

KIRIKKALE ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

FİZİK ANABİLİM DALI
YÜKSEK LİSANS TEZİ

BEŞ BOYUTLU ISING MODELİNDE DÜZEN PARAMETRESİ İHTİMALİYET
DAĞILIMI İÇİN SONLU ÖRGÜ ÖLÇEKLEME BAĞINTISI

Hilal KIRAN

AĞUSTOS 2012

Fizik Anabilim Dalında Hilal KIRAN tarafından hazırlanan BEŞ BOYUTLU ISING MODELİNDE DÜZEN PARAMETRESİ İHTİMALİYET DAĞILIMI İÇİN SONLU ÖRGÜ ÖLÇEKLEME BAĞINTISI adlı Yüksek Lisans Tezinin Anabilim Dalı standartlarına uygun olduğunu onaylarım.

Prof. Dr. Saffet NEZİR
Anabilim Dalı Başkanı

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

Prof. Dr. Ziya MERDAN
Danışman

Jüri Üyeleri

Başkan : Doç. Dr. Erdem Kamil YILDIRIM _____
Üye : Prof. Dr. Ziya MERDAN _____
Üye : Yrd. Dç. Dr. Kutalmış GÜVEN _____

...../...../.....

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

Doç. Dr. Erdem Kamil YILDIRIM
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

TEZ BİLDİRİMİ

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

Hilal KIRAN

ÖZET

BEŞ BOYUTLU ISING MODELİNDE DÜZEN PARAMETRESİ İHTİMALİYET DAĞILIMI İÇİN SONLU ÖRGÜ ÖLÇEKLEME BAĞINTISI

KIRAN Hilal

Kırıkkale Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı, Yüksek Lisans tezi

Danışman: Prof. Dr. Ziya MERDAN

Ağustos 2012, 90 sayfa

En yakın komşu etkileşmeli beş boyutlu Ising modelin doğrusal boyutu $L= 4, 6, 8, 10$ ve 12 olan periyodik sınır şartlı örgülerde ve sonsuz örgü kritik sıcaklığı yakınında üç “bit”li demonlar kullanılarak Creutz “cellular automaton”ında simülasyonları yapılmıştır. Sonsuz örgü kritik sıcaklık değeri sonlu örgü ölçekleme bağıntısı kullanılarak simülasyon sonuçlarından elde edilmiştir. Diğer taraftan beş boyutlu Ising modelin düzen parametresi olasılık dağılımları kritik sıcaklıkta hesaplanmıştır. Düzen parametresi olasılık dağılımı için sonlu örgü ölçekleme ilişkisi Creutz Cellular Automaton simülasyonları ile test edilmiş ve nümerik olarak doğrulanmıştır. Analitik olasılık fonksiyonlarının sabitleri kritik noktada sayısal olarak oluşturulan olasılık fonksiyonuna fit edilerek elde edilmiştir. Büyük örgü değerlerinde analitik olasılık fonksiyonu evrensel bir biçime sahiptir.

Anahtar kelimeler: Ising Model, Cellular Automaton, Sonlu örgü ölçekleme, Düzen Parametresi Olasılık Dağılımı

ABSTRACT

THE FINITE-SIZE SCALING RELATION FOR THE ORDER-PARAMETER PROBABILITY DISTRIBUTION OF THE FIVE-DIMENSIONAL ISING MODEL

KIRAN Hilal

Kırıkkale University

Graduate School of Natural and Applied Sciences

Department of Physics, M. Sc. Thesis

Supervisor: Prof. Dr. Ziya MERDAN

August 2012, 90 pages

The five dimensional Ising model with nearest-neighbor pair interactions is simulated on the Creutz cellular automaton by using three bit demons near the infinite-lattice critical temperature with the linear dimensions $L= 4, 6, 8, 10,$ and 12 . The critical temperature value of infinite lattice is obtained from the results of simulations by using finite-size scaling relation. On the other hand the order parameter probability distribution for five dimensional Ising Model are calculated at the critical temperature. The finite size scaling relation for the order parameter probability distribution is tested and verified numerically by the Creutz Cellular Automaton simulation. The constants of the analytical function are estimated by fitting it to probability function obtained numerically at the finite size critical point. For the large finite size, the analytical function is described the universal shape of order parameter probability distribution function.

Key Words: Ising Model, Cellular Automaton, Finite-Size Scaling, Order Parameter Probability Distribution

TEŐEKKÜR

Tezimin hazırlanması esnasında hiçbir yardımı esirgemeyen ve biz genç arařtırmacılara büyük destek olan, alıřmalarım boyunca deęerli yardım ve katkılarıyla beni yönlendiren tez yöneticisi hocam, Sayın Prof. Dr. Ziya MERDAN'a, tez alıřmalarım esnasında, programlama konularında daima yardımını gördüğüm hocam Sayın Do. Dr. Mustafa ÖZTÜRK'e tezimin birçok aşamasında yardımını gördüğüm Sayın Yrd. Do. Dr. Ganimet MÜLAZIMOĐLU KIZILIRMAK ve Ydr. Do. Dr. Ayře DURAN'a ve son olarak bana birçok konuda olduęu gibi, tezimi hazırlamam esnasında da manevi desteklerini ve yardımlarını esirgemeyen aileme ve niřanlıma teőekkür ederim.

