullanılmaktadır. Bu fonksiyonların termodinamik kare olarak adlandırılan bir řemadan yola çıkılarak kolayca elde edilmesi, buradan da kritik üslerin elde edilmesi ve kritik üslerin de kendi aralarında oluřturduęu bir takım baęıntılara da yine bu bölümde değinilmiřtir. Ising model ve ona en yakın modellerden olan Heisenberg modelinin tanımları karşılařtırmalı olarak verilmektedir. Ferromanyetizmadan paramanyetizmaya faz geişini açıklamak için ortaya atılan ortalama alan teorilerinden Weiss teorisi anlatılıp grafik çözümleri hakkında bilgi verilmektedir. Sonra da deęiřik uzay boyutları için geliřtirilen teorilerle birlikte bu teorilerin olayı açıklamaktaki

başarılarının sınırları çizilmektedir. Bu teorilerin ortak özelliklerini şöyle açıklayabiliriz: Uzay boyutu kritik üst limit olan dördün üzerine çıktığında verdikleri sonuçlar ortalama alan teorileriyle hemen hemen aynı olmaktadır. Faz geçişlerini açıklamada klasik teorilerin en başarılılarından bir tanesi de kuşkusuz Landau teorisidir. Fakat bu teori de deney sonuçlarını açıklamakta yetersiz kalmaktadır. Bunun nedeni de teorinin kurulmasında temel olan “bir termodinamik potansiyel kritik nokta civarında seriye açılabilir” şeklindeki gerçekçi olmayan varsayımdır. Bu teori hakkında da kritik nokta tahminleriyle birlikte bilgi verilmiştir. Sistemin farklı kısımlarının birbirleriyle etkileşmesinin bir ölçüsü olan korelasyonlar matematik temelleri ve fiziksel anlamlarıyla birlikte açıklanmıştır. Simülasyonlarda birbirinden istatistiksel olarak bağımsız konfigürasyonları elde etmenin bir ölçüsü olan dinamik kritik üssün örnek verilerek açıklaması yapılmaktadır. Simülasyonlarda sistemin dengeye ulaşmasını sağlamanın yolu bir durumdan diğer duruma geçiş olasılık dağılımlarının, $P(C) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E}$ Boltzmann dağılımına uygun olmasıdır. Bu durumun detaylı denge kullanılarak elde edilebileceği anlatılarak modelin tarihsel gelişimi ve matematik temelleri hakkında bilgi verildiği ikinci bölüm sona ermektedir.

Üçüncü bölümde ise Ising modelinin simülasyonu için algoritmalarından bahsedilmektedir. Literatüre bakıldığında Sun(2005), Moore(2003) bu algoritmaların oldukça büyük sayılarda olduğu görülmekte ise de bunların en yaygın olarak kullanılanlarını belirli başlıklar altında toplamak ve o algoritmanın mantığı hakkında bilgi vermek mümkündür. Bunlardan ilki Metropolis ve arkadaşlarının geliştirdiği stokastik (rastgele) algoritmadır. Monte Carlo simülasyonu diye meşhur olan bu algoritma iki boyutlu Ising modelinin simülasyonu için bir program örneği ile birlikte incelenmiştir. Küme algoritmaları olmalarından dolayı aynı kategoride ele alınmalarına ve büyük benzerlik göstermelerine rağmen Swendsen-Wang ve Wolff algoritmaları da ayrı ayrı ele alınmıştır. Daha sonra deterministik algoritmalar hakkında Creutz’un gezgin demon algoritmasından başlanarak incelenmiştir. Bu algoritma stokastik bir algoritma olan Monte Carlo yöntemi ile onun alternatifi olan ve tamamen deterministik yöntem olan moleküler dinamik yöntem arasında yer alır. Hücre otomasyonu anlamına gelen “cellular automaton” algoritmaların genel mantığı irdelenmiş ve tam sayılarla çalışma prensibi olan bir yöntem ile model oluştururken;

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

“Cellular automaton” algoritmaları iki başlıkta incelenmekte. Bu algoritmalar Q2R “cellular automaton” ve bizim de kullandığımız yöntem olan Creutz “cellular automaton” algoritmalarıdır. Her ikisi de sabit enerjili mikrokronik kümede simülasyona uygun olmalarına rağmen Q2R CA “Feedback Catastrophe” denilen ve belirli bir zaman adımından sonra hep aynı konfigürasyonların üretilmesi gibi bir olumsuz durum içermektedir. Bu durum aşılsa da başka olumsuzluklar içermekte, Creutz CA ise çok daha etkili simülasyonlar yapılmasına imkan vermektedir, demon denilen ve spine eşlenik momentum olarak da değerlendirilen serbestlik derecesi tanımlanmaktadır. Simülasyon süresince toplam enerji sabit kalmasına rağmen iç enerji ve kinetik enerji dalgalanmalarına izin verilmekte, sistemin sıcaklığı da demon enerjisinin beklenen değer formülünden hesaplanmaktadır. Sıcaklık ve diğer termodinamik hesaplamalar Boltzmann dağılımına uygun formüller yardımıyla yapılmaktadır. Bu formüller üçüncü bölümün sonunda ele alınmıştır. Creutz CA detaylı bir şekilde incelenmiştir. En yakın komşu spin etkileşme enerjileri ve varsa manyetik alan ile spin etkileşme enerjisi sistemin Ising enerjisini oluşturmaktadır. Bir spinin yön değiştirmesiyle Ising enerjisindeki değişim ΔE hesabı irdelenmiştir. Demonların enerjilerinin hesabı da örneklerle açıklayıcı bir şekilde yapılmıştır. Spin ters çevrildiğinde enerjideki değişme demonların alıp verebileceği miktarda ise spin ters çevrilir değilse spin çevrilmeden bir sonraki spine geçilir temel prensibiyle örgü binlerce kez işleminden geçirilir.

Bu güne kadar Creutz CA’ında termodinamik nicelikler üzerinde boyut etkisinin ve teorik çalışmaların öngördüğü sonuçların doğruluğunu araştırmak için $d=2$ (Kutlu 1994), 3 (Aktekin 1995), 4 (Aktekin 1996), 5 (Aktekin 1999), 6 (Merdan 2005), 7 (Aktekin 2001), 8 (Merdan 2005) boyutlu Ising modelleri için simülasyonlar yapılmıştır. Beş boyutta Ising modelin Creutz CA ile simülasyonu yapılırken üç demon kullanılmıştır, bu çalışmada ise program modifiye edilerek demon sayısı dörde çıkarılmıştır. $L=10$ örgü uzunluğunda demon sayısı üç ve dört için simülasyonlar

yapılmıştır. Spin-spin etkileşmelerinin iki katı mertebesinde dış manyetik alanın var olduğu kabul edilmiş ve elde edilen sıcaklık-manyetizasyon eğrilerinin dört boyut üzerindeki boyutlarda geçerliliği tartışılmayan ortalama alan teorilerinin tahminleri doğrultusunda sonuçlar verdiği gözlenmiştir. Sonra da $L=10$ ve $L=12$ için dört demon kullanılarak simülasyonlar yapılmış, sıcaklığa karşı manyetizasyon, Binder parametresi, manyetik alınganlık ve öz ısı grafikleri çizilerek sonuçlar bölümünde verilmiştir. Binder parametresinin sıcaklık değişim eğrilerinin kesişme noktasından kritik sıcaklık $T_c=8,7797(9)$ olarak bulunmuştur. Bu değer de şimdiye kadar farklı yöntemlerle yapılan beş boyut simülasyonlarının sonuçlarıyla uyumludur.

Manyetik alanın malzemeler üzerindeki etkileri çok uzun yıllardan beri araştırmacıların ilgi alanlarından birisidir. Bu çalışmalardan özellikle faz geçişleriyle ilgili olanların tıp, elektronik ve haberleşme başta olmak üzere birçok teknoloji alanında yeni çığırılar açılmasına sebep olması beklenir.

2. FAZ GEÇİŞLERİNİN TARİHSEL GELİŞİMİ

2.1 Faz Geçişleri

Ehrenfest'in meşhur sınıflandırmasına göre faz geçişleri n. dereceden faz geçişleri şeklinde sınıflandırılır. Faz geçişinde serbest enerji veya uygun bir termodinamik potansiyelin bileşenlerinden birinin n. türevinde süreksizlik görülür. Tabii ki o zamanlar örneğin öz ısı gibi bir çok termodinamik niceliğin ikinci derece geçişlerde Ehrenfest'in iddia ettiği gibi süreksizlik değil, aslında iraksama gösterdiği bilinmiyordu. Üstelik 2. derecenin üzerinde faz geçişleri olduğuna dair deneysel bir kanıt da yoktur. Sonuç olarak faz geçişlerinin sınıflandırılmasında Fisher'in teklif ettiği yöntem daha güvenilirdir. Buna göre faz geçişi, serbest enerjinin birinci türevleri sürekli ise sürekli faz geçişi, en az bir tanesi süreksiz ise birinci dereceden faz geçişi olarak nitelendirilir.

Normal şartlar altında H_2O 'nun faz geçişleri (katı-sıvı-gaz) ya da eritilmiş bir metalin katılaşması birinci dereceden faz geçişleridir. Gizli ısı içeren faz geçişleri birinci derecedendir. Bir madde yüksek sıcaklıktaki bir fazdan düşük sıcaklıktaki bir faza birinci dereceden faz geçişini şu şekilde yapar: Geçiş sıcaklığı denilen bir T_t sıcaklığı civarında sıcaklığın küçük aralıklarından geçerek soğurken sıfırdan farklı bir ısı, gizli ısı dışarı verilir. Geçişteki bu ısı yayımı maddenin yapısında T_t sıcaklığında köklü bir yeniden düzenlenme olduğunu gösterir. Örneğin $L \approx 334Jg^{-1}$ su-buz geçişi gizli ısı düzensiz ve çözülme sıklıklarında başıboş gezinmektense H_2O molekülleri kendini fcc (yüzey merkezli kübik örgü) yapısına dönüştürürken dışarı verilir. Sürekli faz geçişinin örneği ise, $T_c=1043$ K Curie sıcaklığında demirin paramanyetik şekilden ferromanyetik şekle geçmesidir. $T > T_c$ sıcaklıklarında demir de bakır ya da çinko gibi paramanyetiktir. Yani dış manyetik alan yokluğunda madde

mıknatıslanmaz eğer zayıf bir H alanı uygulanırsa maddenin hacim başına manyetik dipol momenti, uygulanan alanla orantılıdır, $m \approx \mu H$, (burada μ pozitif bir sabittir). Ferromanyetik durumda ($T < T_c$) madde alan uygulanmasa dahi mıknatıslanır ve bir dış H alanı uygulandığında mıknatıslanma (manyetizasyon) alan doğrultusunda olmak için ani olarak dalgalanır. Sonuç olarak, manyetizasyon artık H'ye lineer olarak bağlı değildir. Sıfır dış alanda manyetizasyonun büyüklüğü $m_0(T)$, T_c kritik sıcaklığına alttan yaklaşırken azalır. Buna göre dış manyetik alan yokluğunda demir örneğini ısıtırsanız ilginç olan hiçbir şey olmaz sadece manyetizasyon düzgün olarak azalır; T_c ve üstü sıcaklıklarda hiç kalmaz. T_c 'de kesikli olarak değişen m_0 'ın kendisi değil değişim oranıdır. Sürekli faz geçişinin özü şudur: T_c kritik sıcaklığında kesikli olarak değişen sistemin özellikleri değil en az onlardan birinin değişim oranıdır. Halbuki su donarken sistemin özelliklerinde örneğin yoğunluk ρ ve öz ısı c_v 'de ani bir değişiklik vardı onların değişim oranında değil (Binney vd 1992).

Sonuç olarak sıfırdan farklı bir gizli ısı varsa faz değişikliği birinci dereceden faz geçişi diğer geçişlerin hepsi de sürekli faz geçişi olarak nitelendirilir.

Manyetik faz geçişlerinin anlaşılması 20. yüzyılın başlarında geliştirilen yeni teorilerle birlikte hızlanmıştır. Bunlardan ilk göze çarpanı Pierre Weiss'in 1907'de geliştirdiği ferromanyetizma teorisidir. Bu teori, sistemi oluşturan manyetik momentlerin birbirleriyle etkileşmesi ve bu etkileşmenin de ortalama manyetizasyonla orantılı olan yapay bir moleküler alan yoluyla olması ilkesine dayanmaktadır. Bu modellerin ortak özelliği manyetik momentlerin sabit örgü konumlarına (noktalarına) yerleştirilmesi ve momentlerin paralel olması durumunda enerjisi maksimum olan çift etkileşmeleri şeklinde olmasıdır. Bu etkileşmelerin özellikle iki çeşidi önemlidir: İlki Wilhelm Lenz'in kurduğu fakat Ising model diye meşhur olanıdır. Bu modelde manyetik momentler sadece iki yönelime sahip olan bir boyutlu klasik çubuklar şeklinde düşünülmüştür. İkinci model ise Heisenberg modelidir. Manyetik momentleri kuantum mekaniksel üç boyutlu spin operatörleri (işlemcileri) şeklinde değerlendirip, enerjilerinin bu operatörlerin skaler çarpımlarıyla orantılı olduğunu kabul eder. Modeller manyetik faz geçişleriyle ilgili yorumlar yapılmasına önemli katkılarda bulunur (Stanley 1971).

2.1.1 Evrensel davranış

Argon, Kripton, Azot ve Oksijen gibi gazların sıvı ve buhar yoğunluklarının gerçek değişimleri evrensel bir davranış özelliği gösterir. Eğer sıcaklık ve yoğunluk normalize edilirse, farklı gazlar için veri değerleri hemen hemen aynı birlikte varolma eğrisi üzerine düşer. Birlikte varolma eğrisi parabolik özellik taşır (Huang 1987).

Sıcaklık T , kritik sıcaklık T_c 'ye yaklaşırken sıvı ve buhar yoğunlukları farkı $\sim |t|^\beta$ bağıntısındaki β kritik üssüne bağlı olarak azalır $t = \frac{(T - T_c)}{T_c}$ boyutsuz birimlerde sıcaklığın kritik sıcaklıktan sapmasını ölçen indirgenmiş sıcaklıktır. Sıvı ve gaz yoğunlukları arasındaki fark

$$\rho_{\text{Sıvı}} - \rho_{\text{Gaz}} \approx \left(\frac{T - T_c}{T_c} \right)^\beta \quad (2.1.1)$$

Buradaki β kritik üssünün maddelerin kritik sıcaklıkları değişik olmasına rağmen, sıvı-gaz geçişlerinde deneysel olarak $\beta \approx 0,31$ civarında bir değer aldığı görülmüştür. Benzer olarak aynı doğrultu eksenli basit bir miknatista da kritik nokta civarında manyetizasyon farkının

$$M_\uparrow - M_\downarrow \approx \left(\frac{T - T_c}{T_c} \right)^\beta \quad (2.1.2)$$

şeklinde indirgenmiş sıcaklığa bağıllık gösterdiği ve değişik manyetik maddeler olsa bile bu kritik üssün deneysel ve teorik değerinin tek doğrultu eksenli olmak (sadece yukarı ve aşağı gibi) şartıyla $\beta \approx 0,31$ civarında olduğu tesbit edilmiştir. Bu ilginç durumun 1970'lerde RG (renormalizasyon grup) teorisinin boyut ve simetriyle belirlediği "evrensellik" terimiyle açıklaması yapılmıştır. Farklı sistemlerin aynı kritik üslere sahip olması özelliğine evrensellik denir. Kritik üsleri aynı olan sistemler aynı evrensellik sınıfında yer alırlar. Örneğin iki boyutlu uzayda üçgen ve kare örgüler farklı kritik sıcaklıklara sahip oldukları halde, kritik üs değerleri aynıdır. Sc (basit küp), fcc

(yüzey merkezli küp) ve bcc (hacim merkezli küp) örgülerin kritik sıcaklıkları farklı olduğu halde, kritik üs değerleri aynıdır (Moore 2003).

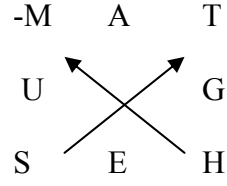
2.1.2 Düzen parametresi

Adından da anlaşıldığı gibi ele alınan sistemin ne kadar düzenli olduğunu anlatan bir değişkendir. Örneğin manyetik sistemler için manyetizasyon böyle bir parametredir. Manyetizasyon sıfır ise sistem tamamen düzensiz bir haldedir. Düzen parametresi geçişin bir tarafında (örneğin yüksek sıcaklık tarafında) değişmez bir şekilde hiç kalmazken diğer tarafında sıfırdan itibaren değişir. Düzen parametresini ψ ile gösterirsek, ψ 'nin uzay ve zaman dalgalanmalarına bakarak olayı yorumlayabiliriz. Ama uygulamada daha çok ψ 'nin sabit sıcaklıkta uzun bir periyot üzerinden ortalaması olan termal ortalaması kullanılır. α , β , γ ve δ gibi kritik üsler ψ 'nin termal ortalamasının sıcaklık, manyetik alan vb. ile değişimini verir. Düzen parametresini seçmek için belli bir kural yoktur, problemin doğasına uygun parametre sıvı-gaz geçişlerinde yoğunluk, akışkan karışımları için mol kesirleri arasındaki fark seçilebilir (Binney vd 1992).

2.1.3 Termodinamik potansiyeller

Karaoğlu (2003) termodinamik potansiyeli şöyle tanımlamaktadır: Sıcaklık, hacim, basınç vb. değişkenlerden herhangi ikisi bağımsız değişken olarak seçildiğinde, bu iki bağımsız değişken cinsinden tam diferansiyel olan bir büyüklük daima vardır. Örneğin S ve $-M$ bağımsız değişkenleri seçildiğinde $U=U(S,-M)$ bir termodinamik potansiyel olur. Şekil 1.1'deki termodinamik kare şöyle oluşturulmuştur: Potansiyeller enerji U, Helmholtz serbest enerjisi A, Gibbs serbest enerjisi G ve entalpi E karenin sol kenarından başlayarak saat ibreleri yönünde karenin kenarlarının ortalarına yerleştirilir. Yine sol kenarın köşelerine aşağıdan başlayarak saat ibreleri yönünde entropi ve manyetizasyonun $-$ işaretlisi (S,-M) ve sağ kenarın köşelerine de saat ibreleri yönünde olacak şekilde sıcaklık ve manyetik alan (T,H) yerleştirilir. Her potansiyel iki yanındaki değişkenin fonksiyonu olur, örneğin $A=A(-M,T)$. Potansiyelin tam diferansiyeli, yanındaki değişkenlerin diferansiyelleri ile karşı köşegendeki değişkenle çarpımları toplamıdır, ancak diferansiyelden karşı köşeye ok yönünde gidiliyorsa $+$, zıt yönde gidiliyorsa $-$ işaretle katılır.