İÇİNDEKİLER DİZİNİ

Sayfa

ÖZET	iv
ABSTRACT	v
TEŞEKKÜR	vi
İÇİNDEKİLER DİZİNİ	vii
ÇİZELGELER DİZİNİ	ix
ŞEKİLLER DİZİNİ	x
SİMGE VE KISALTMALAR DİZİNİ	xii
1.GİRİŞ	14
2.TEORİ	19
2.1. Faz Geçişleri.....	19
2.2. Evrensel Davranış.....	21
2.3. Düzen Parametresi.....	21
2.4. Kritik Üsler.....	21
2.5. Termodinamik Nicelikler.....	24
2.5.1. Termodinamik Niceliklerin Sıcaklıkla Değişimi.....	25
2.5.2. Serbest enerji, İç Enerji ve Özısı.....	26
2.6. İkinci Derece Faz Geçişi.....	28
2.7. Düzen Parametresi Olasılık Dağılım Fonksiyonu.....	29
3. ISING MODEL	31
3.1. Ising Modelin Simülasyonu İçin Algoritmalar.....	32
3.1.1. Metropolis Algoritması.....	33
3.1.2. Spin Kümesi (cluster) Algoritmaları.....	34
3.1.2.1. Swendsen-Wang algoritması.....	34
3.1.2.2. Wolff algoritması.....	35
3.1.3. Creutz' un Gezgin “ Demon” Algoritması.....	36
3.1.4. “Cellular Automaton”lar.....	37
3.2. Ising Modelin Simülasyonları için “Cellular Automaton”lar.....	39
3.2.1. Q2R “cellular automaton”ı.....	39

3.2.2. Creutz "Cellular Automaton"1.....	40
3.3. Demon Enerjisinin Hesaplanması.....	42
3.4. Creutz "Cellular Automaton"ında Termodinamik Niceliklerin Hesabı.....	48
4. SONLU ÖRGÜ ÖLÇEKLEME.....	50
4.1. $d < 4$ İçin Sonlu Örgü Ölçekleme.....	50
4.2. Sonlu Örgü ölçeklemede Evrensel Kritik Büyüklükler.....	53
4.3. Serbest Enerji İçin Sonlu Örgü Ölçekleme.....	53
4.4. $d > 4$ İçin Sonlu Örgü Ölçekleme.....	55
4.5. Düzen Parametresi İhtimaliyet Dağılımı İçin Sonlu Örgü Ölçekleme Bağıntısı.....	61
4.6. Düzen Parametresi Olasılık Dağılımı Sonlu Örgü Ölçekleme Fonksiyonunun Kritik Noktadaki Analitik İfadesi.....	62
4.7. $d=5$ 'de Düzen Parametresi İhtimaliyet Dağılımı İçin Sonlu Örgü Ölçekleme Bağıntılarının Tespiti.....	63
5. SONUÇLAR VE TARTIŞMA.....	66
5.1 Sonlu Örgü Sıcaklık Değerlerinden Sonsuz Örgü Sıcaklık Değerlerinin Elde Edilmesi.....	67
5.2. Düzen Parametresi İhtimaliyet Dağılımı İçin Sonlu Örgü Ölçekleme Bağıntılarının Tespiti.....	69
KAYNAKLAR.....	81

ÇİZELGELER DİZİNİ

<u>ÇİZELGE</u>	<u>Sayfa</u>
3.1 İki “bit”li “demon”ların alabileceği tam sayı değerleri.....	42
3.2 Üç “bit”li “demon”ların alabileceği tam sayı değerleri.....	43
5.1. Manyetik alınganlığın maksimum olduğu sonlu örgü kritik sıcaklık değerleri.....	68
5.2. Beş boyutlu Ising modelinin farklı çalışmalarda elde edilen sonsuz örgü kritik sıcaklık değerleri.....	69
5.3. Analitik sonlu örgü ölçekleme fonksiyonun parametreleri için, bu fonksiyonun L örgü boylarına ait sıcaklık, düzen parametresi, manyetik alınganlık, ortalama değerleri.....	79
5.4. Analitik sonlu örgü ölçekleme fonksiyonun parametreleri için, bu fonksiyonun L örgü boylarına ait düzen parametresi olasılık dağılımlarının sonlu örgü ölçekleme çizimlerine uydurulması ile elde edilen değerler.....	79

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

<u>ŞEKİL</u>	<u>Sayfa</u>
2.1. M(H) grafikleri; a) $T < T_c$, b) $T = T_c$, c) $T > T_c$	20
2.2. (T,H) yarı düzlemi.....	20
2.3. İkinci derece faz geçişlerinde, düzen parametresi olasılık dağılımı P(M)'nin farklı sıcaklık bölgelerinde değişimi.....	29
3.1. d=1,2,3 ve 4 boyutlu örgülerin geometrik yapıları.....	31
3.2. d=1,2,3 ve 4 boyutlu örgülerin geometrik yapılarının izdüşümleri.....	31
3.3. Kare örgüde bir spin ters çevrildiğinde, ΔH_I , Ising enerjisindeki değişimler.....	44
3.4. Basit kübik örgüde bir spin ters çevrildiğinde, ΔH_I , Ising enerjisindeki değişimler.....	45
3.5. Soyut küp örgüde bir spin ters çevrildiğinde, ΔH_I , Ising enerjisindeki değişimler.....	46
5.1. Sonlu örgü manyetik alınganlık için $T_c^x(L)$ 'nin $L^{-d/2}$ 'ye karşı grafiği.....	69
5.2. Düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının, (P_L), indirgenmiş sıcaklığın t=0 değerinde ve doğrusal boyutları L=4, 6, 8, 10 ve 12 olan örgüler için, düzen parametresine (M) karşı grafiği.....	70
5.3. Düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının, (P_L), düzen parametresinin M= 0 değerinde ve doğrusal boyutları L =4, 6, 8, 10 ve 12 olan örgüler için sıcaklığa(T), karşı grafiği.....	71
5.4. Düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının, (P_L), indirgenmiş sıcaklığın t=0 değerinde ve doğrusal boyutları L = 4, 6, 8, 10 ve 12 olan örgüler için, düzen parametresine (M) karşı sonlu örgü ölçekleme grafiği.....	72
5.5. Düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının, (P_L), düzen parametresinin M= 0 değerinde ve doğrusal boyutları L =4, 6, 8, 10 ve 12 olan örgüler için indirgenmiş sıcaklığa(t) karşı sonlu örgü ölçekleme grafiği.....	73

5.6. a.	P(M)'nin L=4 için M'ye karşı analitik ifadesine göre yapılan fit.....	74
b.	L=4 için P(M) ve fitin farkı.....	74
5.7. a.	P(M)'nin L=6 için M'ye karşı analitik ifadesine göre yapılan fit.....	75
b.	L=6 için P(M) ve fitin farkı.....	75
5.8. a.	P(M)'nin L=8 için M'ye karşı analitik ifadesine göre yapılan fit.....	76
b.	L=8 için P(M) ve fitin farkı.....	76
5.9. a.	P(M)'nin L=10 için M'ye karşı analitik ifadesine göre yapılan fit.....	77
b.	L=10 için P(M) ve fitin farkı.....	77
5.10. a.	P(M)'nin L=12 için M'ye karşı analitik ifadesine göre yapılan fit.....	78
b.	L=12 için P(M) ve fitin farkı.....	78

SİMGELER DİZİNİ

T	Sıcaklık
T_c	Kritik Sıcaklık
d	Uzay Boyutu
M	Manyetizasyon (Düzen parametresi)
β	Manyetizasyon Kritik Üssü
χ	Manyetik Alınganlık
γ	Manyetik Alınganlık Kritik Üssü
C	ÖZİSİ
α	ÖZİSİ Kritik Üssü
ν	Korelasyon Uzunluğu Kritik Üssü
t	İndirgenmiş Sıcaklık
∞	Sonsuz İşareti
k_B	Boltzmann Sabiti
$\langle \rangle$	Beklenen Değer ve Ortalama
ξ	Kolerasyon Uzunluğu
L	Doğrusal Boyut
H	Dış manyetik Alan
S	Entropi
A	Alternatif Enerji
E_I	Ising Enerjisi
$J_{i,j}$	Spinler Arası Eşleşme Sabiti
H_I	Ising Spin Enerjisi, İç Enerji
E_D	“Demon” Enerjisi
ΔH_I	Ising Enerjisindeki Değişim
$P_L(M)$	Düzen Parametresi Olasılık Dağılımı

KISALTMALAR DİZİNİ

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

1.GİRİŞ

Faz geiři, belirli bir sıcaklıkta maddenin yapısında gözlenen deęişikliğe denir. Faz geiři paracıklar arasında meydana gelen deęişikliğe ve maddenin mıknatıslanmasındaki deęişmeye dayanmaktadır. Faz deęişimleri yoğun madde fiziğinin uğraşlarından biridir. Faz deęişimine en iyi örnek suyun faz deęiřtirmesidir. Bunun yanı sıra sıvıdan gaza, normal iletkenenden süperiletkene veya paramanyetikten ferromanyetikliğe geişler, faz geişleri için en yaygın örneklerdendir[1].