Stanley (1992) kritik üsleri anlatmadan önce manyetik bir sistemin termodinamik fonksiyonlarının elde edilmesinin konunun anlaşılmasını kolaylaştıracağını söyler.



Şekil 1.1 Termodinamik kare (Stanley,1992)

$$dU = TdS + HdM \quad (2.1.3)$$

$$dE = TdS - MdH \quad (2.1.4)$$

$$dG = -SdT - MdH \quad (2.1.5)$$

$$dA = -SdT + HdM \quad (2.1.6)$$

$$T = \left(\frac{\partial U}{\partial S} \right)_M \quad H = \left(\frac{\partial U}{\partial M} \right)_S \quad (2.1.7)$$

$$T = \left(\frac{\partial E}{\partial S} \right)_H \quad -M = \left(\frac{\partial E}{\partial H} \right)_S \quad (2.1.8)$$

$$-S = \left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_H \quad -M = \left(\frac{\partial G}{\partial H} \right)_T \quad (2.1.9)$$

$$-S = \left(\frac{\partial A}{\partial T} \right)_M \quad H = \left(\frac{\partial A}{\partial M} \right)_T \quad (2.1.10)$$

Manyetik tepki fonksiyonları: özısı ve alınganlık

$$C_M = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_M = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_M = -T \left(\frac{\partial^2 A}{\partial T^2} \right)_M \quad (2.1.11)$$

$$C_H = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_H = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_H = -T \left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2} \right)_H \quad (2.1.12)$$

izotermal alınganlık $\chi_T = \left(\frac{\partial M}{\partial H} \right)_T = \left(-\frac{\partial^2 G}{\partial H^2} \right)_T \quad (2.1.13)$

$$\chi_T = (C_H - C_M) = T\alpha_H^2 \text{ burada } \alpha_H \equiv \left(\frac{\partial M}{\partial T} \right)_H \quad (2.1.14)$$

$$C_H - C_M = T\alpha_M^2\chi_T \quad \text{burada } \alpha_M \equiv \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_M = -\frac{\alpha_H}{\chi_T} \quad (2.1.15)$$

2.1.4 Kritik üsler

Kritik noktada serbest enerjinin birinci türevi, manyetizasyon sürekli olmasına rağmen ikinci türevleri yani öz ısı ve alınganlık ıraksarlar.

Bütün spin sisteminin mikroskopik durumu

$$\{\sigma\} = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots\}$$

Bölüşüm fonksiyonu

$$Z_N = \sum_{\{\sigma\}} \exp(-\beta E(\{\sigma\})) \quad (2.1.16)$$

Serbest enerji

$$A = -kT \ln Z_N \quad (2.1.17)$$

Ortalama manyetizasyon

$$M(H,T) = \langle \sigma \rangle = -\frac{1}{N} \frac{\partial A(H,T)}{\partial H} \quad (2.1.18)$$

Alınganlık

$$\chi = \frac{\partial M(H,T)}{\partial H} = -\frac{1}{N} \frac{\partial^2 A(H,T)}{\partial H^2} \quad (2.1.19)$$

Enerji

$$U = A - T \frac{\partial A(H,T)}{\partial T} = -T^2 \frac{\partial A(H,T)/T}{\partial T} \quad (2.1.20)$$

Öz ısı

$$C = \frac{\partial U(H, T)}{\partial T} \quad (2.1.21)$$

Faz geçişinin tanımını yaparken kritik noktada niceliklerin singüler (tekil) davranışlarını da belirtmek gerekir. Kritik olayın modern teorilerinin bir başarısı da ölçekleme teorisidir ki, değişik kritik üsler arasında bağıntılar bulur. Kritik üsler ailesinin ilk bireyleri α , β , γ ve δ 'dir. Bunlar öz ısının, düzen parametresinin, alınganlığın ve durum denkleminin tekilliklerini tarif eder. İndirgenmiş sıcaklık $t = \frac{(T - T_c)}{T_c}$ cinsinden onları şu şekilde tarif edebiliriz.

Öz ısı $C \propto |t|^{-\alpha}$

Manyetizasyon $M \propto |t|^\beta$ (Düzen parametresi)

Alınganlık $\chi \propto |t|^{-\gamma}$

Durum denklemleri $M \propto |H|^\frac{1}{\delta}$ (T_c 'de)

Bir de sonlu örgü ölçeklemelerinde korelasyon uzunluğu ξ ve korelasyon fonksiyonunun $t=0$ 'da üstel bozunmasıyla ilgili kritik üsler vardır.

$\xi \propto |t|^{-\nu}$ ve $\Gamma(x) \sim x^{-p}$ burada $p = d - 2 + \eta$

Spinler birbiriyle etkileşiyorsa, korelasyon fonksiyonu önem kazanır. Korelasyon fonksiyonu sistemin farklı kısımlarının nasıl ilişkili oldukları ve etkileşmeler sonucu ortaya çıkan birlikte dalgalanmalar hakkında bilgi verir.

Manyetik sistemlerde manyetik momentlerin yönelimlerinin bir ölçüsü olan sıfır alan manyetizasyonu M en uygun düzen parametresidir. Weiss teorisi düzen parametresinin $M^2 \propto (T_c - T)$ şeklinde bir bağımlılık gösterdiğini öngörür. Bunu şu şekilde ifade etmek gelenekselleşmiştir: $(-t)^\beta$ burada $t = \frac{(T - T_c)}{T_c}$, β 0.3 ile 0.5 arasında bir değer alır. Kritik

üsleri belirlemek için elimizde kesin şekilde tanımlanmış eşitlikler olması gerekmez. Örneğin $M = B(-t)^\beta$ şeklindeki bir bağıntının geçerli olduğunu biliyorsak kritik bölgede

β 'nın deęerini tespit etmek için üç tane ölçüm yeterli olacaktır. Pratikte ise genellikle düzeltme terimleri olur. M şöyle bir şekilde sahip olabilir: $B_0(-t)^\beta \{1+B(-t)^x+\dots\}$ ve $x > 0$. β için aşağıdaki gibi bir doğal tanımlama yapılırsa; limit durumunda düzeltme terimleri düşecektir.

$$\beta = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\ln M}{\ln(-t)} \quad \text{yukarıdaki eşitlik ve l'Hospital kuralından} \quad \beta = \frac{d(\ln M)}{d\{\ln(-t)\}} \quad \text{eşitliği}$$

sağlanır. Kritik üsler deneysel verilerin log-log grafiklerinin eğiminden belirlenir. Bu üssü belirlemede çok hızlı bir yöntem olmasına rağmen kritik sıcaklıkla ilgili bir ön bilgi gerektirir. Bilinmiyorsa değişik β deneme deęerleri için $M^{1/\beta}$ 'nin çizimlerine başvurulur ta ki düz bir çizgi veren deęer bulunana kadar (Stanley 1992).

Stanley (1992) kritik üslerin elde edilmesindeki matematiksel mantığı şu şekilde tarif etmektedir: Kritik nokta civarında genel bir $f(t)$ fonksiyonunun davranışında rolü olan kritik üssü tanımlamak için

$$t = \frac{T - T_c}{T_c} = \frac{T}{T_c} - 1 \quad (2.1.22)$$

indirgenmiş sıcaklık tanımı kullanılacak. Bu $f(t)$ fonksiyonunun yeterince küçük ve pozitif t deęerleri için tanımlı olduğu ve

$$\lambda \equiv \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\ln f(t)}{\ln t} \quad (2.1.23)$$

limitinin var olduğu varsayılacak. Buradaki λ kritik üstür. $f(t) \sim t^\lambda$ şeklinde davrandığı düşünülebilir ama termodinamik fonksiyonlar bu kadar basit bir şekilde sahip değildir, genellikle düzeltme terimleri içerirler.

$$f(t) = At^\lambda(1+Bt^y+\dots) \quad [y > 0] \quad (2.1.24)$$

Kritik sıcaklığın çok yakınlarında fonksiyonun tam şekli belirlenemese bile ilk terimler yeterince baskın olacağından dolayı kritik üssün bilinmesi fonksiyonun davranışı hakkında oldukça tatmin edici bilgi verir. Bu bölgedeki deneysel verilerin log-log

grafığı çizildiğinde (genelde bu bir doğru olacaktır) eğimi kritik üssü verir yani fonksiyonun tam şekli belirlenemese bile kritik üssün belirlenmesi mümkündür. $\lambda < 0$ için $f(t)$ fonksiyonu kritik sıcaklıkta sonsuza ıraksarken, $\lambda > 0$ için sifıra yaklaşmaktadır. $\lambda = 0$ olması durumunda ise logaritmik ıraksama, sivri uçlu tekillik veya analitik bir fonksiyonun sıçrama süreksizliği durumlarından biri olabilir. Örnek olmak üzere

$$\frac{M_0(T)}{M_0(0)} = B \left(1 - \frac{T}{T_c} \right)^\beta [1 + \dots] \quad (2.1.25)$$

$$M \sim (-t)^\beta \quad (2.1.26)$$

$M_0(0)$ normalizasyon sabiti, B, sistemden sisteme küçük farklılıklar gösterebildiği için konulmuştur.

$$\frac{\chi_T}{\chi_T^0} = \begin{cases} 1'(-t)^{-\gamma'} (1 + \dots) & [T < T_c] \\ 1t^{-\gamma} (1 + \dots) & [T > T_c] \end{cases} \quad (2.1.27)$$

burada χ_T^0 kritik noktada manyetik momentleri etkileşmeyen bir sistemin (paramanyetik) manyetik alınganlığıdır.

$$\frac{H}{H_c^0} = D |M_H(T = T_c) / M_0(T = 0)|^\delta [T = T_c] \quad (2.1.28)$$

$H_c^0 \equiv \frac{kT_c}{m_0}$ burada m_0 spin başına manyetik momenttir.

$$C_H \equiv \begin{cases} A(-t)^{-\alpha'} (1 + \dots) [T < T_c] \\ At^{-\alpha} (1 + \dots) [T > T_c] \end{cases} \quad [H = 0] \quad (2.1.29)$$

Kritik üsler arasında bazı bağıntılar vardır ki bunlar klasik teorilerden elde edilen üs değerleriyle bazen eşitsizlik bazen eşitlik olarak sağlanmakta; elde edilen bazı deneysel veriler hata sınırlarıyla birlikte ele alındığında ise eşitlik şeklinde sağlanmaktadır.

Ayrıca sayısal çözümlerle elde edilen üslerle de yine eşitlikler şeklinde sağlanmaktadır. Bunlardan bazıları şunlardır:

$$\alpha' + 2\beta + \gamma' \geq 2 \quad \text{Rushbrooke eşitsizliği} \quad (2.1.30)$$

$$\varphi + 2\psi - 1/\delta \geq 1 \quad \text{Coopersmith eşitsizliği} \quad (2.1.31)$$

$$\alpha' + \beta(1 + \delta) \geq 2 \quad \text{Griffiths eşitsizliği} \quad (2.1.32)$$

$$d \frac{\delta - 1}{\delta + 1} \geq 2 - \eta \quad \text{Buckingham-Gunton eşitsizliği} \quad (2.1.33)$$

$$(2 - \eta)v \geq \gamma \quad \text{Fisher eşitsizliği} \quad (2.1.34)$$

$$\left. \begin{array}{l} dv' \geq 2 - \alpha' \\ dv \geq 2 - \alpha \end{array} \right\} \quad \text{Josephson eşitsizlikleri} \quad (2.1.35)$$

2.2 Ising Model

Pathria (1996) konuyu şu şekilde formüle ederek irdelemektedir. N tane örgü konum noktasının her biri büyüklüğü $g\mu_B\sqrt{J(J+1)}$ olan, $(2J+1)$ tane farklı yönelimi olabilen, μ manyetik momentine sahip atomlar tarafından doldurulmuş olsun. Bu durumda bütün örgü $(2J+1)^N$ tane şekillenime sahip olacaktır. Her bir dağılımın enerjisi E komşu atomların birbirleriyle etkileşmeleri ve tüm örgünün de bir H dış manyetik alanıyla etkileşmesinden kaynaklanacaktır. Kanonik kümede yapılan istatistiksel inceleme sonucunda $\bar{M}(H, T)$ net manyetizasyonun beklenen değeri ile belirli bir T_c kritik sıcaklığının altında kendiliğinden manyetizasyon $\bar{M}(0, T)$ olması ferromanyetik faz geçişi olduğunu gösterir. Yapılan detaylı teorik ve deneysel çalışmalar bu kendiliğinden manyetizasyonun $J=1/2$ değerine uygun olduğunu göstermiştir ki bundan şu sonucu çıkarabiliriz: Ferromanyetik olay, elektronların yörünge hareketlerinden değil sadece spinlerinden kaynaklanmaktadır. Yapılan deneylerden ilgili g değerinin 2'ye çok yakın

olduğu bunun da elektronu ($S=1/2$) işaret ettiği anlaşılmıştır. Bu durumda örgü konumu için iki yönelim mevcuttur. $S_z=+1/2$ ($\mu_z=+\mu_B$) ve $S_z=-1/2$ ($\mu_z=-\mu_B$) bu durumda örgü 2^N şekillenime sahiptir. Şimdi de i ve j konumlarındaki komşu iki spinin etkileşme enerjisini hesaplırsak kuantum mekaniğine göre bu enerji $K_{ij}\pm J_{ij}$ şekline sahiptir. (+) zıt yönelimli spinler, (-) paralel yönelimli spinler için. K_{ij} iki spin arasındaki Coulomb enerjisi, J_{ij} ise değiş-tokuş enerjisidir.

$$K_{ij} = \int \psi_i^*(1)\psi_j^*(2)u_{ij}\psi_j(2)\psi_i(1)d\tau_1d\tau_2 \quad (2.2.1)$$

$$J_{ij} = \int \psi_j^*(1)\psi_i^*(2)u_{ij}\psi_j(2)\psi_i(1)d\tau_1d\tau_2 \quad (2.2.2)$$

Buradaki u_{ij} etkileşme potansiyelidir. Paralel ve anti-paralel spin çiftleri arasındaki enerji farkı

$$\varepsilon_{\uparrow\uparrow} - \varepsilon_{\uparrow\downarrow} = -2J_{ij} \quad (2.2.3)$$

$J_{ij}>0$ için enerji minimumu açısından $\uparrow\uparrow$ durumu, $\uparrow\downarrow$ durumundan daha tercih edilir bir durumdur ve ferromanyetizma ile ilgilidir. $J_{ij}<0$ için bunun tam tersidir ve anti-ferromanyetizma durumudur. Spinler arası etkileşme enerjisini $\varepsilon_{ij}=\text{sabit}-2J_{ij}(S_i.S_j)$ şeklinde yazabiliriz. Buradaki sabit terimin önemi yoktur. J_{ij} değiş-tokuş etkileşmesi de spinler arası uzaklık arttıkça hızla düşmektedir ve en yakın komşular için J sabit değerinde alınabilir. O zaman örgünün etkileşme enerjisi

$$E = \text{sabit} - J \sum_{\text{e.y.k.}} (s_i.s_j) \quad (2.2.4)$$

burada toplama (e.y.k.) en yakın komşular üzerinden yapılmaktadır. Enerjisi bu şekilde verilen bir sistem Heisenberg modeli şeklinde adlandırılır. $(S_i.S_j)$ skaler çarpımı $(S_{ix}S_{jx}+S_{iy}S_{jy}+S_{iz}S_{jz})$ şeklindedir. Bu çarpımı $S_{iz}S_{jz}$ şeklinde aldığımızda

$$E = \text{sabit} - J \sum_{\text{e.y.k.}} \sigma_i\sigma_j \quad (2.2.5)$$

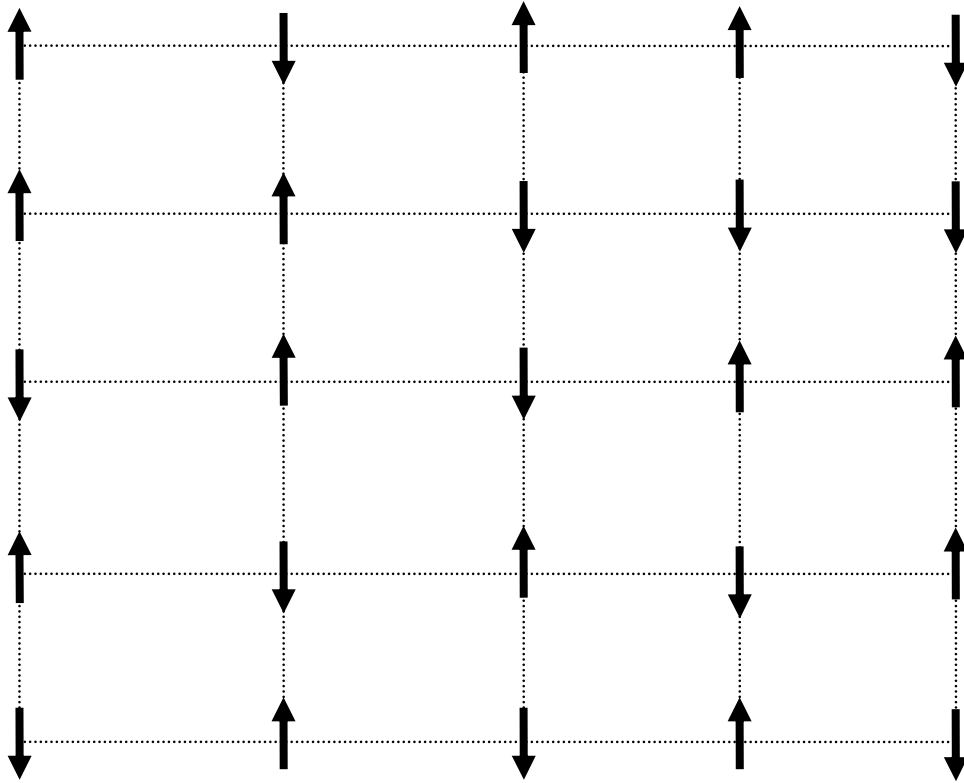
$\sigma_i = +1$ spin yukarı, $\sigma_i = -1$ spin aşağı durumunu gösterir.

$$\varepsilon_{\uparrow\uparrow} - \varepsilon_{\uparrow\downarrow} = -2J \quad (2.2.6)$$

olur. Etkileşme enerjisi (2.2.5) şeklinde olan sisteme Ising model denir. $J_z \gg J_x, J_y$ sistemin Hamiltonyenine giren spin bileşenini n ile gösterirsek Ising model için $n=1$ ve örgü uzay boyutu d ile birlikte kritik olayda belirleyici bir etkiye sahiptir. Şekil 2.1'de iki boyutlu bir örgü görülmektedir.

Faz geçişleri açısından inceleme yapmak için atomların kinetik enerjileri göz ardı edilip sadece etkileşme enerjileri göz önüne alınacak ve hesabı kolaylaştırmak için $+z$ yönünde küçük bir H dış manyetik alanı uygulandığı kabul edilecektir. Bu durumda sistemin Hamiltonyeni

$$H\{\sigma_i\} = -J \sum_{\text{e.y.k}} \sigma_i \sigma_j - \mu H \sum_i \sigma_i \quad (2.2.7)$$



Şekil 2.1 İki boyutlu örgü konumlarının aşağı ve yukarı yönlü spinler tarafından rastgele doldurulmuş bir konfigürasyonu.

bölüşüm fonksiyonu da

$$Z_N(H, T) = \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} \dots \sum_{\sigma_N} \exp[-\beta H\{\sigma_i\}] \quad (2.2.8)$$

$$= \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} \dots \sum_{\sigma_N} \exp \left[\beta \sum_{\substack{j \\ \text{e.y.k}}} \sigma_i \sigma_j + \beta \mu H \sum_i \sigma_i \right] \quad (2.2.9)$$

olacaktır.

2.3 Ortalama Alan Teorisi

Stanley (1992) ortalama alan teorisini şu şekilde tanımlamaktadır: Her bir manyetik momentin diğer momentlerle eşit şiddette etkileştiği sistemin modelidir. Doğadaki bir çok sistem kısa menzilli fakat güçlü etkileşmeler içerir, konu açısından önemli olan bu etkileşmelerin düzeni bir parçacıktan diğerine yayma şeklindedir.

İşe etkileşme olmayan N parçacıklı bir sistemle başlayalım. Bir H dış manyetik alanında Hamiltonyen

$$H_{\text{amiltonyen}} = -g\mu_\beta \sum_{i=1}^N S_i \cdot H \quad (2.3.1)$$

$$S_i \cdot H = m_i \cdot H$$

$$(m_i = -S, -S+1, \dots, 0, \dots, S-1, S)$$

g Lande faktörü

$$\mu_\beta = e\hbar/2mc \text{ Bohr magnetonu}$$

spin ile manyetik momenti arasındaki $-\mu = g\mu_\beta S$ bağıntısı kullanılıp, her bir durum uygun Boltzmann çarpanı ağırlığı ile dikkate alındığında sistemin $(2S+1)^N$ durumu üzerinden toplamı sonucunda bölüşüm fonksiyonu elde edilir. $\bar{\mu} = g\mu_\beta$ alıp

$$Z = \sum_{m_1=-s}^s \dots \sum_{m_N=-s}^s \exp(x \sum_{i=1}^N m_i) \quad (2.3.2)$$

$$x \equiv \frac{\bar{\mu}H}{kT} \quad (2.3.3)$$

iki düzeyli ($S=1/2$ olan) bir sistem için

$$Z = \prod_{i=1}^N \left\{ \sum_{m_i = -\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \exp(xm_i) \right\}$$

$$= 2^N \cosh^N\left(\frac{1}{2}x\right) \quad (2.3.4)$$

Genel S spinli bir sistem içinse

$$Z = \left[\frac{\sinh\left\{\left(S + \frac{1}{2}\right)x\right\}}{\sinh\left(\frac{x}{2}\right)} \right]^N \quad (2.3.5)$$

etkileşme olmadığı durum için bölüşüm fonksiyonu elde edilir. Paramanyetik bir sistemin bölüşüm fonksiyonu ve onunla ilgili diğer termodinamik fonksiyonları hesaplayabiliriz.

$$G(T, H) = -kT \ln Z \quad (2.3.6)$$

$$M(T, H) = -\left(\frac{\partial G}{\partial H}\right)_T = NkT \frac{\partial}{\partial H} \ln Z \quad (2.3.7)$$

$$= M_0 B_s(Sx) \quad (2.3.8)$$

$$M_0 \equiv M(T = 0, H = 0) = NS\bar{\mu} = NSg\mu_B \quad (2.3.9)$$

manyetizasyonun en büyük değeridir.

$$B_s(y) = \frac{2S+1}{2S} \coth\left(\frac{2S+1}{2S}y\right) - \frac{1}{2S} \coth\left(\frac{1}{2S}y\right) \quad (2.3.10)$$

Brillouin fonksiyonudur. $S=1/2$ özel durumu için

$$B_{\frac{1}{2}}\left(\frac{1}{2}x\right) = \tanh\left(\frac{x}{2}\right) \quad (2.3.11)$$

Ortalama alan teorisinin en temel kabulü şudur ki: Spinler arası etkileşme H dış manyetik alanına H_m şeklinde bir katkı getirir ve bu katkı da moleküler alan parametresi λ ile manyetizasyona şu şekilde bağlıdır:

$$H_{\text{etkin}} = H + \lambda M(T, H) \quad (2.3.12)$$

Bu durumda sistemin manyetizasyonu şu şekilde olur:

$$M = M_0 B_s \left\{ \beta \bar{\mu} S (H + \lambda M) \right\} \quad (2.3.13)$$

Dış manyetik alan yokluğunda

$$M = M_0 B_s (\beta \bar{\mu} S \lambda M) \quad (2.3.14)$$

Bu eşitlik kapalı formdadır çünkü M eşitliğin her iki tarafında da bulunmaktadır. $M=0$ bütün T değerleri için bir çözümdür. $M \neq 0$ için ise diğer çözüm şu şekilde elde edilir. Şekil 2.2'den de görüldüğü gibi eşitliğin sağ tarafının başlangıç eğimi sol tarafının başlangıç eğiminden büyüktür. Brillouin fonksiyonunun seri açılımı

$$B_s(y) = \frac{S+1}{3S} y - \frac{S+1}{3S} \frac{2S^2 + 2S+1}{30S^2} y^3 + \dots \quad (2.3.15)$$

kullanılarak sağ tarafın başlangıç eğimi

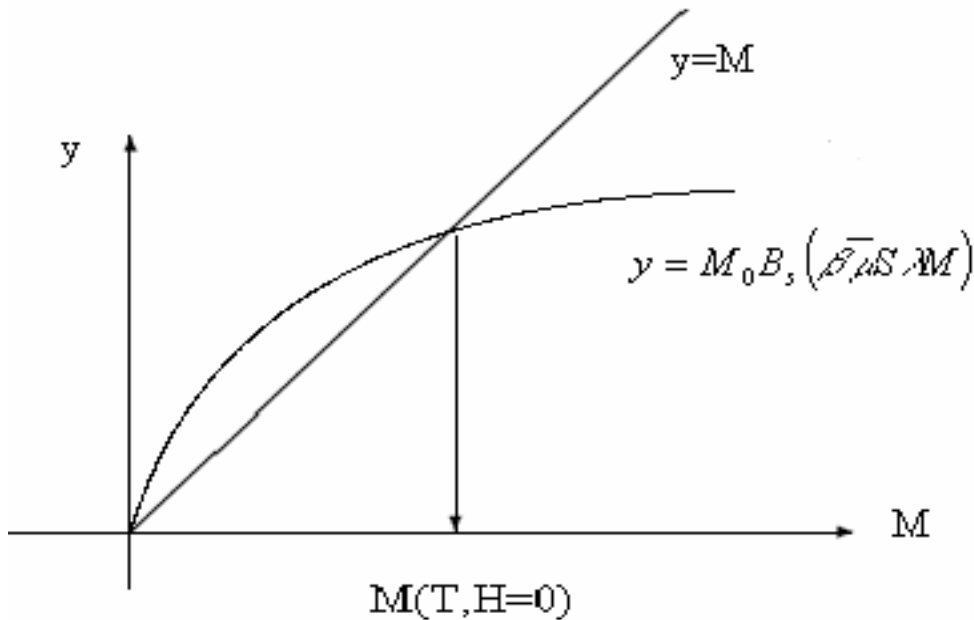
$$M_0 \left(\frac{S+1}{3S} \right) \frac{\bar{\mu} S \lambda}{kT} = C \frac{\lambda}{T} \quad (2.3.16)$$

$M_0 = N\bar{\mu}$ kullanılarak

$$C \equiv \frac{N\bar{\mu}^2 S(S+1)}{3k} \quad (2.3.17)$$

Curie sabiti bulunur. $T < \lambda C$ için fiziksel olarak anlamlı bir çözüm bulmak mümkündür, buna göre de kritik sıcaklık $T_c = \lambda C$ şeklinde verilir.

$\lambda=0$ için etkileşme olmadığı durum için $T_c=0$ elde edilir. Ortalama alan teorisi için kritik üsler: $\beta=1/2$, $\delta=3$, $\alpha=0$, $\gamma=1$.



Şekil 2.2 Eşitlik (2.3.14)'ün sağ ve sol taraflarının M 'ye karşı grafikleri. $M=0$ bütün T değerleri için çözüm varken, $M \neq 0$ için Brillouin fonksiyonunun eğimi 1'den büyük olduğu için sadece yeterince küçük T değerleri için çözüm olacaktır

Ayrıca Heisenberg modelinde tek bir spini küme olarak kabul edip diğer spinler için de $S_{iz} = \langle S_z \rangle$ ve $S_{ix} = S_{iy} = 0$ alınarak da ortalama alan teorisi yaklaşımı elde edilebilir.

Küme Hamiltoniyeni

$$H_{\text{amiltonyeni}} = \left(-2 \sum_i J_{ij} \langle S_z \rangle - \bar{\mu} H \right) S_{iz} \text{ olur.} \quad (2.3.18)$$

Bu modelin kritik sıcaklık tahmini

$$k \frac{T_c}{J} = \frac{2}{3} qS(S+1) \quad (2.3.19)$$

ifadesi ile verilir. Burada q koordinasyon (en yakın komşu) sayısıdır, elde edilen kritik sıcaklıklar deneysel sonuçlarla uyuşmaz. 2 boyutta üçgen örgünün ve 3 boyutta basit kübik yapının en yakın komşu sayısı 6'dır ve kritik sıcaklıkları aynı olarak tahmin edilir. Halbuki kritik olayda belirleyici konulardan birisi de boyuttur.

Kritik üs değerleri ortalama alan teorisinde boyut dikkate alınmadığı ve her parçacığın diğerleriyle etkileşmesi ortalama bir alan üzerinden hesaplandığından deneysel sonuçlarla pek örtüşmez. Bu yüzden gerçek fiziksel sistemlere benzetebilmek için yeni modeller geliştirilmiştir; bunlardan bir çoğunun bir ve iki boyutta (sadece küresel modelin üç boyutta) tam çözümü yapılabilmişse de üç ve üzeri boyutlarda tam çözümleri ya da dış manyetik alan varlığında iki ve üzeri boyutlarda tam çözümleri yapılamamıştır.

$$H_{\text{amiltonyen}}^{(D)} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i^{(D)} \cdot S_j^{(D)} \quad (2.3.20)$$

En genel şekilde yazılmış Hamiltonyen ifadesinde $S_i^{(D)}$ D-boyutlu birim vektörlerdir ve $-J$; i ve j konumlarına yerleşmiş en yakın komşu paralel spin çiftlerinin $\langle ij \rangle$ enerjisidir.

Örneğin $D=1$ için spinler bir boyutlu (yukarı ya da aşağı yönelimli) çubuklar şeklinde bir sistem oluşturur. Yarım spinli Ising model Hamiltonyeni oluşur ve bu Hamiltonyen tek bileşenli akışkanlar ve ikili karışımlara da uygundur. Bu model Lenz modeli ya da bir ve iki boyutta çözüldükten sonra Ising-Onsager modeli olarak adlandırılır.

$D=2$ için düzlemsel Heisenberg modelinin Hamiltonyeni elde edilir. $D=3$ boyutlu spinler için klasik Heisenberg modeline indirgenir. Klasik Heisenberg modeli kuantum

Heisenberg modelinin $S \rightarrow \infty$ limiti şeklinde düşünülebilir. $(2S+1)$ farklı yönelim yerine tüm yönler yönelebilen (sürekli) bir modeldir. Klasik Heisenberg modeli kuantum modelin düşük sıcaklık bölgesinde iyi olmayan bir yaklaşımı olmasına rağmen T_c kritik sıcaklığı yakınlarında kritik üsleri elde etmek için son derece gerçekçi bir yaklaşımdır. Kuantum Heisenberg modeline uyan EuO ya da EuS gibi çok az madde vardır, çünkü gerçek hayatta maddelerdeki spinler ya çok düzgün dağılmamışlardır ya da etkileşmeler tam olarak izotropik değildir. Hamiltonyen (2.3.20)'deki en düşük enerji seviyesi J 'nin işaretine bağlıdır. $J > 0$ için paralel komşu spinler, $J < 0$ için anti-paralel komşu spin yönelimleri en düşük enerjilidir.

$D \rightarrow \infty$ limitinde $d > 1$ için modeli çözmek çok kolaydır. $d=3$ boyutunda Berlin-Kac modeli $D \rightarrow \infty$ limitinde çözümü yapılan tek modeldir.

$d=1$ doğrusal zincir veya bir boyutlu zincirin spin boyutu $D=1$ için Hamiltonyeni Ernest Ising tarafından tam olarak çözülmüştür. Lenz-Ising model olarak da bilinen bu modeli bir boyutta $H=0$ ve $T \neq 0$ durumunda faz geçişinin var olduğunu göstermek için çözen Ising faz geçişinin sadece $T=0$ 'da olacağını görmüş; çok şaşırmış ve bu sonucunu 2 ve 3 boyuta da genelleştirmiştir. Evet ama sadece 1 boyut için elde ettiği sonuçlar doğrudur; bölüşüm fonksiyonu, iki spin korelasyon fonksiyonu, manyetik alınganlık, öz ısı ve diğer fonksiyonları doğru bir şekilde elde etmeyi başarmıştı.

Transfer matris metodu denilen yöntemin kullanılması $d=2$ boyutta $H=0$ için Onsager'in tam çözümüne giden yolu açmıştır. Tam çözümün yapılamadığı durumlarda sayısal yaklaşım tekniklerine başvurulur, bu tekniklerde elde edilen sonuçlar çoğu zaman deneysel sonuçlardan daha kesindir yani hata oranı daha düşüktür. Bu teknikler çoğu zaman fiziği geri planda bıraksa da kuvvet kanunu şeklindeki tekillik sayısal bir çalışma sonucunda bulunmuştur.

Başarılı yaklaşım metotları ya ilgili termodinamik fonksiyonu sıcaklığın (T) artan kuvvet serisine (düşük sıcaklık serisi) açmak ya da sıcaklığın tersinin kuvvet serisine (yüksek sıcaklık serisi) açmak şeklindedir. $\exp(-\beta H)$ 'ın yüksek sıcaklık serisini

$$\exp(-\beta H) = 1 - \beta H + \frac{1}{2}(\beta H)^2 + \dots \quad (2.3.21)$$

bölüşüm fonksiyonunu da

$$Z_N(T, H) = \text{Tr}(\exp(-\beta H)) \quad (2.3.22)$$

şeklinde yazıp Tr ifadesini kesikli değerler alan sistemler için izinli durumların toplamı, sürekli sistemler için ise manyetik momentlerin faz uzayında izin verilen kısımlarının integrali şeklinde düşüneceğiz.

Bölüşüm fonksiyonu serisinin ilk N terimini yazabilirsek diğer termodinamik fonksiyonların da ilk N terimlerini elde edebiliriz. Korelasyon fonksiyonu bölüşüm fonksiyonunun içermediği bir takım bilgileri (korelasyonların menzili vb.) içerdiğinden onun da yüksek sıcaklık seri açılımı hesaplanmalıdır. Bu hesaplanırken kritik davranışın örgü boyutuna bağlı olduğu sonucuna ulaşılır. Tabii ki bu serilerin kaçınıcı terimde kesileceğine ekstrapolasyon ile karar verilir yoksa kestiğimiz seri öngörülen termodinamik fonksiyonun tekilliğini vermeyebilir.

Pathria (1996) ortalama alan teorisinin komşu spinler arası etkileşme dalgalanmalarını ihmal ettiğini ve komşularının ortalamasıyla etkileştiğini kabul ettiği için kritik sıcaklıkta faz geçişini açıklamakta yetersiz kaldığını ileri sürer. Ancak etkileşimler uzun menzilli olduğu ya da uzay boyutu artırıldığında ($d \geq 4$) bu dalgalanmaların ortalaması alındığından ya da alakasız değişken durumuna geldiklerinde doğru sonuçlar verdiğini söyler.

2.4 Üslerin Klasik Landau Teorisi

2.4.1 Kritik nokta civarında açılımlar

Klasik teorilerin öngördüğü durum denklemleri kritik nokta civarında deneysel olarak gözlemlenen davranışları tahmin etmede başarısız olmaktadır. Bir termodinamik potansiyelin kritik nokta yakınlarında mümkün genel formlarıyla ilgili en basit ve en mükemmel kuramlardan biri Landau teorisidir. Landau teorisinin kritik nokta değerleri klasik teorilerinkilerle aynıdır yani bu değerler deney sonuçlarıyla uyumsuzluk gösterir.

Bu uyumsuzluğun nedeni olarak da Landau teorisinin kurulmasının temeli olan “bir termodinamik potansiyel kritik nokta civarında seriye açılabilir” şeklindeki gerçekçi olmayan varsayımdır, bu seri her zaman yakınsak olmayabilir. Örneğin manyetik bir sistemin Gibbs potansiyeli $G(T,H)$, $T=T_c$, $H=0$ 'da seriye açılmak istenirse T ve H değişkenlerine göre kısmi türevler olacaktır:

$$-\left(\frac{\partial^2 G}{\partial H^2}\right)_{T=T_c, H=0} = \chi_T (T = T_c, H = 0) \quad (2.4.1)$$

Kritik noktada manyetik bir sistemin izotermal alınganlığı sonsuz olacağından Gibbs potansiyelinin seriye açılımı yakınsak olmayacaktır. Bunun yerine Helmholtz potansiyeli $A(T,M)$ seriye açılırsa

$$\left(\frac{\partial^2 A}{\partial M^2}\right)_{T=T_c, M=0} = \chi_T^{-1} (T = T_c, M = 0) \quad (2.4.2)$$

sonlu (aslında sıfır) olacaktır ama

$$-T\left(\frac{\partial^2 A}{\partial T^2}\right)_{T=T_c, M=0} = C_M (T = T_c, M = 0) \quad (2.4.3)$$

ifadesi muhtemelen sonsuz olacaktır. Böylelikle kritik noktada yakınsak bir kuvvet serisi üretme çabaları sonuçsuz kalacaktır. Kuvvet serisinin yüksek mertebeden katsayılarında tekillikler olabilir. Landau katsayılarıdaki tekilliklerin mertebesinin hesaplamalarda kullanılan açılım terimlerinin mertebelerinden yüksek olacağını varsaydığı için, kritik bölge ile ilgili tahminleri elde etmek için düşük mertebeli katsayıları incelemenin yeterli olacağını kabul etmiştir.