Manyetik faz geiři maddenin mıknatıslanmasındaki deęişmeye dayanmaktadır. Demir (Fe), Kobalt (Co), Nikel (Ni) gibi maddelerin manyetik faz geiři bilinen en yaygın örneklerdendir. Herhangi bir maddenin ölçülen manyetik dipol momentinin, maddenin hacmine oranı maddenin mıknatıslanması olarak tanımlanır. Mıknatıslanmanın kaynağı tamamlanmamış yörüngelerdeki çiftlenmemiş elektron spinidir. Manyetik özelliklerine baęlı olarak maddeler paramanyetik, diyamanyetik ve ferromanyetik olmak üzere başlıca üç sınıfa ayrılabilir. Paramanyetik maddeler sürekli(daimi) manyetik dipol momente sahip atomlardan oluşur. Bu momentler birbirleri ile çok zayıf etkileşimde bulunurlar ve bir dış manyetik alan içerisinde bulunmadıkları zaman gelişigüzel yönelmişlerdir. Sürekli manyetik dipol momente sahip atomların varlığından dolayı paramanyetik maddeler pozitif fakat küçük bir manyetik alınganlıęa sahiptir. Diyamanyetik maddeler sürekli manyetik momente sahip olmayan atomlardan oluşur. Diyamanyetik bir maddeye bir dış manyetik alan uygulandığında, uygulanan dış manyetik alana zıt yönde zayıf bir manyetik moment oluşur. Bu diyamanyetik maddelerin bir mıknatıs tarafından zayıfça itilmesine neden olur. Diyamanyetik maddeler çok küçük ve negatif bir manyetik alınganlıęa sahiptirler. Ferromanyetik maddeler ise zayıf bir dış alanda dahi birbirine paralel olarak yönelmeye çalışan manyetik momentlere sahiptir. Manyetik momentler birkere paralel hale getirildikten sonra dış alan ortamdaki kaldırılrsa bile madde mıknatıslanmış olarak kalır[2]. Manyetik faz geiři, mıknatıslanma tamamlanmamış atom tabakalarındaki elektronların spininden kaynaklanmaktadır. Elektron spinleri aynı yönde iken, düşük etkileşme enerjisine sahip olurlar. Sıcaklık mutlak sıfıra ulaştığında (0^0K) sistemin enerjisi minimumdur ve spinlerin hepsi aynı yöndedir. Bu sistem ferromanyektir. T sıcaklığı yükselmeye başlarsa spinler rastgele yönelmeye

başlar. Nihayetinde T sıcaklığı, T_c kritik sıcaklığına ulaştığında tüm spinler rastgele yönelmiş olur. Böylece sistem paramanyetik hale geçer. $T < T_c$ durumunda düzenli faz ferromanyetik haldir. $T > T_c$ durumunda ise düzensiz fazdır ve paramanyetik hal olarak bilinir[3]. Ferromanyetik maddelerin termodinamik davranışlarının anlaşılması için en basit model Ising modelidir. Ising modeli spinler arası basit etkileşmeleri içerir. Ising modelinin en basit hali iki durumlu, bir tane düzen parametrelili bir sistem olan spin $\frac{1}{2}$ Ising modelidir. Bu en basit Ising modelinin bir boyutlu hali, E.Ising tarafından 1925'deki tezinde çözülmüştür. Sistem herhangi bir pozitif T sıcaklığında faz geçişi yapmamaktadır. Ancak $T=0$ K'de kritik nokta olarak düşünülen bir noktada, faz geçişine sahip olduğu anlaşılmıştır[1, 3-6].