2.4.2 Landau teorisinin varsayımları

Helmholtz potansiyelinin $M=0$, $T=T_c$ civarında iki değişkenli fonksiyonların standart Taylor serisi şeklinde açılımı

$$A(T, M) = \sum_{j=0}^{\infty} L_j(T) M^j = L_0(T) + L_2(T) M^2 + L_4(T) M^4 + \dots \quad (2.4.4)$$

burada $L_j(T)$ katsayıları da $T=T_c$ civarında açılabilir.

$$L_j(T) = \sum_{k=1}^{\infty} l_{jk} (T - T_c)^k = l_{j0} + l_{j1} (T - T_c) + \dots \quad (2.4.5)$$

$A(T, M)$ M 'nin çift fonksiyonu olduğundan tek j değerleri için $L_j(T)=0$. Bu durumda

Landau teorisindeki durum denklemi $H = \left(\frac{\partial A}{\partial M} \right)_T$ denklemi de kullanılarak

$$H = H(M, T) = \sum_{j=1}^{\infty} j L_j(T) M^{j-1} = 2L_2(T) M + 4L_4(T) M^3 + \dots \quad (2.4.6)$$

olur. M 'ye göre Helmholtz potansiyelinin bir kez daha türevi alınırsa izotermal duyarlılığın tersi

$$\chi_T^{-1} = \left(\frac{\partial^2 A}{\partial M^2} \right)_T = \left(\frac{\partial H}{\partial M} \right)_T \quad (2.4.7)$$

$$\chi_T^{-1} = \sum_{j=2}^{\infty} j(j-1) L_j(T) M^{j-2} = 2L_2(T) + 12L_4(T) M^2 + \dots \quad (2.4.8)$$

elde edilir. Manyetik sistemlerle ilgili bilgilerimiz $L_j(T)$ katsayılarına bazı sınırlamalar daha getirir. Örneğin $T \rightarrow T_c^+$ limitinde sıfır alan manyetik duygunluğunun sonsuza yaklaşması beklenir (2.4.5) ve (2.4.8) denklemlerinden

$$\chi_T^{-1}(T, 0) = 2L_2(T) = 2 \{ l_{20} + l_{21} (T - T_c) + l_{22} (T - T_c)^2 + \dots \} \quad (2.4.9)$$

elde edilir. Burada l_{20} sıfır olması gerektiği sonucu çıkar. Diğer bir sınırlama da sabit sıcaklıkta Helmholtz potansiyelinin, manyetizasyonun dış bükey bir fonksiyonu olmasıdır. $T > T_c$ için tüm l_{jk} katsayıları $l_{jk} \geq 0$ seçilirse $A(T, M)$ M 'nin dış bükey bir

fonksiyonu olacaktır. Fakat bu seçim de $A(T,M)$ 'nin sıcaklığın iç bükey bir fonksiyonu olması şartını ihlal edecektir. $T < T_c$ için $A(T,M)$ 'nin M 'ye göre dış bükey olacağını garanti edemeyiz. Denklem (2.4.9)'da $l_{21} \geq 0$ olması durumunda T aşağıdan T_c 'ye yaklaştığı zaman izotermal duygunluk negatif olacaktır. T_c 'nin altında M 'ye göre $A(T,M)$ 'nin dış bükeyliğini yeniden sağlamak için (2.4.4) ve (2.4.5) denklemlerinde basit bir değişiklik yapılarak $(T-T_c)$ 'nin yerine $|T-T_c|$ konulur. Bu değişiklik de bir başka olumsuzluk içerir. (2.4.5) denkleminde $|T-T_c|$ 'nin varlığı M 'nin sabit bir değeri için (henüz sıfır değil) $A(T,M)$ 'de $T=T_c$ 'de matematiksel ıraksamalar olacaktır. Halbuki $M \neq 0$ durumlarında $A(T,M)$ 'nin T 'nin analitik bir fonksiyonu olması istenir.

2.4.3 Landau teorisinin kritik nokta tahminleri

(2.4.6) durum denkleminde $H=0$ ve küçük M değerleri için

$$0 = \{l_{21}(T - T_c) + \dots\} + 2M^2 \{l_{40} + l_{41}(T - T_c) + \dots\} + \dots \quad (2.4.10)$$

$$M = \left(\frac{l_{21}}{2l_{40}} \right)^{\frac{1}{2}} (T_c - T)^{\frac{1}{2}} \quad (2.4.11)$$

buradan manyetizasyon kritik üssünün $\beta=1/2$ olduğu görülür.

(2.4.8) denkleminde izotermal alınganlık

$$\chi_T^{-1}(T, M) = 2\{l_{21}(T - T_c) + \dots\} + 12M^2 \{l_{40} + l_{41}(T - T_c) + \dots\} \quad (2.4.12)$$

bu denklemde $T > T_c$ ve $H=0$ olduğunda $M=0$ olacağından sıfır alan alınganlığın

$$\chi_T^{-1}(T, 0) = 2l_{21}(T - T_c) + \dots \quad (2.4.13)$$

$\gamma=1$ olduğu görülür. $T < T_c$ durumunda ise sıfır alan manyetizasyonu sıfırdan farklıdır denklem (2.4.11)'deki M^2 denklem (2.4.12)'de yerine yazılırsa

$$\chi_T^{-1} = 4l_{21}(T_c - T) + \dots \quad (2.4.14)$$

$\gamma'=1$ ve $\gamma=\gamma'$ olduğu görülür. $T<T_c$ 'de alınganlığın $T>T_c$ 'dekenden 2 kat daha hızlı sıfırdan uzaklaştığı sonucuna varılır ki Landau teorisinin ortalama alan teorilerinin kritik üslerini tahmin etmekle kalmayıp bu oranı bile tahmin edebilecek kadar başarılı olduğu anlaşılır.

$T=T_c$ 'de eşsıcaklık eğrisini elde etmek için denklem (2.4.6)'da T yerine T_c yazılırsa

$$H(T_c, M) = 4l_{40}M^3 + \dots \quad (2.4.15)$$

ve $\delta=3$ elde edilir.

α ve α' üsleri $C_H(T, H=0) = -T \left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2} \right)_H$ 'ın davranışlarını tanımlamada kullanılır.

(2.4.4)'deki Landau açılımı $A(T, M)$ Helmholtz potansiyeli için olduğundan önce

$C_M = - \left(T \left(\frac{\partial^2 A}{\partial T^2} \right) \right)_M$ 'yi hesaplamak ve sonra da $C_H - C_M = T\alpha_M^2 \chi_T$ denkleminde C_H 'ı

elde etmek en iyi yaklaşım olacaktır.

$T>T_c$ için $H=0$ durumunda $M=0$ olacaktır. (2.4.4) denkleminde

$$C_H = C_M = -T \left\{ 2l_{02} + 6l_{03}(T - T_c) + \Theta([T - T_c]^2) \right\} \quad (2.4.16)$$

$T<T_c$ için (2.4.11) denklemini kullanarak

$$C_M = -T \left[2l_{02} + \left\{ 6l_{03} - \left(\frac{l_{21}l_{22}}{l_{40}} \right) \right\} (T - T_c) + \dots \right] \quad (2.4.17)$$

$\alpha_M \equiv \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_M$ ve χ_T için gerekli denklemler kullanılarak

$$C_H - C_M = T \left(\frac{l_{21}^2}{2l_{40}} \right) \{ 1 + \Theta(T - T_c) \} \quad (2.4.18)$$

(2.4.17) ve (2.4.18) denklemlerinden $T=T_c$ 'de C_H 'ın

$$\Delta C_H = \left\{ \left(\frac{I_{21}^2}{2I_{40}} \right) - 2I_{20} \right\} T_c \quad (2.4.19)$$

büyükliğünde basit bir sıçrama süreksizliğine sahip olduğu görülür $\alpha = \alpha' = 0$.

Landau teorisi kritik olayı açıklamada iki yönden başarısızdır. İlki (2.4.4) açılımı $A(T, M)$ 'nin T ve M 'ye göre kısmi türevlerinin var ve sonlu olduklarını kabul eder. Özellikle (2.4.4) açılımı öz ısısı sonsuza ıraksayan sistemler için geçerli değildir. Örneğin Fisher'e göre iki boyutlu Ising model için (sıfır alan Helmholtz potansiyeli Gibbs potansiyeline özdeşdir) $T > T_c$ durumunda

$$A(T, 0) = A(T_c, 0) + a(T - T_c) + b(T - T_c)^2 \ln(T - T_c) + \dots \quad (2.4.20)$$

şeklinde yazılabilir. Sonuç olarakta sıcaklığa göre ikinci türevi alınarak öz ısının

$$C_M = -2bT \ln(T - T_c) - 3bT \quad (2.4.21)$$

şeklinde logaritmik bir tekilliği olması gerekir. Kritik sıcaklıkta çoğu manyetik sistemler sonlu öz ısıya sahip olmaktadır. Herhangi bir niceliğin sonsuz olduğunu deneysel olarak ispatlamak mümkün değildir. Sistemler üzerindeki ölçümler de $C(T = T_c)$ sonlu olabileceğini $T = T_c$ ' de sivri uçlu tekillik olduğunu gösterir. Sonuç olarak Landau teorisi bir üst mertebede bile hala başarısızdır. Bu teori daha çok geçiş sıcaklığında öz ısısı sonlu olan ferroelektrik, süper iletkenlik gibi sistemleri daha iyi tanımlamaktadır. İkinci olarak ise Landau teorisinin tahmin ettiği kritik nokta üslerinin çoğu deneylerle elde edilen üs değerleriyle uyumlu değildir. Landau teorisiyle ilgili daha kapsamlı bilgi için Stanley (1971)'e başvurulabilir.

2.5 Korelasyonlar

Baxter (1982) i. ve j. spinler arasında korelasyonu

$$g_{ij} = \langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle \quad (2.5.1)$$

şeklinde belirtir. Eğer sistemin enerjisi öteleme altında değişmez kalıyorsa $\langle s_i \rangle = \langle s_j \rangle = M(H, T)$, $g_{ij} = g(r_{ij})$ olur ve $g(r)$ korelasyon fonksiyonu i ve j spinler arasındaki mesafeye r_{ij} bağlı olarak değişir.

Kritik sıcaklıktan uzakken korelasyon fonksiyonu r 'nin büyümesiyle üstel olarak azalır, \vec{k} sabit birim vektör olmak üzere

$$g(\vec{x}\vec{k}) = x^{-\tau} e^{-\frac{x}{\xi}} \quad x \rightarrow \infty \quad (2.5.2)$$

burada τ herhangi bir sayı ve ξ de korelasyon uzunluğudur. Korelasyon uzunluğu H ve T 'nin bir fonksiyonudur ve kritik sıcaklıkta ∞ olur (ıraksar).

$$\begin{aligned} \xi(0, T) &\sim t^{-\nu} & t \rightarrow 0^+ \\ &\sim (-t)^{-\nu'} & t \rightarrow 0^- \end{aligned}$$

ν ve ν' korelasyon uzunluğu kritik üsleridir. Kritik sıcaklıkta uzun mesafe korelasyonları izotropik olur ve kritik üsler de yönden bağımsız olur, korelasyon fonksiyonu da kuvvet kanununa uygun olarak azalır:

$$g(r) \sim r^{-d+2+\eta} \quad (2.5.3)$$

ölçekleme hipotezine göre T_c kritik sıcaklığı yakınlarında $r \sim \xi$ olur.

Pathria (1996) $g(i, j) = \langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle$ fonksiyonunu $i=j$ için i konumundaki spin değişkeninin ortalama kare dalgalanmaları olarak da düşünülebilir demektedir.

$$g(i, j) = \langle (s_i - \langle s_i \rangle)(s_j - \langle s_j \rangle) \rangle \quad (2.5.4)$$

şeklinde de yazabiliriz. Sistemin i ve j konumlarındaki düzen parametresinin dalgalanmalarının korelasyonunun bir ölçüsü olarak da yorumlayabiliriz. Dalgalanma dağılıma teoremine göre manyetik alınganlık korelasyon fonksiyonlarının i ve j üzerinden toplanmasına eşittir.

$$\chi = \beta (\overline{M^2} - \overline{M}^2) \quad (2.5.5)$$

$$= \beta \mu^2 \sum_i \sum_j g(i, j) \quad (2.5.6)$$

homojenlik olduğunda ($r=r_i - r_j$)

$$\chi = N\beta\mu^2 \sum_r g(r) \quad (2.5.7)$$

2.6 Ölçekleme Teorisi

Stanley (1971) termodinamik fonksiyonların ölçekleme hipotezine ilişkin çalışmasında kritik nokta üsleri arasındaki eşitsizliklerin bazı durumlarda eşitlik olarak sağlandığına değinir. Henüz kesin olarak ispatlanamamış olmasına rağmen statik ölçekleme yasası veya homojen fonksiyon yaklaşımı da denilen bu yönteme göre bu eşitsizliklerin eşitlik şeklinde sağlandığı gösterilmektedir ve henüz tersi de ispatlanmış değildir. Kritik üslerin ortalama alan teorisindeki değerlerini aldığı ileri süren Landau teorisinin aksine ölçekleme yaklaşımı kritik üs değerlerini vermek yerine onlar arasında bağıntılar verir ve durum denklemini tahmin etmeye çalışır. Statik ölçekleme fikrini Widom, Domb ve Hunter ileri sürmüşler Kadanoff ise bunu korelasyon fonksiyonuna uygulayan ilk isim olmuştur.

Huang (1987) bu konuya şöyle yaklaşmaktadır. Adından da anlaşılacağı gibi ölçekleme teorisi uzunluk ölçeğinin değişmesiyle niceliklerin nasıl değişeceğini belirler. Boyutlu bir niceliğin değeri uzunluk ölçeğinin standart birimleri cinsinden ifade edilir ve standart birim değişirse o da değişir. Bu durumda boyutlu birimler boyutlarına uygun bir şekilde değişirken boyutsuz bir nicelik değişmez kalacaktır. Önemli ölçekleme kanunları kritik sıcaklık yakınlarında ξ korelasyon uzunluğunun sistemin karakteristik tek uzunluğu olduğunu ve diğer termodinamik fonksiyonların ölçekleme kanunlarının bu uzunluk cinsinden türetilbileceği varsayımından yola çıkar.

Dobrosavljevic (2005) kritik nokta yakınlarında ξ korelasyon uzunluğu örgü noktasının uzunluğundan çok daha uzun $\xi \gg a$ olduğu için, kritik davranışta uzun mesafe dalgalanmalarının baskın gelip sistemin kısa ölçekli detaylarını süpürdüğünü alakasız hale getirdiğini ileri sürer. Zaten ölçekleme hipotezlerinde bu kısa menzil detaylar değil düzen parametresinin simetrisi ve boyutun önemi vardır. Aynı çalışmada Kadanoff'un kritik sıcaklığın çok yakınlarında tek tek spinleri ele almaktansa spin kümelerini ele alarak yeni bir yaklaşım geliştirdiği, bunun da Wilson'un renormalizasyon grup metodunu geliştirmesine neden olduğundan bahseder.

Sun (1999)'a göre $\xi \gg L$ olduğunda sonlu örgü etkileri görülür. $\xi \gg L(t, H, \infty)$ olduğunda sistem boyutu uzun menzil korelasyonlarını keser ve kritik noktadaki tekilliklerde kayda değer bir yuvarlaklaşma hatta bir miktarda kayma görülür. Örneğin L doğrusal boyutlu bir sistemde manyetik alınganlık T_c 'den farklı bir T_L sıcaklığında pik (tepe) yapar, onun maksimumu için şöyle bir yaklaşım yapılabilir;

$$\chi(L, T_L) \sim |T_L - T_c|^{-\gamma} \quad (2.6.1)$$

buradaki T_L değeri ξ korelasyon uzunluğunun üst limiti L değerine ulaştığı sıcaklıktır.

$\xi(L, T_L) \sim L \sim |T_L - T_c|^{-\nu}$ buradan $|T_L - T_c| \sim L^{-\frac{1}{\nu}}$ $L \rightarrow \infty$ limitinde $T_L \rightarrow T_c$ olacağından $\chi(L, T_c) \sim L^{\frac{\gamma}{\nu}}$ benzer işlemler yapılarak $M(L, T_c) \sim L^{-\frac{\beta}{\nu}}$ ve $C(L, T_c) \sim L^{\frac{\alpha}{\nu}}$ elde edilir.

Bunlardan başka bir de dinamik kritik üs z vardır ki, kritik yavaşlamanın bir ölçüsüdür. Kritik yavaşlamayı şu şekilde tanımlayabiliriz: Kritik sıcaklığa yaklaştıkça korelasyon fonksiyonu ıraksamaya başlar. Örneğin Ising modelde değiş-tokuş etkileşmesinden dolayı spinler komşularıyla aynı yönde olma eğilimindedirler. Sistemde büyük spin kümeleri vardır ve bu kümelerdeki spinlerin hepsi aynı yönü gösterirler. Bu kümedeki spinlere correlated (ilişkilendirilmiş) gözüyle bakabiliriz. Kritik noktada her büyüklükte küme bulmak mümkündür, bunların en genişinin ölçüsü korelasyon uzunluğu ξ 'dir. Var olan bu kümelerin bozulması ve yeni bir kümeler konfigürasyonu oluşturmak için geçen zamana dekorelasyon zamanı τ diyelim.

Kritik noktada bir kümenin ortasındaki bir spinin yönünün değişmesi olasılığı oldukça düşüktür. Spin kümeleri sadece sınırlardan (kenarlarından) değiştirilir bu da korelasyon uzunluğuna kuvvet kanunuyla bağlı olan dekorelasyon zamanının artmasına neden olur.

$$\tau \propto \xi^z \quad (2.6.2)$$

buradaki z dinamik kritik üstür. Simülasyonlarda doğrusal boyutu L olan örgüler kullanıldığı için sonlu örgülerde korelasyon uzunluğu L örgü uzunluğu ile sınırlandırılır.

$$\tau \propto L^z \quad (2.6.3)$$

Sonlu sistemlerde kritik sıcaklıkta korelasyon uzunluğu iraksamaz sadece keskin bir eğimle pik değerine ulaşır. Simülasyonlarda dekorelasyon zamanı doğrusal boyut L 'ye kuvvet kanunuyla bağlıdır. İki boyutlu Ising modelde z dinamik kritik üssü 2 civarındadır. $L=32$ örgü boyutlu bir sistemde birbirinden istatistiksel olarak bağımsız 100 konfigürasyon elde etmek için geçen süre t ise sistemin boyutu 2 çarpanı ile artırıldığında $L=64$ olan sistemde birbirinden istatistiksel olarak bağımsız 100 konfigürasyon elde etmek için geçen süre $16t$ olacaktır. Genel olarak L doğrusal boyutlu bir sistemde sabit sayıda istatistiksel olarak bağımsız konfigürasyonlar elde etmek için gerekli CPU zamanı L^{d+z} ile orantılıdır. Burada d uzay boyutu ve z ona uygun dinamik kritik üstür.

Aktekin (2000)'e göre geleneksel sonlu örgü ölçekleme bağıntıları $d \geq 4$ boyutlarına uygulanamaz, $d \geq 5$ boyutlardaki sonlu örgü ölçekleme bağıntıları onlardan farklıdır.

Detaylı denge

Fiziksel bir sistem temel bir değişkenler kümesi ile tanımlanır ve bu değişkenlerin alabildiği tüm değerlerde konfigürasyon uzayını oluşturur. Konfigürasyon uzayında herhangi bir anda sistem bir nokta ile temsil edilir. Örneğin düzlemde hareket eden parçacık koordinatları x , y ve momentumunun P_x , P_y bileşenleri ile tanımlanır ve sistemin gelişimi konfigürasyon uzayında bir noktanın hareket etmesiyle temsil edilir.

Dengedeki bir sistemin kopyalarından oluşan bir koleksiyon alalım ve her bir kopyanın zaman içerisinde gelişmesine izin verelim. Herhangi bir anda farklı kopyalar mümkün olan bütün konfigürasyonlarda bulunabilirler bu da faz uzayında bir olasılık dağılımı oluşturur. Bir kopyanın konfigürasyon uzayında bir t anında C noktasında bulunma olasılığı $P(C,t)$ şu temel denklemi sağlar.

$$\frac{d}{dt}P(C,t) = \sum_{\alpha} [P(C_{\alpha},t)W(C_{\alpha} \rightarrow C) - P(C,t)W(C \rightarrow C_{\alpha})] \quad (2.6.4)$$

Burada C_{α} konfigürasyon uzayında herhangi bir nokta, $W(C \rightarrow C_{\alpha})$ ve $W(C_{\alpha} \rightarrow C)$ sırasıyla C noktasından C_{α} noktasına geçiş yapma olasılığı ve tam tersidir. Koleksiyon dengede olduğundan olasılık dağılımı zamandan bağımsızdır ve bütün t'ler için $P(C,t)=0$ herhangi bir anda C'den ve C'ye geçişlerin sayısı eşittir. Konfigürasyon uzayında her nokta için (2.6.4) şeklinde denklemler mevcuttur ve bunların tamamı temel denklemi oluşturur. Dengedeki sistemlerin simülasyonunda algoritmalarda geçiş olasılıkları W'lar öyle seçilmelidir ki temel denklem sıfıra eşit olmalıdır; sistemin ergodik olmak şartıyla dengeye ulaşması ve dengede kalması garantilenmiş olsun. Detaylı denge şartı iki konfigürasyon arasında geçiş olasılıklarını şu şekilde ilişkilendirir:

$$P(C_1)W(C_1 \rightarrow C_2) = P(C_2)W(C_2 \rightarrow C_1) \quad (2.6.5)$$

zamandan bağımsız olduğu için zaman belirtilmedi. (2.6.5) eşitliği temel denklemi sağlamaktadır. Olasılıkların dağılımı için en uygun dağılım Boltzmann dağılımıdır. Sistemin E enerjili C noktasında bulunma olasılığı

$$P(C) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E} \quad (2.6.6)$$

$\beta=1/kT$ ve Z bölüşüm fonksiyonudur. Denklem (2.6.5)'i (2.6.6)'da yerine yazarsak

$$\frac{W(C_1 \rightarrow C_2)}{W(C_2 \rightarrow C_1)} = e^{\beta(E_1 - E_2)} \quad (2.6.7)$$

Geçiş olasılıkları için gereken şart elde edilmiş olur.

3. ALGORİTMALAR VE SİMÜLASYONLAR

3.1 Ising Modelinin Simülasyonu için Algoritmalar

Kalay (2001) bu konuyu incelediği çalışmasında şu bilgileri vermektedir: Fiziksel sistemlerin davranışlarını inceleyebilmek için çeşitli modeller vardır: Örgü gazı modeli, Potts modeli, X-Y ve Heisenberg modeli, Gausyen ve küresel model, perkolasyon modeli vb. Ising modeli faz geçişi yapabilen bir sistemi en etkili bir biçimde anlatan modeldir. Bu modeli W. Lenz (1920) basit bir ferromanyetik model olarak bulmuştur. Ising modelin bir boyutlu uzayda çözümü 1925 yılında Ernest Ising tarafından gerçekleştirilmiştir. Ising bir boyutlu uzayda paramanyetizmadan ferromanyetizmaya faz geçişi olmadığını göstermiştir, yani $T \neq 0$ durumunda faz geçişi yoktur. Onsager iki boyutlu uzayda Ising modelinin analitik tam çözümünü dış manyetik alan yokluğunda gerçekleştirmiştir (1944). Onun bu çözümünden üslerin Landau teorisinin o ana kadar doğru verdiği düşünülen kritik üslerden oldukça farklı olduğu görülmüştür. Ne dış manyetik alanın varlığında iki ve ne de alan yokluğunda üç boyutlu Ising modellerinin analitik çözümü henüz yapılamamıştır. Ising modeli ferromanyetik maddenin termodinamik özelliklerini incelemek için kurulmuş bir modeldir. Ising modelinin simülasyonu yapılırken incelenen sistem sabit noktalardan oluşan çok boyutlu periyodik bir örgü olarak alınır. Örgünün geometrik yapısı iki boyutlu uzayda kare, üçgen vb. üç boyutlu uzayda küp vb. daha yüksek boyutlu uzaylarda genel olarak soyut küp (hypercube) olabilir. Her örgü konumuna +1 veya -1 değerlerinden birini alabilen S_i ($i=1, 2, \dots, N$) spin değişkeni takılmıştır. Sistemde bundan başka değişken yoktur. Eğer $S_i=+1$ ise i . konumdaki spinin yukarı yöneldiği ve $S_i=-1$ ise i . konumdaki spinin aşağı yöneldiği söylenir. Verilen bir $\{S_i\}$ spin kümesi bütün sistemin konfigürasyonunu belirtmektedir. $\{S_i\}$ ile belirtilen konfigürasyona sahip olan bir sistemin enerjisi aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır:

$$E_I = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - H \sum_{i=1}^N S_i \quad (3.1.1)$$

Burada I alt indisi Ising enerjisini, $\langle ij \rangle$ de toplamın en yakın komşu spin çiftleri üzerinden alınacağını göstermektedir. Sistem düzgün bir H manyetik alanı ile ya aynı yönde ya da zıt yönlü olmaya zorlanan mıknatıslar şeklinde düşünülebilir. J_{ij} eşleşme sabiti, H ise dış manyetik alandır. İzotropik etkileşmelerin söz konusu olduğu durumda $J_{ij}=J$ alınır. Eğer $J>0$ ise, komşu spinler hem birbiri hem de H ile aynı yönde olmaya çalışırlar, böylece model ferromanyetik olur. Eğer $J<0$ ise, komşu spinler hem birbirine hem de H'ye zıt yönde olmaya çalışırlar, böylece model antiferromanyetik olur. $J=0$ için, bir paramanyetiğin Hamiltonyeni elde edilir; spinleri düzenleyici tek etki dış manyetik alan H'dir. Spinler karşılıklı etkileşmediğinden dolayı da faz geçişi gözlenmez. Ising modelinin tanımı çok basit olmasına rağmen, geniş uygulama alanı vardır. Faz geçişi gösteren sistemler için geliştirilen modellerin tam çözümleri hem uzun ve zor, hem de çok az durumda başarılı olmuşlardır. Örneğin Ising modeli dış manyetik alan yokken sadece iki boyutlu uzayda tam olarak çözülebilmştir. Böyle bir durumda bu sistemleri ele almakta bilgisayarın kullanılıp kullanılmayacağına bakmak doğaldır. Esasen faz geçişleri ve kritik olayların anlaşılmasındaki ilerlemelerin büyük bölümü tamamen ya da kısmen bilgisayar simülasyonu sonuçlarına dayanmaktadır. Bilgisayar simülasyon çalışmaları deneysel çalışmalarla teorik çalışmalar arasında bir köprü görevi görür.

3.1.1 Metropolis algoritması

Kalay (2001)'a göre istatistik sistemlerin simülasyonu Metropolis ve arkadaşlarının geliştirdikleri algoritmaya dayanmaktadır. Bu algoritma markovian bir yöntem ile konfigürasyonlar üretir. Markov yöntemi (sistemin var olan konfigürasyonundan yeni bir konfigürasyon üretme) için çok önemli ve çok sık kullanılan algoritma ilk olarak Metropolis ve arkadaşları tarafından türetilmiştir (1953). Konfigürasyonun α durumundan α' durumuna değişimi sonucunda sistemin enerjisindeki değişiklik hesaplanır. Enerji değişimi negatif ise yeni konfigürasyon otomatik olarak kabul edilir, fakat değişim pozitifse yeni konfigürasyon $e^{-\beta(E_{\alpha'} - E_{\alpha})}$ olasılığı ile kabul edilir. Fan (2004) detaylı denge kullanıldığını ve spinlerin tek tek çevrildiğini söyler. Karaoğlu

(2004)'nin örneği konuyu daha anlaşılır yapacaktır. Ising modelinin simülasyonunda ilk olarak tek spinin ters çevrilmesi için uğraşılır. Bu spin rastgele olarak seçilir ya da örnek spinlerden her biri ters çevrilebilir. Daha sonra yeni ve eski konfigürasyonların enerjileri karşılaştırılır. Bir spinin ters çevrilmesi üzerine enerji değişimi sadece spinin en yakın komşularının değerini içerir. Bilgisayar yoluyla rastgele sayı üretici verilen olasılığa uygun olarak kabul ya da red edilerek kullanılır. Bunu daha ayrıntılı incelersek (iki boyutlu) Monte Carlo simülasyonu algoritması şu adımlardan oluşur:

1. Bir kenarında L sayıda spin olan ve toplam L^2 spinden oluşan bir kare örgü alınır. Önce T sıcaklığında rastgele bir başlangıç konfigürasyonu oluşturulur. Yazı-tura atılarak tüm spinlere(± 1) değerlerinden biri verilir. Bu durumun E enerjisi ve M manyetizasyonu not edilir.

2. Monte Carlo döngüsü: Örgüdeki spinlerden biri rastgele seçilip alt-üst edilir. Bu spinin x- ve y- yönündeki indisleri (i,j) olsun. Bu yeni durumda, o spinin komşularıyla olan ΔE enerji artışı hesaplanır. (Bkz. Şekil 3.1) İki durum olabilir:

a. $\Delta E \leq 0$ ise, yeni konfigürasyon doğrudan kabul edilir, enerjisi ve manyetizasyonu hesaplanır.

b. $\Delta E > 0$ ise, Boltzmann formülüyle bu duruma geçiş olasılığı p hesaplanır.

$$p = e^{-\Delta E/k_B T} \quad (3.1.2)$$

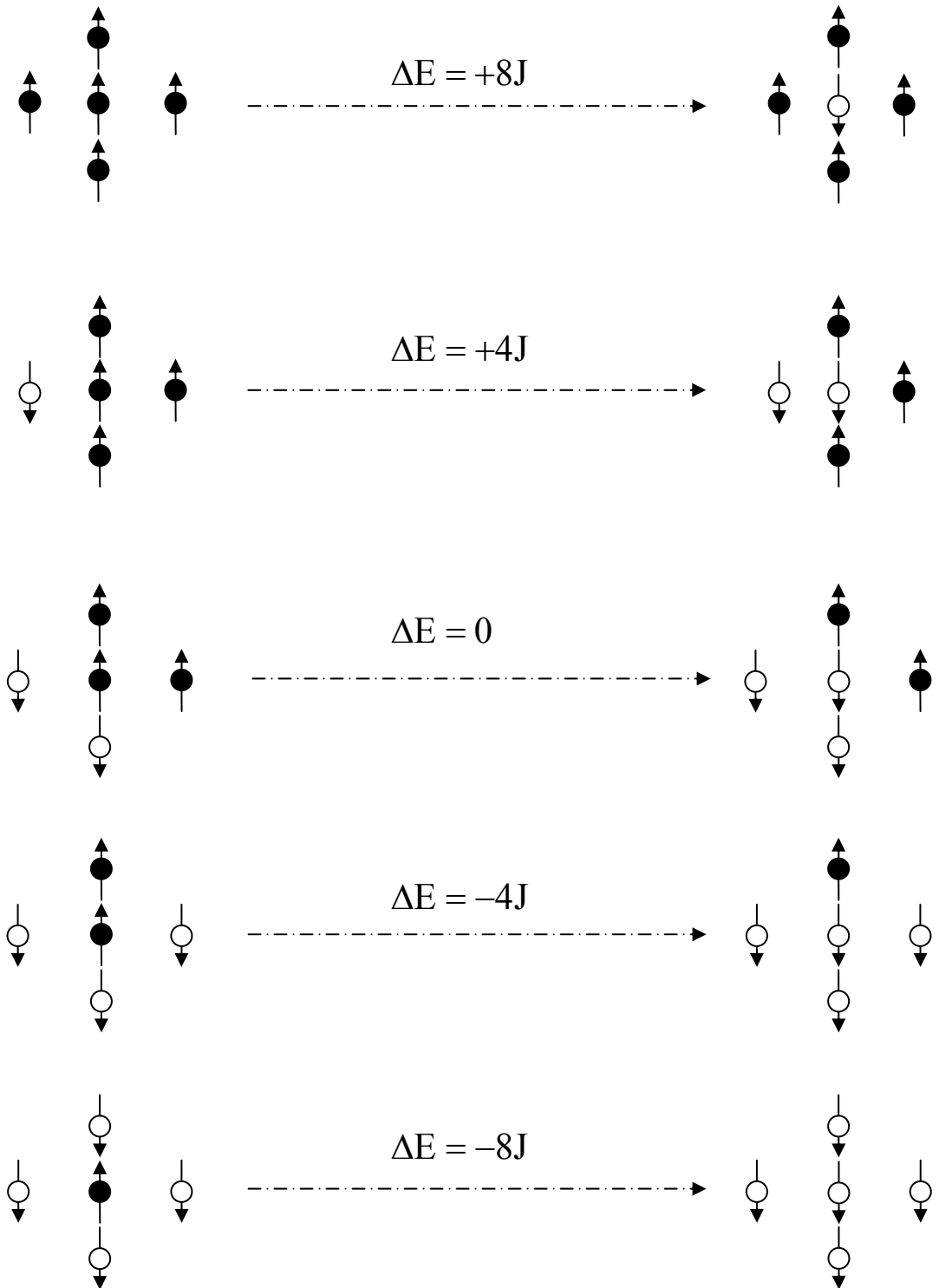
Bu durumu kabul edip etmemek üzere zar atılıp $[0,1]$ aralığında rastgele bir q sayısı üretilir. Yine iki durum olabilir.

- $q \leq p$ ise, pozitif enerjili bu yeni konfigürasyon kabul edilir, enerji ve manyetizasyon hesaplanır.
- $q > p$ ise, bu yeni konfigürasyon reddedilir, eskisiyle devam edilir.

3. Monte Carlo döngüsü binlerce kez tekrarlanır. Her dönüşte hesaplanan M manyetizasyon değerleri kümülatif (birikimli) olarak toplanır.

4. Döngü bittiğinde, kümülatif değerler döngü sayısına ve toplam N spin sayısına bölünerek, spin başına M manyetizasyonu bulunur.

5. yeni bir T sıcaklığında 1-4 adımları tekrarlanır.



Şekil 3.1 (Karaoğlu,2004) Bir spinin 4 komşusuyla etkileşmesi. Merkezdeki spin alt-üst olduğunda, enerjiye farklı katkılarda bulunan 5 durum oluşabilir.

3.1.2 Spin kümesi (cluster) algoritmaları

3.1.2.1 Swendsen-Wang algoritması

Fan (2004)'a göre hem Swendsen-Wang hem de Wolff algoritması komşu spin çiftleri arasında bağların kurulduğu küme algoritmalarıdır. Uygun küme konfigürasyonları oluşturup küme ya da kümelerin bir kerede ters çevrilmesiyle dinamik kritik üs azaltılır. Swendsen-Wang algoritması:

- 1- Başlangıç spinleri rastgele yönlendirilir. Komşu spinler arasında bağlar oluşturulur ve bu bağlar tek tek incelenir.
- 2- Komşu iki spin zıt yönlü ise silinir, aynı yönlü ise $1-e^{-2\beta J}$ olasılıkla bu bağ dondurulur veya $e^{-2\beta J}$ olasılıkla silinir. Böylelikle büyük spin kümeleri küçük kümelere bölünür. Tek bir spinin hiçbir komşusuyla bağı yoksa o da tek başına bir küme sayılır.
- 3- Bu kümeler $p=1/2$ olasılıkla ters çevrilir.
- 4- Başlangıçtaki spin örgüsü yeniden oluşturulur.

Bu adımlar tek bir MC adımındadır. İstenilen adım kadar gidilip program durdurulur.