Ising modeli faz geçişi yapabilen sistemleri temsil eden, ferromanyetik maddelerin gösterdiği davranışların anlaşılmasını ve termodinamik niceliklerinin incelenmesini sağlayan, spinler arası basit etkileşmeleri içeren bir modeldir. Faz geçişler ve kritik olayların anlaşılmasındaki çalışmaların büyük bölümü bilgisayar simülasyonlarına dayanmaktadır. Bilgisayar simülasyon çalışmaları deneysel ve teorik çalışmalar arasında bir köprü oluşturur. Ising modelin ferromanyetik faz geçişini temsil eden en basit hali spin $\frac{1}{2}$ Ising modelidir[4]. İki durumlu ve tek düzen parametrelili bir modeldir. Analitik çözümü 1925 yılında E. Ising tarafından bir boyutlu uzayda yapılmıştır[7]. Dış manyetik alan yokluğunda iki boyutlu uzayda ise 1944 yılında Onsager tarafından analitik çözüm yapılmıştır[8]. Bundan başka üç durumlu ve iki düzen parametrelili bir sistem olan Spin-1 Ising modeli de araştırmacılar tarafından incelenmektedir[9-18]. Spin-1 modeli Blume, Emery ve Griffiths tarafından 1971 yılında tanımlanmıştır[9]. Bu tez çalışmasında spin $\frac{1}{2}$ Ising model kullanılmıştır. Sadece bir ve iki boyutlu uzayda ve dış manyetik alan yokluğunda analitik çözümü bulunan spin $\frac{1}{2}$ Ising modelin üst boyutlarda henüz analitik çözümü yapılamamıştır. Bu nedenle istatistiksel sistemlerin sayısal simülasyon çalışmaları oldukça önem kazanmaktadır. Simülasyon gerçek bir sistemin modelini tasarlama süreci ve sistemin işleme için sistemin davranışını anlamak veya değişik görüşleri değerlendirmek amacıyla bu model üzerinde denemeler yapmaktır. İstatistik mekanikte bazı problemlerin çözümü tam yapılamazken yaklaşık çözüm bulmak mümkün olabilir. Bu yaklaşık çözümlerin doğruluğunu denemek ve desteklemek açısından simülasyon çalışmaları oldukça önemlidir[19,20]. Yine deneysel çalışmalar esnasında

karşılaşılabilecek bir çok problemi ortadan kaldırması açısından simülasyon çalışmaları önem kazanmaktadır. Yani bilgisayar simülasyon çalışmaları teorik ve deneysel çalışmalar arasında bir köprü görevi görmektedir. Simülasyon çalışmaları ile fiziksel olayların incelenmesinde, model kurulması, model gelişiminin sağlanması, sonuçların elde edilmesi ve bu sonuçların değerlendirilmesi teorik çalışmaların alt yapısını oluşturur. Teorik model sisteme uygulanır ve sistemin fiziksel özellikleri hesaplanır. Fiziksel sistemlerin incelenmesi için birçok model tanımlanmıştır. En yaygın olanları Ising model, Potts modeli, Küresel model, Örgü gazı modeli, Percolation modeli ve X-Y ve Heisenberg modelidir.

Monte Carlo(MC) ve Molekül Dinamiği[20,21] istatistik sistemlerin sayısal simülasyonu, dolayısı ile faz geçişi ve kritik olay çalışmalarında kullanılan en temel araçlardır. Monte Carlo yöntemi şans karakterli olduğundan bu isimle anılır. Monte Carlo yaklaşımında rast gele sayı üretici kullanılır. Başlangıçta genel olarak spinlerin hepsi aynı yönlü alınır. Bu tür algoritmalarda sıcaklık önceden bilinmekte ve giriş parametresi olarak kullanılmakta ve sabit sıcaklıkta bütün spinler teker teker durumlarını değiştirme teşebbüsünde bulunmaktadır. Tüm örgüdeki spinlerin durum değiştirme girişiminde bulunması bir Monte Carlo adımını oluşturur. Değişikliğe uğrayacak spin, örgü üzerinde geliş güzel seçilebilir. Herhangi bir konfigürasyonla karşılaşma ihtimali Boltzman dağılımına uyacak şekildedir.

Molekül Dinamiği yöntemi Monte Carlo yönteminin bir alternatifidir[22]. Molekül Dinamiği metodu, çok parçacıklı sistemlerin dinamik özelliklerini incelemeye kullanılır. Simülasyon, sistemi oluşturan parçacıkların sabit toplam enerjide klasik hareket denklemlerini nümerik olarak çözmekten ibarettir. Zamana bağlı olarak atom veya moleküllerin konum, hız veya yönelimlerinin nasıl değiştiği bulunur. Klasik bir dinamik sistem, Hamilton hareket denklemlerinin sayısal integrasyonunu içermektedir. Molekül dinamiği özellikle katı ve sıvıların molekül yapıları, enerji ve hareketleri ile “bulk” (parçacık sayısının sonsuz olduğu durum) özelliklerinin ayrıntılı bir şekilde araştırılmasına imkân sağlamaktadır. Bu yöntemde rasgele sayı üretici kullanılmamaktadır.

Çok önemli ve çok kullanılan algoritmalarından biride, Markov yöntemidir ve ilk olarak 1953 yılında Metropolis ve arkadaşları tarafından türetilmiştir[23]. Metropolis ve arkadaşlarının algoritması ile Molekül Dinamiği arasında yer alan diğer bir simülasyon yönteminde 1983’de M. Creutz tarafından geliştirilmiştir[24]. Bu yöntem gezgin demon modeli olarak bilinmektedir. 1986’da M. Creutz iki boyutlu uzayda Ising modelinin deterministik (belirli bir kurala bağlı) bir “Cellular Automaton(CA)” kuralı ile simülasyonunu gerçekleştirmiştir[25]. “Cellular Automaton” ilk olarak Neuman ve Ulam tarafından biyolojik sistemlerin simülasyonu için kullanılmıştır[26-28]. “Cellular Automaton” 0 veya 1 değerleri alabilen bir hücre veya örgü noktalarından oluşur. Bu değerler sabit bir kurala göre kesikli zaman adımlarında yenilenir. “Cellular automaton” hücreleri herhangi bir boyutta düzenli bir örgü üzerinde sıralanabilir. Bu model için ilk temel teoriler 1983 yılında Wolfram tarafından verilmiştir[28]. Fizik, Kimya ve Biyoloji’deki dinamik sistemler için pek çok uygulamalar vardır.

Ising modelinin ve çeşitli fizik problemlerin bir CA olarak simülasyonu Vichniac tarafından önerilmiştir[29]. Ising modelin simülasyonu için iki farklı CA algoritması vardır. Bunlardan ilki Vichniac, Pomeau ve Herrman tarafından sunulan Q2R algoritması[30-32], ikincisi ise Creutz tarafından ortaya atılan Creutz “cellular automaton” olarak bilinmektedir[33]. Q2R algoritmasında simülasyon süresince iç enerjinin korunduğu konfigürasyonlar üretilmekte dolayısıyla özısı hesaplanamamaktadır. Bu sorun iç enerji dalgalanmalarının dikkate alındığı Creutz “Cellular Automaton” ile ortadan kalkmaktadır. İki boyutlu Ising modelinin tam çözümü uzay boyutunun kritik üsleri belirlemede önemli olduğunu göstermektedir. Bu sebeple üç veya daha yüksek boyutlu Ising modelin çözülmesi oldukça önemlidir. Ancak üç veya daha yüksek boyutlu Ising modelin analitik çözümü mümkün olmamıştır. Bu güne kadar boyut etkisi ve teorik sonuçların doğruluğunu araştırmak için $d=2$ [34-39], 3[17,34,40], 4[41-48], 5[49,50], 6[19,51], 7[52,53] ve 8[54,55] boyutlu Ising modelleri için simülasyonlar yapılmıştır. Ayrıca sonsuz örgüler için Ising modeli teorik olarak çözülebilmekte fakat sonlu örgüler için tam olarak çözülememektedir. Ising model için termodinamik niceliklerin sonlu örgülerdeki davranışları Monte Carlo ve Cellular Automaton simülasyonları ile incelenmiş ve

sonsuz örgü davranışları, sonlu örgü ölçekleme teorisi yardımıyla belirlenmiştir [23,42,56-73].

Bu tez çalışmasında beş boyutlu Ising model için, doğrusal boyutu $L=4,6,8,10,12$ olan periyodik sınır şartlı örgülerde ve sonsuz örgü kritik sıcaklığı yakınında üç “bit”li demonlar kullanılarak Creutz cellular automaton ile simülasyonlar yapılmıştır. Düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının (P_L), indirgenmiş sıcaklığın $t=0$ değerinde ve doğrusal boyutları $L=4, 6, 8, 10$ ve 12 olan örgüler için, düzen parametresine (M) karşı ve $T_c^{\chi}(\infty)=8.7776(1)$ durumu için grafiği çizilmiştir. Düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının, (P_L), düzen parametresinin $M=0$ değerinde ve doğrusal boyutları $L=4, 6, 8, 10$ ve 12 olan örgüler için sıcaklığa, (T), karşı grafiği çizilmiştir. Düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının, (P_L) indirgenmiş sıcaklığın $t=0$ değerinde ve doğrusal boyutları $L=4, 6, 8, 10$ ve 12 olan örgüler ($T_c^{\chi}(\infty)=8.7776(1)$) için düzen parametresine (M) karşı sonlu örgü ölçekleme grafiği çizilmiştir ($T_c^{\chi}(\infty)=8.7776(1)$). Düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının, (P_L), düzen parametresinin $M=0$ değerinde ve doğrusal boyutları $L=4, 6, 8, 10$ ve 12 olan örgüler için, indirgenmiş sıcaklığa (t) karşı sonlu örgü ölçekleme grafiği çizilmiştir ($T_c^{\chi}(\infty)=8.7776(1)$). Düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı için sonlu örgü ölçekleme bağıntısının $d=5$ 'te geçerli olduğu gösterilmiştir. Termodinamik limitte $P(M)$ fonksiyonun analitik ifadesindeki a ve c sabitleri bulunmuştur. Bulunan bu sabitlerin değerleri literatür değerleri ile uyum halindedir.