Benzer iki spin arasındaki bağı silinmesinin mümkün olması ve herhangi bir durum tek basamakta başka birinden elde edildiğinden, bu işlemin girilebilirlik kriterini desteklediği anlaşılmaktadır. Bağlı numunelerin belirli çifti için tek bir Swendsen-Wang adımında bir durumdan diğer bir duruma dönüşen α ve α' konfigürasyon çifti göz önüne alınması halinde silinen adımdan sonra benzer bağ hücreleri boyunca α' konfigürasyonundan α konfigürasyonuna bir yol vardır. Belirli yollar boyunca ileri ve geri geçiş olasılıkları $\exp[-\beta(E_{\alpha'} - E_{\alpha})]$ 'dir. Bu durum küçük tersinirlik (microreversibility) için gereklidir. Tüm mümkün ileri ve geri yollar bu geçiş olasılığının içine girer.

3.1.2.2 Wolff algoritması

Fan (2004)'a göre bu algoritma Swendsen-Wang algoritmasına çok benzerdir. Tek farkı bu algoritmadaki küme $p = 1$ olasılıkla çevrilir. Algoritma şöyledir:

- 1- Başlangıç konfigürasyonu oluşturulur.

- 2- Rastgele bir spin çekirdek spin olarak seçilir ve bu spine paralel olan komşularından bir çevre listesi oluşturulur.
- 3- Çevre listesinden bir spini sil ve bu spini $1-e^{-2\beta_j}$ olasılıkla kümeye bağla. Bir zaman adımında çevre spin ile komşularından biri arasında bağ kurma denemesi yapılmışsa o komşuya bu zaman adımında bir daha uğranmaz.
- 4- Eğer çevre spin kümeye eklenmemişse paralel komşularını belirle, kümede ve çevre listesinde olmayanlar varsa çevre listesine ekle.
- 5- 3-4 basamaklarını yeni bir spin eklenmeyinceye kadar tekrar et ve kümeyi ters çevir.

Bu adımlar istenilen miktarda tekrarlanır.

Bu işlem erişilebilirlik kriterine uygundur çünkü kümenin tek bir spin içermesinin sıfırdan farklı bir olasılığı vardır ki; tek spinlerin ters çevrilmesiyle diğer bir konfigürasyona ulaşılabilir. Swendsen-Wang algoritması ile Wolff algoritması arasında yakın benzerlik vardır. Spin kümesine yeni bir spin bağlanma ihtimali Swendsen-Wang algoritmasındaki bir bağın muhafaza edilmesiyle aynıdır. İki yöntemde de spin kümesinin büyümesi aynı ortalama üzerinde olacaktır. Ancak Swendsen-Wang algoritmasında bütün spin kümeleri her basamakta bir spin yön değiştirmesine maruz kalır. Wolff yönteminde ise sadece başlama spinini içeren küme maruz kalır. Bu daha büyük kümelerin Wolff işleminde daha sık böyle yön değiştirmelere maruz kaldığını gösterir. Bu büyük kümelerde harcanan büyük gayret algoritmayı daha etkin yapar.

3.1.3 Creutz'un gezgin demon algoritması

Kalay(2001)'dan öğrendiğimize göre moleküler dinamik olarak bilinen yöntem Monte Carlo yönteminin bir alternatifidir. Yöntem, klasik bir dinamik sistem için Hamilton hareket denklemlerinin sayısal integrasyonunu içerir. Başlangıç şartı olarak p genelleştirilmiş momentum ve q genelleştirilmiş koordinatlar belirlidir. Toplam enerji sabittir. Moleküler dinamik hesaplamalarda rastgele sayı üretici kullanılmamaktadır. Sistemin istatistik yapısı büyük bir faz uzayının karmaşıklığından meydana gelmektedir. Molekül dinamiği metodunun anlaşılması için fiziksel sistemlerin mikroskopik tanımlarının çok iyi yapılması gerekmektedir. Bu sistemler birkaç parçacıktan veya çok parçacıktan oluşabilir. Molekül dinamiği özellikle katı ve sıvıların molekül yapıları, enerjileri ve hareketleri ile bulk (parçacık sayısının sonsuz olduğu durum) özelliklerinin ayrıntılı bir şekilde araştırılmasına imkan sağlamaktadır. Sistemin deterministik (belli

kurallara bağı) gelişimi uygun bir Hamiltonyen yardımı ile gerçekleştirilmektedir. Bu tür algoritmalarda sıcaklık bir giriş parametresi olarak kullanılmamakta ve sıcaklık değeri farklı serbestlik dereceleri arasında enerjinin eş bölüşümü kullanılarak hesaplanmaktadır.

Metropolis ve arkadaşlarının algoritması ile molekül dinamiği arasına giren diğer bir simülasyon yöntemi Creutz (1983) tarafından geliştirilmiştir. Öncelikle "demon" (spine eşlenik momentum) denilen bir serbestlik derecesi tanımlanmaktadır. Bu yeni değişken molekül dinamiğindeki eşlenik momentumun benzeridir. Molekül dinamiğindeki eşlenik momentumun kinetik enerjinin hesaplanmasında kullanılmasına benzer şekilde demon da kinetik enerji taşır. Sistemin toplam enerjisi korunacak şekilde gezgin demon rastgele olarak spinleri ziyaret eder. Demon bir hücreye ulaştığı zaman uygun bir spini ters çevirmek için girişimde bulunur. Eğer spinin enerjisi düşükse demon spine enerji aktarır ve spinin ters çevrilmesine yetecek kadar enerji aktarılmışsa spin ters çevrilir. Aksi takdirde başka uygun bir hücredeki spini ters çevirmek için hareket eder. Demon enerjisini üstel olarak aktarır. Büyük sistemlerde demonun enerjisi toplam enerjinin sadece küçük bir kısmını gösterir. Demon'un rastgele olarak spinleri ziyaret etmesinden dolayı bu algoritmaya Creutz'un gezgin demon algoritması denilir. Bu algoritmada tek bir gezgin demon kullanılacağı gibi birden fazla gezgin demon da kullanılabilir.

3.1.4 "Cellular automaton"lar

Merdan (2002) bu konuda oldukça kapsamlı bilgi verir. "Cellular automaton" ilk olarak Neuman ve Ulam tarafından "Cellular space" adı ile biyolojik sistemlerin simülasyonu için önerilmiştir. CA'lar için ilk temel teori Wolfram (1983) tarafından verilmiştir. Bir CA'da örgü hücrelerine ait olan bir veya daha çok değişken verilen bir kurala uyarak eş zamanlı olarak değişir. Bölgesel iç etkileşmeye sahip çok sayıda farklı elemanlar içeren fiziksel sistemler CA olarak modellenmiştir. Trafik, kum ve benzeri tanecikli sistemlerin akışı, difüzyon, "dendritic" kristallerin büyümesi, "turbulent" sıvıların uzaysal yapısının modellenmesi örnek olarak verilebilir. CA'larda uzay ve zaman kesikli değerlere sahiptir ve sonsuza kadar genişletilebilen düzenli bir hücreler örgüsünden oluşur. Örgünün her bir hücresinde kesikli değerler alabilen değişkenler yer almaktadır. Bir CA'un davranışında bu hücre değişkenlerinin değerleri de belirleyicidir. CA kesikli zaman adımlarında gelişir ve gelişim esnasında bir hücre değişkeni bölgesel

bir kurala uyarak bir önceki zaman adımında kendisi ve kendisine komşu hücrelerdeki değişkenlerin değerlerine bağlı olarak yeni değerini alır. Bir hücrenin komşuları ifadesi ile genellikle hücrenin kendisi ve ona en yakın komşu hücreler kastedilmektedir. Herhangi bir zaman adımında tüm hücre değişkenlerinin değerleri özdeş bir kural yardımıyla eş zamanlı olarak elde edilmektedir. Genel olarak d-boyutlu bir CA'un gelişimi için periyodik sınır şartı kullanılmaktadır. Periyodik sınır şartında örgüler oluşturulurken periyodikliği sağlamak için N+1'inci örgü noktasının 1'inci örgü noktasına denk olduğu $(N+1) \equiv (1)$ kabul eldir. Bunun dışında serbest sınır şartı da kullanılmaktadır. Bu sınır şartında N+1'inci örgü noktasının sıfır olduğu $(N+1) = (0)$ kabul edilir.

Çeşitli fiziksel problemlerin bir CA olarak modellenmesi ve simülasyonu Vihniac tarafından önerilmiş, bir ve iki boyutlu örgüler için bir çok CA kuralı verilmiştir. Örneğin kural 0, 90, 150, 204 vs. Bu kurallar etkileşmeye giren hücrelerin sayısına pozisyonuna bağlı olarak isimlendirilmektedir. Bir boyutlu CA'da üç komşu vardır. Bunlar göz önüne alınan hücrenin bir önceki zaman adımında kendisi ile sağındaki ve solundaki hücrelerdir.

İki boyutlu basit kare örgülü CA'larda iki farklı komşuluk cinsi vardır. Bunlardan ilki beş komşuluklu, ikincisi de dokuz komşuluklu CA olarak adlandırılmaktadır. Beş komşuluklu CA'larda komşu hücre olarak söz konusu hücrenin kendisi ile onun kuzey, güney, doğu ve batısındaki hücreler anlatılmaktadır. Dokuz komşuluklu CA'larda ise komşu hücreler olarak en yakın beş komşu hücrenin yanı sıra köşegenlerdeki komşu hücreler göz önüne alınmaktadır. İki boyutlu CA kuralında herhangi bir merkezi (i,j) hücresine ait a_{ij} değişkeninin bir sonraki zaman adımında alacağı değer, bu değişkenin ona komşu hücrelerdeki değerlerinin fonksiyonu olarak ifade edilmektedir. Örneğin beş komşuluklu CA'larda kurallar, aşağıdaki gibi en yakın komşu hücrelerin bir fonksiyonu olarak yazılmaktadır.

$$a_{ij}^{t+1} = f(a_{ij}^t, a_{ij-1}^t, a_{ij+1}^t, a_{i-1,j}^t, a_{i+1,j}^t) \quad (3.1.3)$$

Bu ifadedeki f kuralı açıklayan bir fonksiyondur. Herhangi bir fiziksel sistem için CA ile bir model oluştururken:

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

3.2 Ising Modeli Simülasyonu İçin "Cellular Automaton"lar

3.2.1 Q2R "cellular automaton"

Q2R algoritmasında spin-spin etkileşme enerjisi (Ising enerji veya iç enerji) sistemin toplam enerjisine karşılık gelmektedir. Kalay (2001) bu algoritmayı şöyle anlatır. Q2R automaton'ında bir örgünün her bir hücresi +1 veya -1 değerinde bir spin ile işgal edilir. Rastgele bir konfigürasyonla hesaba başlanılır. Her zaman basamağında eğer değişecek spin aynı sayıda paralel ve paralel olmayan komşu spine sahipse veya göz önüne alınan konfigürasyonda değişecek spin sistemin toplam enerjisini değiştirmeyecek şekilde olursa spinin yönü değişir ve sistemin toplam enerjisinde bir değişme olmaz. Bu yüzden simülasyonun bu tipi sabit enerjili mikrokronik kümeye uyar. Sabit sıcaklıklı kanonik kümeye uymaz. Q2R automaton'ında bir kerede bütün spinler yenilenmez. Kare örgü iki alt örgüye ayrılır. Önce bir yarısı daha sonra da diğer yarısı yenilenir. Merdan (2002) bunun sebebinin "Feedback Catastrophe" denilen durumu önlemek için olduğunu söyler. Feedback Catastrophe olayında belli bir adımdan sonra hep aynı konfigürasyonlar türetilmekte ve bunun sonucu olarakta istenilen adım sayısı kadar gidilememektedir. Q2R automaton'ında dış manyetik alan dikkate alınmaz. Kendiliğinden manyetizasyon Curie sıcaklığının altındaki sıcaklıklarda görülür. Q2R kuralında bir bölgenin enerjisi sistemin toplam enerjisini gösterir. Q2R algoritması ile toplam enerjinin korunduğu mikrokronik bir küme oluşmakta yani simülasyon süresince herhangi bir spin değişiminde iç enerjinin korunduğu konfigürasyonlar üretilmektedir. İç enerji bütün simülasyon süresince sabit kaldığından öz ısı enerji dalgalanmaları kullanılarak hesaplanamamaktadır.

3.2.2 Creutz "cellular automaton"

Aktekin (1999) ve Merdan (2005)'a göre bu algoritma $2 \leq d \leq 8$ boyutlu uzaylardaki Ising modellerinin simülasyonlarında başarılı olmuştur. Bu modelde her bir hücreye n ikili "bit" karşılık getirilmekte ve bir hücredeki bir değişkenin alacağı değer o değişkenin bir önceki zaman adımındaki kendi değeri ile ona en yakın komşularındaki değerlerinden elde edilmektedir. Bu n ikili bit'ten ilki, B_i Ising spini içindir; "0" veya "1" değerlerini alabilir. $S_i = 2B_i - 1$ olmak üzere, örgünün iç enerjisi veya potansiyel enerjisi anlamına gelen Ising spin enerjisi H_I aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır.

$$H_I = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad (3.2.1)$$

Burada $\langle ij \rangle$ bütün en yakın komşu hücre çiftleri üzerinden toplamı göstermektedir. Kalan bitlerden $n-2$ 'si demon veya spine eşlik eden momentuma karşı gelmektedir. D_1, D_2, \dots, D_{n-2} ile gösterilen bu bit'ler "0" veya "1" değerini alabilmekte ve $(2^0 \times D_1 + 2^1 \times D_2 + \dots + 2^{n-3} \times D_{n-2})$ ifadesine göre $(0, 2^{n-2} - 1)$ aralığındaki tamsayıları oluşturmaktadır. Momentum değişkenine karşılık gelen kinetik enerji E_D bu tamsayı değerlerinin 4 katını almaktadır.

$$E_D = 4(2^0 \times D_1 + 2^1 \times D_2 + \dots + 2^{n-3} \times D_{n-2}) \quad (3.2.2)$$

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

$$\langle E_D \rangle = \frac{\sum_{m=0}^{2^{n-2}-1} 4m e^{-4m\beta}}{\sum_{m=0}^{2^{n-2}-1} e^{-4m\beta}} \quad (3.2.3)$$

$T = \frac{1}{\beta}$ dir. n. bit CA'ın zamanla dama tahtası düzeninde gelişimini sağlamak ve böylece Ising modelinin CA ile simülasyonunu mümkün kılmaktadır. Her bir zaman adımında dama tahtasının siyah hücrelerine kural uygulanıp rengi beyaza çevrilir; beyaz hücrelerin ise sadece rengi siyaha çevrilir. Rengi beyaza çevrilen siyah hücrelerin spini ters çevrilerek Ising enerjisindeki enerji değişimi hesaplanır. Eğer enerji değişimi bu hücrenin momentum değişkenine aktarılabilir veya momentum değişkeninden alınabilecek bir değer ise, toplam enerji korunmak üzere spin ters çevrilir. Buna uygun olarak momentum değiştirilir, aksi halde spin ve momentum değiştirilmez. Bu işlem örgüdeki bütün siyah hücrelere aynı zaman adımında uygulanmakta ve gelişim süresince periyodik sınır şartı kullanılmaktadır. Başlangıçta sistemin bütün spinleri aşağı veya yukarı yönde alınabilir. İlk kinetik enerji beyaz hücrelerdeki demonun bit'leri vasıtasıyla örgüye rastgele verilir. Toplam enerjide sınırlama devam ettiği müddetçe rastgele hareket, konfigürasyon uzayı boyunca devam eder.

3.3 Demon Enerjisinin Hesaplanması

Kalay (2001) demon enerjisinin hesabı yapılırken bit sayısının göz önünde bulundurulduğunu söyler. Çünkü demon enerjisinin alacağı enerji değerleri bit sayısına bağlı olarak değişmektedir. İki bitten oluşan demon (0'dan 3'e kadar) dört enerji seviyesine, üç bitten oluşan demon (0'dan 7'ye kadar) sekiz enerji seviyesine, dört bitten oluşan demon (0'dan 15'e kadar) onaltı enerji seviyesine, beş bitten oluşan demon (0'dan 31'e kadar) otuz iki enerji seviyesine sahiptir. Demon enerjisi demon'un bit sayısına göre hesaplanır. Demon'un bit sayısı 2 ise enerjisi $E_D = 4x(2^0xD_1 + 2^1xD_2)$, 3 ise enerjisi $E_D = 4x(2^0xD_1 + 2^1xD_2 + 2^2xD_3)$. Bilgisayarda ikili sayı sistemi kullanıldığı için D_1, D_2, D_3 1 ve 0 değerlerini alabilir. 3 bitli demon'un olabileceği enerji düzeyleri aşağıdaki tabloda verilmiştir. Demonların bit sayısına göre enerji seviyelerini yukarıda belirtmiştik, demonlar bu seviyelerdeki tamsayı değerlerini alabilmektedir. Demon enerjisi de bu tam sayı değerlerin 4 katı büyüklüğündedir. ΔH_I Ising enerji değişiminin iki boyutlu uzayda 8, 4, 0, -4, -8 değerlerini, üç boyutlu uzayda 12, 8, 4, 0, -4, -8, -12 değerlerini, dört boyutlu uzayda 16, 12, 8, 4, 0, -4, -8, -12, -16 değerlerini aldığı görülmektedir.

Tablo 1.1 Üç bitli demon'un enerji düzeyleri

D ₃	D ₂	D ₁	E _D
0	0	0	0
0	0	1	1
0	1	0	2
0	1	1	3
1	0	0	4
1	0	1	5
1	1	0	6
1	1	1	7

Benzer şekilde düşünülerek beş boyutlu uzayda ΔH_1 'ın 20, 16, 12, 8, 4, 0, -4, -8, -12, -16, -20 değerlerini alacağı bu miktar enerjinin ise iki bitli demonlarla sağlanamayacağı anlaşılmaktadır. Çünkü iki bitli demonlarla sağlanan enerjinin en büyük miktarı $E_D = 4(2^0 \times D_1 + 2^1 \times D_2) = 4(1 + 2) = 4(3) = 12$ dir. Sonuç olarak diyebiliriz ki dört boyut ve üzerindeki çalışmalarda demon sayısı ihtiyacı karşılayacak şekilde artırılmalıdır. Örnek olarak beş boyut için üç bitli demonlar kullanılırsa $E_D = 4(2^0 \times D_1 + 2^1 \times D_2 + 2^2 \times D_3) = 4(1 + 2 + 4) = 4(7) = 28$ simülasyon kolaylıkla yapılabilecektir.