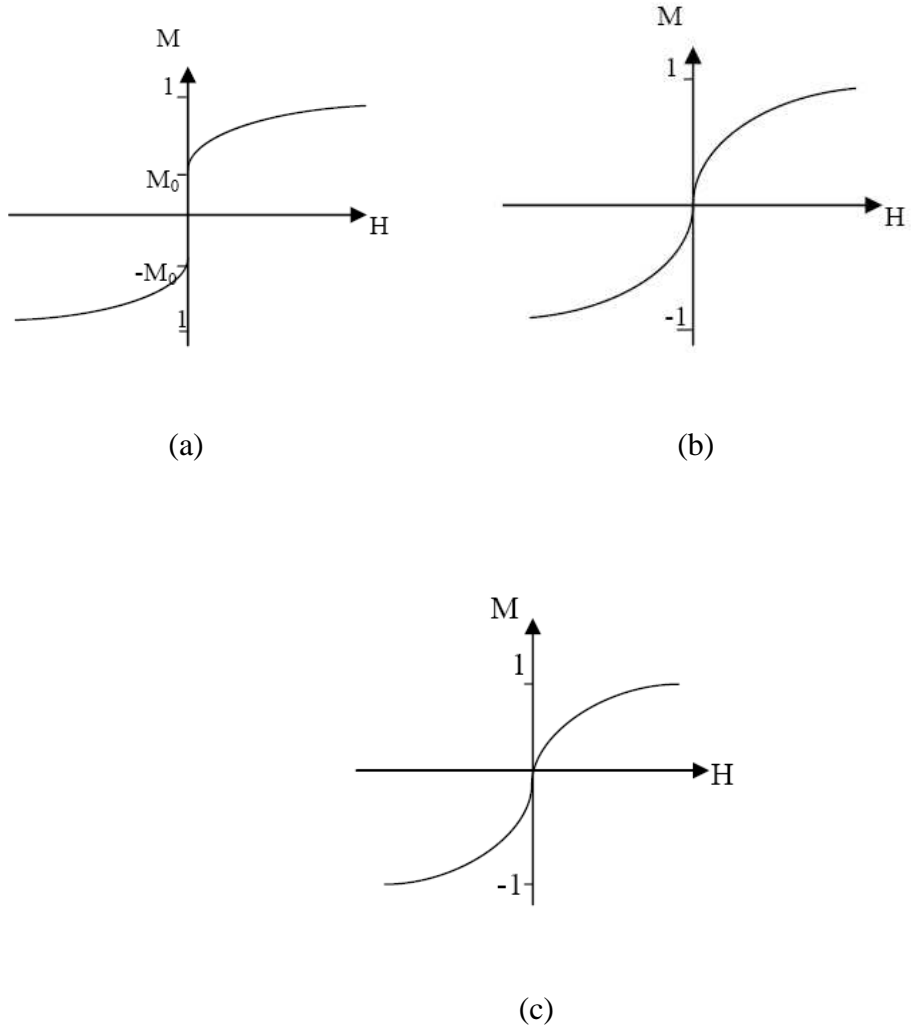
2.TEORİ

2.1. Faz Geçişleri

Ehrenfest'e göre faz geçişleri n. dereceden faz geçişleri şeklinde sınıflandırılır. Tabii ki o zamanlar örneğin öz ısı gibi bir çok termodinamik niceliğin ikinci derece geçişlerde Ehrenfest'in iddia ettiği gibi süreksizlik değil, aslında ıraksama gösterdiği bilinmiyordu. Üstelik 2. derecenin üzerinde faz geçişleri olduğuna dair deneysel bir kanıt da yoktu. Günümüzde 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 suyun faz geçişleri ya da eritilmiş bir metalin katılaşması birinci dereceden faz geçişleridir.

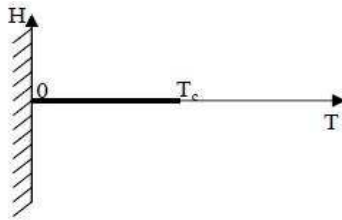
Gizli ısı içeren faz geçişleri birinci derecedendir. Bir madde yüksek sıcaklıktaki bir fazdan düşük sıcaklıktaki bir faza birinci dereceden faz geçişini şu şekilde yapar: Geçiş sıcaklığı denilen bir T sıcaklığı civarında sıcaklığın küçük aralıklarından geçerek soğurken sıfırdan farklı bir ısı dışarı verilir. Bu gizli ısıdır. Geçişteki bu ısı yayımı maddenin yapısında T sıcaklığında köklü bir yeniden düzenlenme olduğunu gösterir. Örneğin $L \approx 334\text{Jg}^{-1}$ su-buz geçişi gizli ısıyı H_2O molekülleri kendini 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. Ferromanyetik durumda ($T < T_c$) madde alan uygulanmasa dahi mıknatıslanır. Buna göre dış manyetik alan yokluğunda demir örneğini ısıtırsanız sıfır manyetik alandaki kendiliğinden manyetizasyonun (M_0) azaldığı görülür. Eğer sıcaklık kritik sıcaklığa (T_c) yükselirse Şekil 2.1'de görüldüğü gibi M_0 sıfıra gider ve $M(H)$, $H=0$ 'da sonsuz eğimli sürekli bir fonksiyon haline gelir.