3.4 Creutz "Cellular Automaton"ında Termodinamik Niceliklerin Hesabı

Merdan (2002)'a göre standart istatistiksel mekanik tartışmalar ve simülasyon sonuçları demon enerjisinin $P(E_D) \propto \exp(-\beta E_D)$ dağılımına sahip olduğu yani Boltzmann dağılımına uyduğunu göstermektedir. Bu özellikten yararlanarak β 'nın değeri, dolayısıyla sistemin sıcaklığı

$$T = \frac{1}{\beta} \quad (3.2.4)$$

demon enerjisinin beklenen değerinden elde edilebilir. Örgü sayısı büyük olan sistemlerde demon'un enerjisi toplam enerjinin sadece küçük bir kısmını gösterir. CA modelinde toplam enerji korunduğundan dolayı mikrokantoniktir. Simülasyon süresince kinetik enerji ve Ising enerji (iç enerji) dalgalanmaktadır. Bir spin ters çevrildiğinde Ising enerjisindeki değişme demon'un alacağı veya vereceği enerji miktarı kadardır.

Boltzmann dağılımına uygun olarak 5 bit için demon enerjisinin beklenen değeri aşağıda verilmektedir

$$\langle E_D \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{31} 4n e^{-4n\beta}}{\sum_{n=0}^{31} e^{-4n\beta}} \quad (3.2.5)$$

Burada her bir zaman adımı için örgünün bütün gözlerindeki kinetik enerji (H_K)'ler için toplanıp toplam spin sayısına bölüdüğü zaman o zaman adımı için $\langle E_D \rangle$ beklenen değeri bulunur. Her bir zaman adımı için elde edilen $\langle E_D \rangle$ toplanıp toplam adım sayısına bölünmesiyle $\langle E_D \rangle$ beklenen değeri bulunur. Bulunan $\langle E_D \rangle$ değeri yukarıdaki denklemde yerine yazılır. Buradan β değeri bulunur. Elde edilen bu sıcaklık değerine karşılık gelen kendiliğinden manyetizasyon M , iç enerji (Ising enerji) H_I , manyetik alınganlık χ ve öz ısı C , oluşturulan konfigürasyonlardan aşağıda verilen formüller yardımıyla hesaplanır.

$$M = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i \quad (3.2.6)$$

$$H_I = \frac{1}{2N} \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad (3.2.7)$$

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} = L^d \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{kT} \quad (3.2.8)$$

$$\frac{C}{k} = \frac{\partial H_I}{\partial T} = L^d \frac{\langle H_I^2 \rangle - \langle H_I \rangle^2}{(kT)^2} \quad (3.2.9)$$

Eşitliklerde $N=L^d$ örgüdeki hücre sayısıdır. $\langle \rangle$ zaman ve örgü üzerinden ortalamaya karşılık gelmektedir. M ve H_I hücre başına ve adım başına ortalama değere, H da düzenli bir dış manyetik alana karşılık gelmektedir. Ising Hamiltonyeninde düzenli bir dış alanın varlığında, spin-alan etkileşmesinin oluşturduğu bir ek enerji mevcuttur.

Binder (1985) tarafından $g_L = \frac{\langle s^4 \rangle_L}{\langle s^2 \rangle_L^2} - 3$ ifadesi ile verilen (burada s spin başına

manyetizasyonu ifade etmektedir) Binder parametresinin sıcaklıkla değişim grafiği çizilebilir. Bu grafikteki eğrilerin kesişim noktasının, $L \rightarrow \infty$ iken T_c sıcaklığına karşılık geldiğini söyler.

4. MATERYAL VE METOT

Simülasyon için kullanılan Fortran kod programı 5 basamaktan oluşmaktadır:

Birinci Basamak: Bu basamakta RNG (random number generator) rastgele sayı üretici olarak bilinen bir program kullanılmaktadır. Döngü ayarlanılarak istenilen miktarda 0 ile 1 arasında sayı üretilmekte ve bu sayılar bir sonraki aşamada kullanılmak üzere bir dosyaya yazdırılmaktadır. Çok sayıda RNG programları olmasına rağmen simülasyonun sağlıklı ve kaliteli sonuçlar vermesi bakımından Gaussyen dağılıma uygun sayılar üreten rastgele sayı üreticileri tercih edilmelidir. Beş boyutta simülasyon yapılacağı için $L^5/2$ adet sayı üretilip bir sonraki aşamaya geçilir.

İkinci Basamak: Bu basamakta simülasyonun yapılacağı örgü boyu L ve sınır olarak adlandırılabilen bir sayı girilmektedir. Program bir önceki aşamadan sayıları sırasıyla okumakta ve sınır olarak verilen sayı ile karşılaştırmakta bu sayıdan küçük olanları 1 büyük olanları ise 0 yaparak başka bir dosyaya yan yana ikişer tane olmak üzere kaydetmektedir. Artık rastgele sayılar değil 11 veya 00 şeklinde sayılardan oluşan bir dosya bir sonraki aşamada kullanılmak üzere hazırlanmıştır. Bu ikili sistemdeki 1 ve 0'ların anlamını şu şekilde açıklayabiliriz. Bilindiği gibi örneğin 4 demonlu bir sistemde demon enerjisi şu şekilde hesaplanmaktaydı. $E_D=4(D_1+2D_2+4D_3+8D_4)$ buradaki D_n değerleri 1 olduğunda demon enerjisine katkıda bulunmakta yani sisteme enerji verilmektedir.

Üçüncü Basamak: Bu basamağa geçerken 1 ve 0'ların olduğu dosyanın ilk satırına hesaplama yapmak istediğimiz adım sayısı gerekli formatta yazılmakta (örneğin 960x200) ve ikinci satırına da örgü boyu L yazılmaktadır. 3. basamaktaki program ilk olarak bütün spin değerlerini ve demon değerlerini sıfıra eşitlemektedir. Simülasyonun 4 demon ile yapılması demek her bir örgü konumundaki spine 4 tane demonun eşlik ettiğini anlatmaktadır. Sistemdeki toplam L^5 adet spinin yarısının demonlarından

ikisinin değeri bir önceki aşamada oluşturulan dosyadan okutulmakta yani sisteme kinetik enerji eklenmekte diğer yarısının demonlarına ise hiçbir şey yapılmamakta yani başlangıçtaki sıfır değerlerini aldığı kabul edilmektedir. Sisteme ilk kinetik enerji yüklendikten sonra bütün spinler aşağı veya yukarı çevrilerek başlangıç konfigürasyonu oluşturulmaktadır. Başlangıç konfigürasyonu için periyodik sınır şartları da kullanılarak Ising enerjisi, demon enerjisi, toplam enerji ve manyetizasyon gibi değerler hesaplanmaktadır. Daha sonra sistem toplam döngü sayısı kadar taranacaktır. Her bir taramada spinler dama tahtasında olduğu gibi birer atlanarak yani 1. sıranın 1, 3, 5, ... şeklindeki tek numaralı spinleri sonrada çift numaralı spinleri tek tek ele alınmakta demon enerjileri de dikkate alınarak çevrilmeye (yönü değiştirilmeye) çalışılmaktadır. Enerji korunuyorsa çevrilmekte değilse aynen bırakılarak sıradaki spine geçilmektedir. Tarama işlemi bitince yukarıdaki değerler Ising enerjisi vb. hesaplanmakta ve yeni bir tarama başlatılmaktadır. Örneğin 960x200 döngü sayısı olan bir taramada her 200. adımda hesaplanan değerler bir dosyaya kaydedilmektedir. Bu şekilde tüm taramalar bittiğinde bir sonraki aşamada kullanılacak olan dosya oluşturulmaktadır.

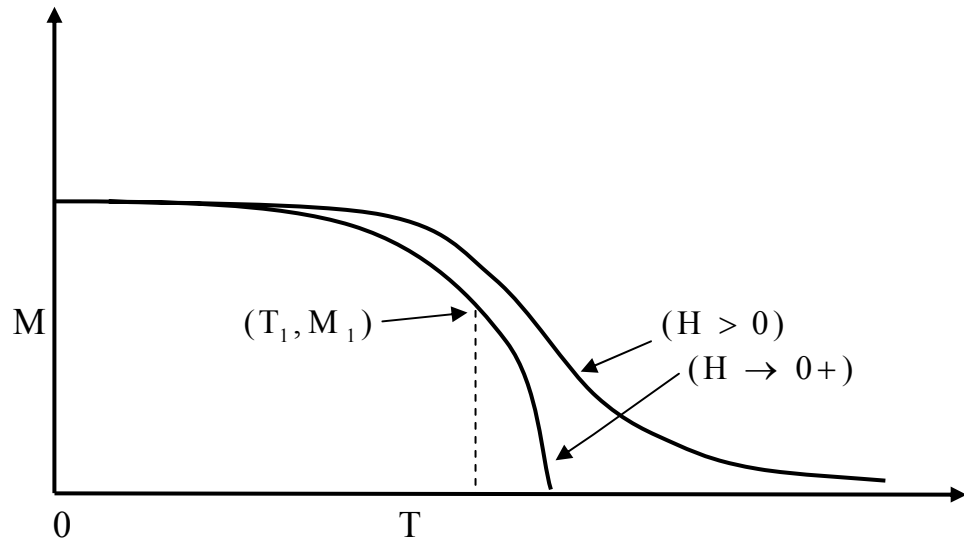
Dördüncü Basamak: Bu aşamada bir önceki aşamada oluşturulan dosyadan adım sayısı, spin başına kinetik enerji, spin başına toplam enerji, spin başına toplam enerjinin karesi ve onun dördüncü kuvveti ile spin başına manyetizasyon, manyetizasyonun karesi ve dördüncü kuvvetleri okutulmaktadır. Hesaplamaların güvenilirliği açısından ilk 10 adımdaki değerler dikkate alınmamaktadır. Sonra bu değerlerin adım sayısına göre ortalamaları hesaplanmaktadır. Binder parametresi de bu aşamada hesaplanmaktadır. Bu ortalamalar bir dosyaya kaydedilmektedir.

Beşinci Basamak: Bu basamakta 0.000005 şeklinde bir sapma değeri belirlenip Boltzmann dağılımına uygun olarak demon enerjisinin beklenen değeri formülü de kullanılarak yukarıda belirtilen sapma değerinden daha küçük bir hata payı ile sistemin sıcaklığı, öz ısısı, manyetik alınganlığı hesaplanmaktadır. Hesaplanan sıcaklık, öz ısı, manyetik alınganlık, düzen parametresi, sıcaklığın tersi, demon enerjisinin ortalaması ve beklenen değerleri bir dosyaya kaydedilerek programın çalışması sona ermektedir. Simülasyon $L=10$ ve $L=12$ örgü uzunlukları için 22'şer adet farklı enerji değerleri için ve her bir enerji değeri de 7'li takımdan oluşacak şekilde yapılmıştır. Simülasyon süresini en çok 3. basamak etkilemektedir.

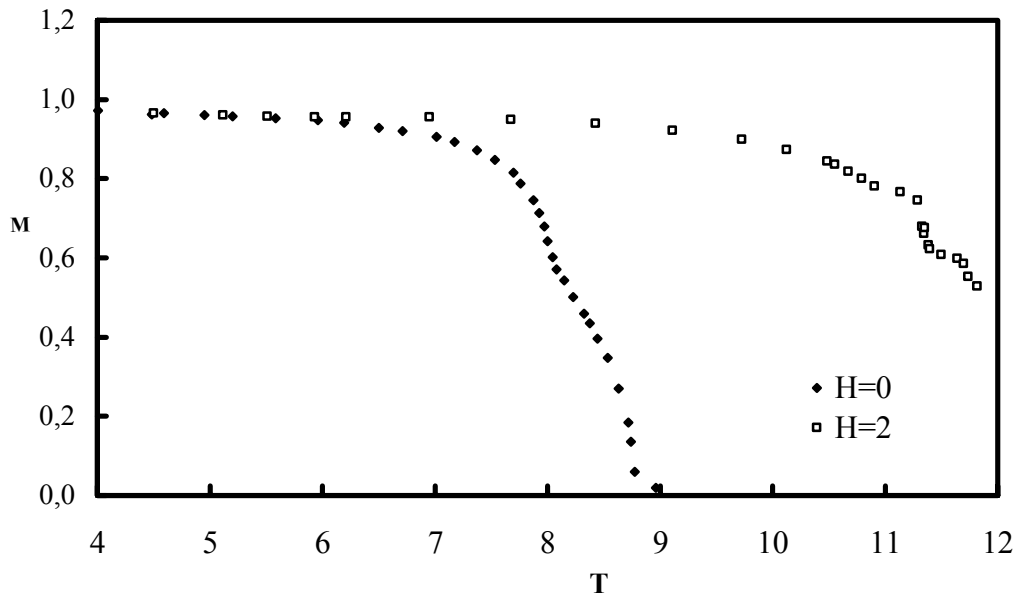
5. BULGULAR VE TARTIŞMA

Bu çalışmada daha önceki beş boyutta yapılan CA çalışmalardan farklı olarak, simülasyonlarda demon sayısı 3 yerine 4 alındı. Toplam enerji hesaplamalarında spin-dış manyetik alan etkileşmesinden gelen ek enerji terimi de dikkate alınarak programda değişiklik yapıldı. Ancak CA simülasyonu tam sayılar kullanılarak yapıldığından eklenen dış manyetik alan spin-spin etkileşmelerinin iki katı mertebesinde olabildi. Daha küçük mertebelerde olacak şekilde uygulanan alan azaltılarak fizikte doğrudan uygulama bulabilecek çok etkili simülasyonlar yapılabilir.

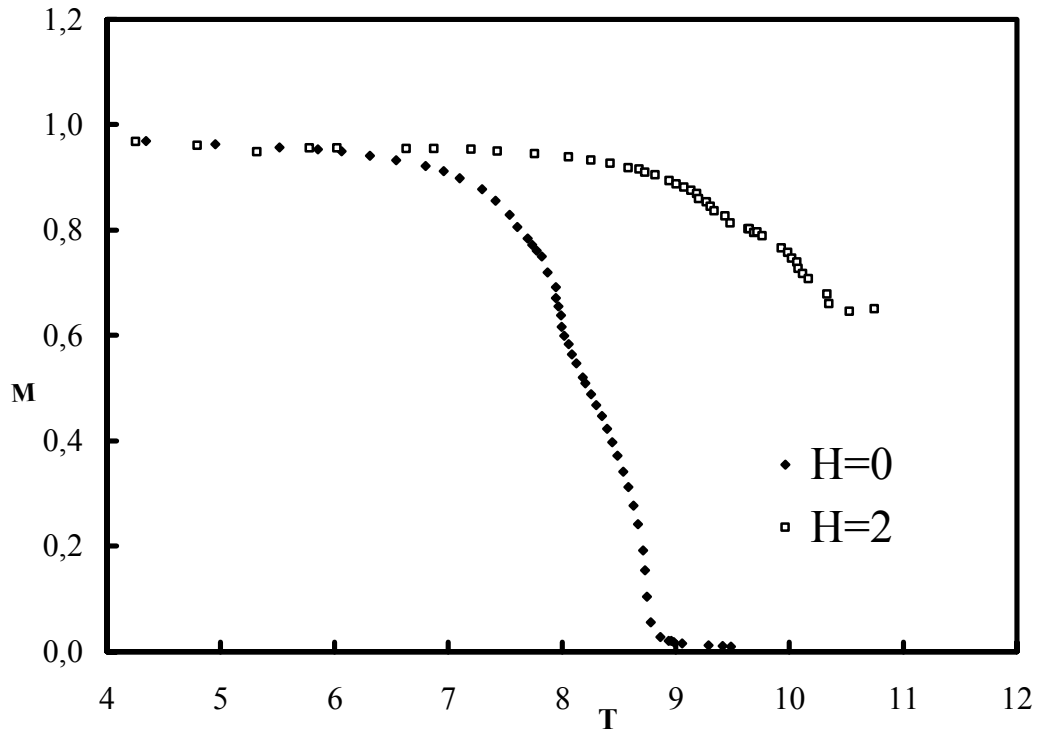
Bu çalışmada grafiklerdeki fiziksel niceliklerin birimleri etkileşme sabiti j 'nin birimine bağlıdır j hangi birim sisteminde ise nicelikler de o birim sistemindedir. Üç bitli ve dört bitli demonlar kullanılarak elde edilen sıcaklık değerleri ve bu sıcaklık değerlerine karşılık gelen manyetizasyon değerlerinin grafikleri de Şekil 4.2 ve Şekil 4.3'te verilmiştir. Şekil 4.1 ile Şekil 4.2 ve Şekil 4.3 karşılaştırıldığında görülen şudur: Dış manyetik alan yokluğunda kritik sıcaklıkta $T_c=8,7797(9)$ K ferromanyetizmadan paramanyetizmaya faz geçişi olduğu gözlenirken, $H=2J/\mu$ spin-spin etkileşmelerinin iki katı mertebesinde bir dış manyetik alan uygulandığında spinlerin tamamının önce alan yönünde yöneldikleri fakat sistemin sıcaklığının artması sonucunda termal hareketliliğin artmasıyla manyetizasyonun azalmaya başladığı ama yine de bu azalmanın faz geçişi gösterebilecek mertebelere kadar inemediği gözlenmiştir.



Şekil 4.1. (Pathria, 1996) Manyetik bir sistemin $H>0$ ve $H \rightarrow 0$ için $M(T,H)$ grafiği. Burada M_1 sistemin kritik sıcaklık altındaki bir sıcaklıkta $T_1 < T_c$ kendiliğinden mıknatıslanma gösterir.

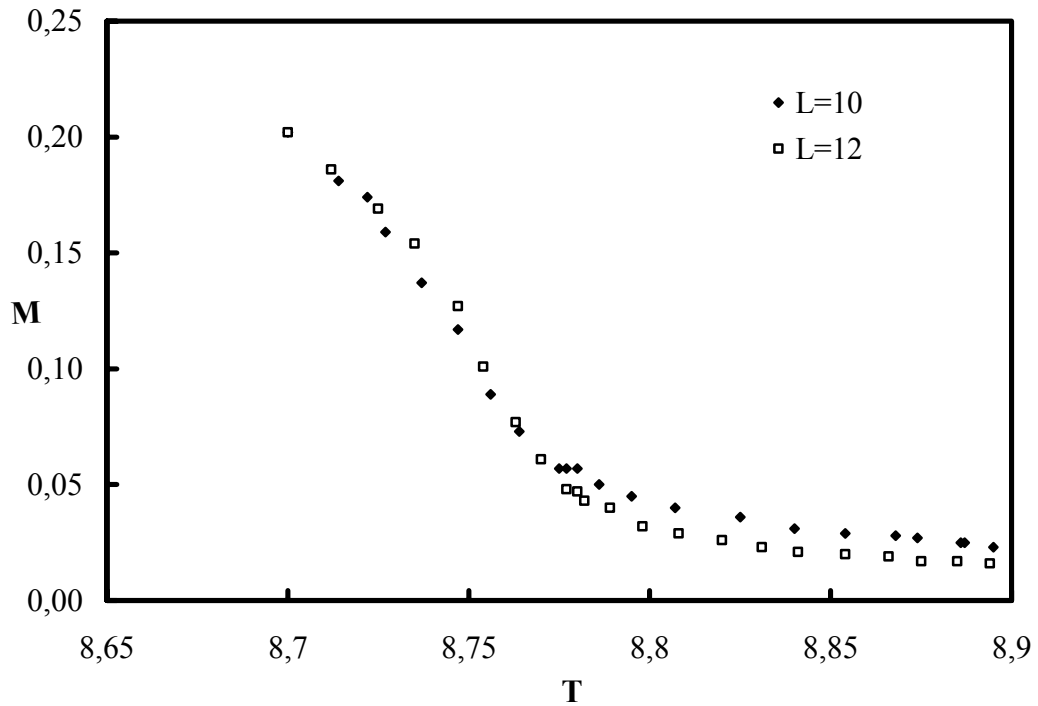


Şekil 4.2 3 demon kullanılarak dış manyetik alan yokluğunda $H=0$ ve dış manyetik alan varlığında simülasyondan elde edilen M-T grafiği

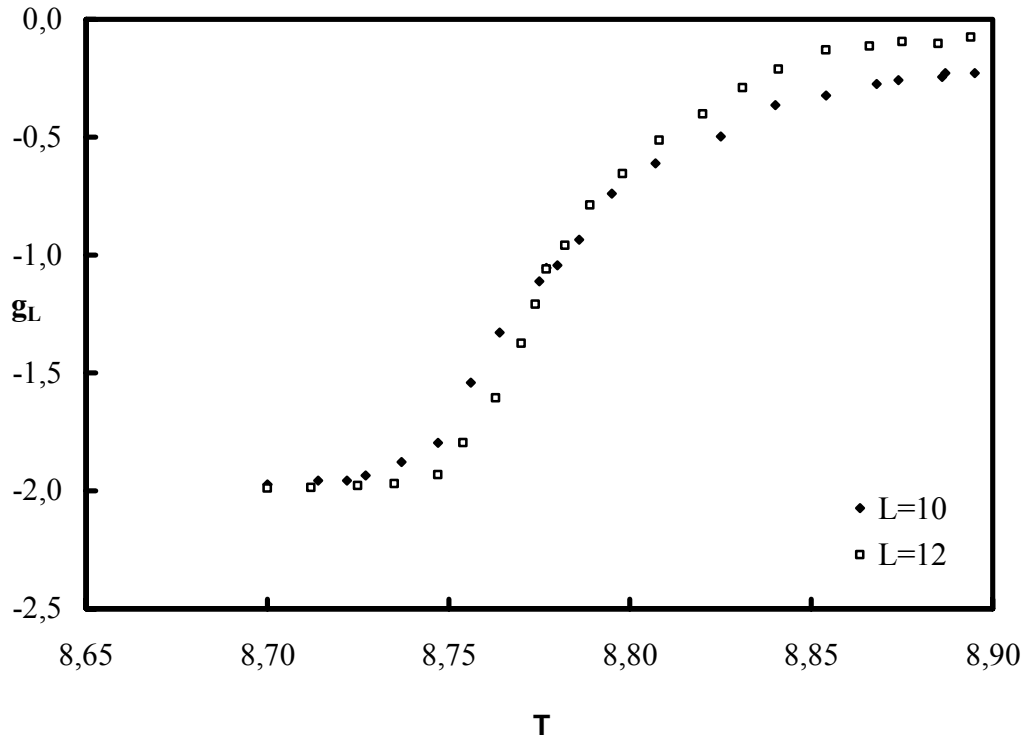


Şekil 4.3 4 demon kullanılarak dış manyetik alan yokluğunda $H=0$ ve dış manyetik alan varlığında simülasyondan elde edilen M-T grafiği

Ayrıca 4 demon kullanılarak yapılan simülasyondan elde edilen sonuçlardan düzen parametresinin sıcaklık ile değişimi Şekil 4.4'de verilmiştir.

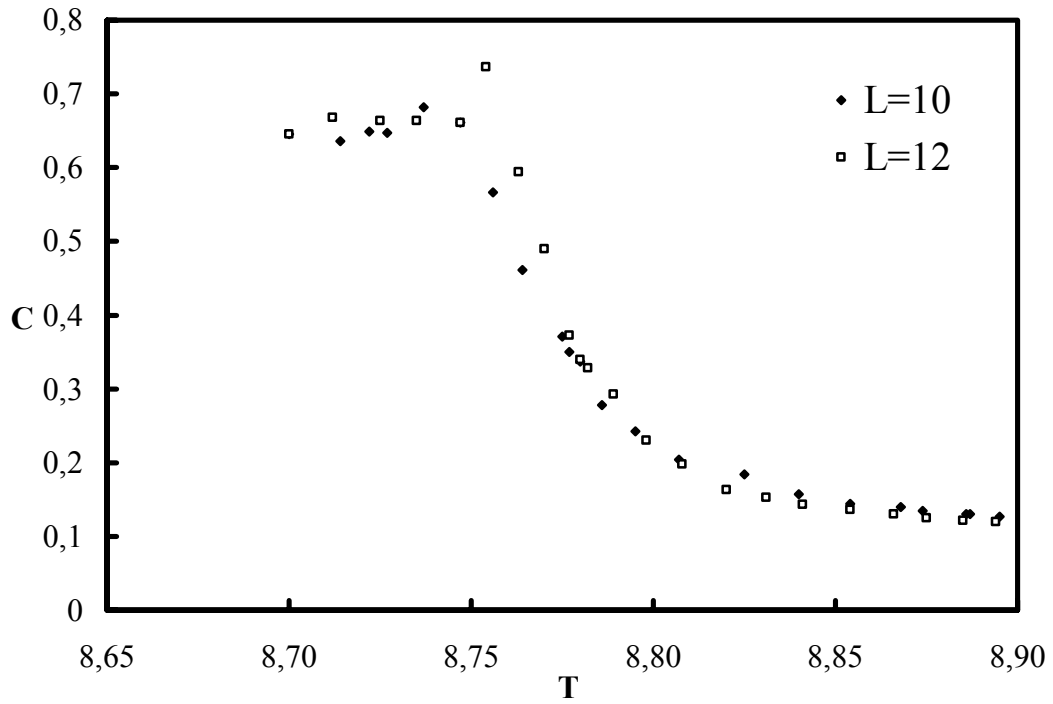


Şekil 4.4 4 demon kullanılarak $L=10$ ve $L=12$ iki farklı örgü uzunluğu için dış manyetik alan yokluğunda düzen parametresinin sıcaklıkla değişimi.

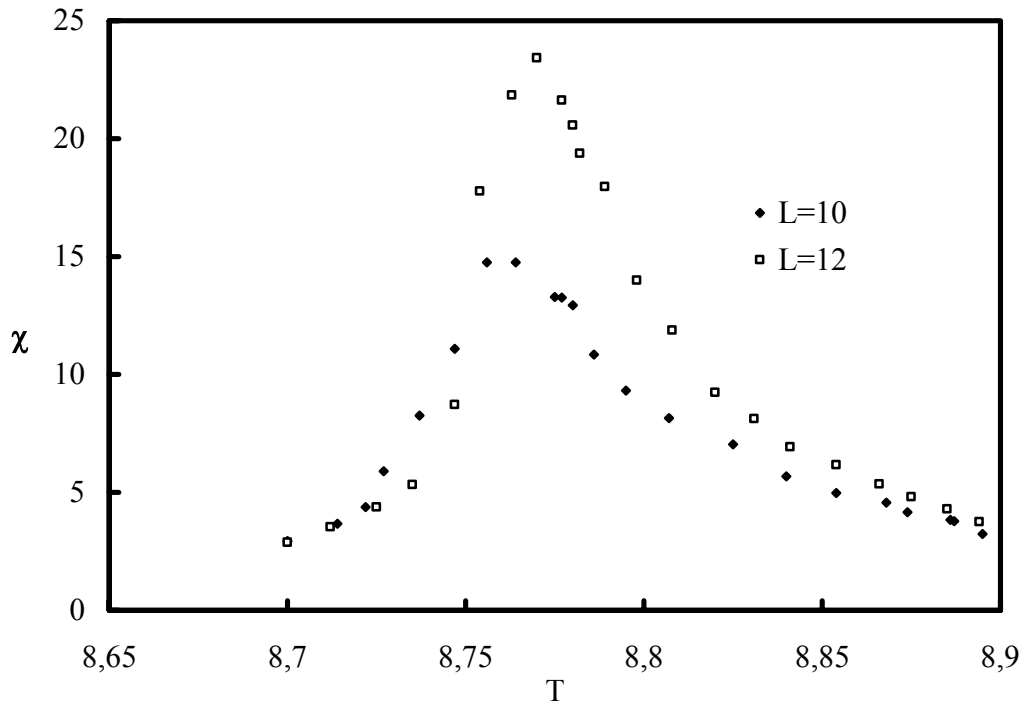


Şekil 4.5 4 demon kullanılarak $L=10$ ve $L=12$ iki farklı örgü uzunluğu için dış manyetik alan yokluğunda Binder parametresinin sıcaklıkla değişimi.

Binder parametresinin sıcaklık ile değişimi Şekil 4.5, öz ısının sıcaklık ile değişimi Şekil 4.6'da verilmiştir.



Şekil 4.6 4 demon kullanılarak $L=10$ ve $L=12$ iki farklı örgü uzunluğu için dış manyetik alan yokluğunda öz ısının sıcaklıkla değişimi.



Şekil 4.7 4 demon kullanılarak $L=10$ ve $L=12$ iki farklı örgü uzunluğu için dış manyetik alan yokluğunda manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişimi

Manyetik alınganlığın sıcaklık ile değişimi Şekil 4.7’de gösterilmiştir. Teorilere öngörüldüğü gibi kritik sıcaklıkta doğrusal boyut L ’nin azalmasıyla sonlu örgü etkileri kendisini hissettirmekte ve öz ısı, manyetik alınganlık gibi özelliklerin tekillikleri azalmakta hatta bir miktar da yuvarlaklaşma görülmektedir.

Sistemin $L=10$ ve $L=12$ örgü uzunlukları için Binder parametresinin sıcaklık ile değişim eğrilerinin kesişme noktasından sistemin kritik sıcaklığının $T_c=8,7797(9)$ olduğu görülmektedir. Bu değer yapılan diğer çalışmalarla karşılaştırması Tablo 4.1’de verilmiş ve uyumlu olduğu görülmektedir.

Tablo 4.1 Poyraz (2004)’dan alınan ve bu çalışmada elde edilen kritik sıcaklık (T_c) değerleri.

T_c	Yöntem
8,7774(35)	Monte Carlo
8,77832(54)	Seri Açılımı
8,77886(77)	Dinamik Monte Carlo
8,7779(5)	CA (3 demon)
8,7797(9)	Bu Çalışma (4 demon)

6. SONUÇLAR

Beş boyut, kritik boyut olan dört boyutun üzerinde olduğu için ortalama alan teorilerinin dış manyetik alanın varlığında manyetizasyonla ilgili öngörülerini simülasyonla gösterildi (Şekil 4.1, 4.2 ve 4.3). Uzay boyutu $d \geq 4$ olduğunda, dalgalanmaların ortalamaları alındığından, sistemin davranışı klasik teorilerin öngördüğü şekilde gerçekleşmiştir. Demon sayısının 4'e çıkarılması durumunda; $L=10$ ve $L=12$ örgü uzunlukları için düzen parametresi eğrilerinin kesişme noktasına karşılık gelen sıcaklık değerinin sonsuz örgü kritik sıcaklık değerinden sapma gösterdiği, bunun da sonlu örgü etkisinden kaynaklandığı sonucuna varıldı (Şekil 4.4). $L=10$ ve $L=12$ sonlu örgüleri için elde edilen manyetik alınganlık değerleri incelendiğinde; L örgü boyunun artırılmasıyla alınganlığın sonsuza ıraksayacağı, azaltılması ile de tepe noktasında yuvarlaklaşma olduğu ve kayma gösterdiği gözlemlendi (Şekil 4.7). Öz ısı eğrileri incelendiğinde; doğrusal boyutun artması ile maksimumların (tepelelerin) keskinliğinin (sivriliğinin) arttığı, L doğrusal boyutu arttıkça sonsuz örgü kritik sıcaklığına doğru kayma olduğu gözlemlendi (Şekil 4.6). $L=10$ ve $L=12$ örgü uzunlukları için Binder parametresinin sıcaklık ile değişim eğrilerinin kesişme noktasından sonsuz örgü kritik sıcaklığı $T_c=8,7797(9)$ olarak bulundu. Creutz "cellular automaton"ın fiziksel sistemlerin simülasyonunda alternatif bir yöntem olarak kullanılabileceği anlaşıldı.

Bu çalışmada simülasyon, dış manyetik alan varlığında başarıyla gerçekleştirilmiştir. Programında yapılan değişiklik de bu doğrultudadır. Deneysel veriler elde edilerek dış manyetik alanın varlığında simülasyonun bu verileri açıklayabilecek şekilde sonuçlar vermesi, programda gerekli değişiklikler yapılarak sağlanabilir ya da ihtiyaca göre yeniden yazılabilir. Böylece 10 K gibi düşük sıcaklık mertebelerinde laboratuvar ortamları oluşturmaya gerek kalmaksızın simülasyonlar yapılabilir.

KAYNAKLAR

- Aktekin N. (1995). Simulation of the three-dimensional Ising model on the Creutz Cellular Automaton, *Physica A*, 219, P436
- Aktekin N. (1995). Simulation of the four-dimensional Ising model on the Creutz Cellular Automaton, *Physica A*, 232, P397
- Aktekin N., Erkoç Ş., Kalay M. (1999). The test of the finite-size scaling relations for the five-dimensional Ising model on the Creutz Cellular Automaton, *Int. J. Mod. Phys. C* 10, P1237
- Aktekin N., Erkoç Ş.(2000). The test of the finite size-scaling relations for the six-dimensional Ising model on the Creutz Cellular Automaton, *Physica A*, 206, P214
- Aktekin N., Erkoç Ş.(2001). The test of the finite size-scaling relations for the seven-dimensional Ising model on the Creutz Cellular Automaton, *Physica A*, 290, P123
- Aktekin N. (1999). The simulation of the Ising model on the Creutz Cellular Automaton, *Annual Reviews of Computational Physics VII* (pp. 1-23)
- Baxter R.J.(1982).*Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* P486, Academic Pres Ltd. London
- Binder K., Nauenberg M., Privman V., Young A. P.(1985)., Finite-size tests of Hyperscaling, *Phys. Rev. B*, 31, P119
- Binney J.J., Dornick N.J., Fisher A.J. and Newman M.E.J.(1992). *The Theory of Critical Phenomena (An Introduction to the Renormalization Group)* P464, Clarendon Pres. Oxford
- Creutz M.(1983). Microcanonical Monte Carlo Simulation, *Phys. Rev. Lett.* 50 (P1411)
- Huang K.(1987). *Statistical Mechanics (2nd Edition)* P493s:John Wiley&Sons Newyork
- Kalay M.(2001). Beş Boyutlu Ising Modelinin Creutz “Cellular Automaton”ında İncelenmesi, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 93s
- Karaoğlu B.(2004). *Sayısal Fizik*, 190 sayfa, Seyir Yayıncılık, İstanbul
- Karaoğlu B.(2003). *İstatistik Mekaniğe Giriş*, 143 sayfa, Seyir Yayıncılık, İstanbul

- Kutlu B., Aktekin N.(1994). Computation of of Critical exponents for two-dimensional Ising Model on a Cellular Automaton, J. Stat. Phys., 75, P757
- Merdan Z., Bayırlı M.(2005). The effect of the increase of linear dimensions on Exponents obtained by finite size-scaling relations for the six-dimensional Ising model on the creutz Cellular Automaton, Applied Mathematics and Computation, 167, P212
- Merdan Z., Duran A., Atille D., Mülazimoğlu G., Günen A.(2005). The test of the finite size-scaling relations of the Ising Models in seven and eight dimensions on the Cellular Automaton, Physica A, (In press)
- Merdan Z.(2002). Altı Boyutlu Ising Modelinin Creutz “Cellular Automaton”ında İncelenmesi, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 108s
- Metropolis N., Rosenbluth A.W., Rosenbluth M.N., Teller A.H., Teller E.(1953). Equation of State Calculations by Fast Computing Machines, J.Chem.Phys.,21,(P1087)
- Pathria R.K.(1996). Statistical Mechanics (2nd Edition) P529s: Butterworth Heinemann Oxford
- Stanley H.E.(1971). Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena P308, Oxford University Pres, Newyork(USA)
- Poyraz Z.(2004). Beş Boyutlu Ising Modelini Creutz “Cellular Automaton”ında inceleyerek Sonlu Örgü Ölçekleme Bağıntılarının Test Edilmesi, Yüksek Lisans Tezi, Pamukkale Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Denizli, 44s
- Wolfram S.(1983). Statistical Mechanics of Cellular Automata, Rev. Mod. Phys., 55,(P527)
- WEB_1.(2005). Dobrosavljevic’s web site. <http://physics.fsu.edu/courses/spring05/phy6938-02/kadanoff.pdf> (10.03.2005)
- WEB_2.(2006). Jemoore’s web site. <http://ist-socrates.berkeley.edu/~jemoore/p212/phys212info.pdf> (15.03.2005)
- WEB_3.(2000). Meyer’s web site: <http://www.hermetic.ch/compsci/thesis/chap1.html> (22.03.2005)
- WEB_4.(). Sun’s web site: <http://physics.clarku.edu/~rsun/research/thesis/intro.ps> (03.04.2005)

ÖZGEÇMİŞ

Adı, Soyadı: İsa ERDEM

Ana Adı: Sultan

Baba Adı: Hüseyin

Doğum Yeri ve Tarihi: Afyon, 15.04.1970

Lisans Eğitimi ve Mezuniyet Tarihi: Kocaeli Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi,
Fizik Bölümü, 1998

Çalıştığı Yer: Pamukkale Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü
Araştırma Görevlisi

Bildiği Yabancı Dil: İngilizce