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

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



Şekil 2.2. (T,H) yarı düzlemi.

Hat boyunca M süreksiz diğer yerlerde H ve T'nin analitik bir fonksiyonudur. Sıcaklık eksenini boyunca 0'dan T_c 'ye bir hat vardır. Manyetizasyon (M) hattın sağındaki tüm noktalarda, H'nin ve T'nin analitik bir fonksiyonudur. Hat üzerinde ise süreksizdir. Bu hatta "faz geçiş çizgisi" denir. $(T_c,0)$ son noktası "kritik nokta" olarak bilinir[74].

2.2. Evrensel Davranış

Farklı sistemlerin aynı kritik üstlere sahip olmasına evrensellik denir. Kritik üsleri aynı olan sistemler aynı evrensellik sınıfında yer alırlar. Örneğin Ksenon(Xe) ve Kükürt Florür(SF_2) farklı kritik sıcaklığa sahip oldukları halde kritik üstleri aynıdır[1,3,4].

2.3. Düzen Parametresi

Faz geçişlerinde diğer bir kavram düzen parametresi Ψ 'dir. Düzen parametresi tek bileşenli akışkanlar için yoğunluk, akışkan karışımları için mol kesirleri arasındaki fark, süper akışkanlar için ise kompleks düzlemde ve iki bileşenli bir vektördür. Ferromanyetizma durumunda ise düzen parametresi manyetizasyondur. Manyetizasyon üç bileşenli bir vektör olarak düşünülmektedir. Özet olarak düzen parametresi düşünülen sistemin sınıflanmasına bağlı bir büyüklüktür. Düzen parametresinin bileşen sayısı n aşağıdaki sistemler için şöyledir[5].

Basit akışkanlar, ikili akışkanlar, tek eksenli mıknatıslar ve ikili alaşımlar için $n=1$, süper akışkan He^4 ve $He^3 + He^4$ karışımı, XY mıknatısı için $n=2$, izotropik mıknatıslar için $n=3$ 'dür. Kritik üsler arasında klasik teori n'ye bağımlılığı açıklaması da n'nin farklı değerleri için küçük farklılıklar ortaya çıkmaktadır. Buna göre düzen parametresinin simetrisi ve tensörel karakteri önemlidir.

2.4 Kritik Üsler

Bütün spin sisteminin mikroskopik durumu

$$\{\sigma\}=\{\sigma_1, \sigma_2, \dots \} \quad (2.1)$$

Bölüşüm fonksiyonu

$$Z_N = \sum_{(\sigma)} \exp(-\beta E(\{\sigma\})) \quad (2.2)$$

Serbest enerji

$$A = -kT \ln Z_N \quad (2.3)$$

Ortalama manyetizasyon

$$M(H, T) = \langle \sigma \rangle = -\frac{1}{N} \frac{\partial A(H, T)}{\partial H} \quad (2.4)$$

Alınganlık

$$\chi = \frac{\partial M(H, T)}{\partial H} = -\frac{1}{N} \frac{\partial^2 A(H, T)}{\partial H^2} \quad (2.5)$$

Enerji

$$U = A - T \frac{\partial A(H, T)}{\partial T} = -T^2 \frac{\partial A(H, T)/T}{\partial T} \quad (2.6)$$

Öz ısı

$$C = \frac{\partial U(H, T)}{\partial T}. \quad (2.7)$$

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,

alınanlığın 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)
Alınanlık : $\chi \propto |t|^{-\gamma}$
Durum denklemleri : $M \propto |H|$ (T_c 'de).

Kritik üsler, özellikle kritik sıcaklık civarında bir çok fiziksel büyüklüğün nasıl davrandığını gösterdiğinden dolayı önem taşımaktadır. Söz konusu kritik sabitler şu şekildedir:

- β = ısısal magnetizasyon sabiti
 δ = magnetizasyon sabiti
 α = öz ısı sabiti
 γ = duyunluk sabiti.

Kritik üslerin elde edilmesindeki matematiksel mantık şu şekilde tarif edilmektedir[75]: Kritik nokta civarında genel bir $f(t)$ fonksiyonunun davranışında rolü olan kritik üssü tanımlamak için;

$$t = \frac{T - T_c}{T_c} = \frac{T}{T_c} - 1 \quad (2.8)$$

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

$$\lambda \equiv \lim_{t \rightarrow 0} \frac{Inf(t)}{Int} \quad (2.9)$$

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

$$F(t) = At^\lambda (1 + Bt^y + \dots) \quad (y > 0) \quad (2.10)$$

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 grafiği 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.

2.5. Termodinamik Nicelikler

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

$$f(H, T) = -kTN^{-1} \log Z(H, T). \quad (2.11)$$

Serbest enerjiye bağlı olarak termodinamik nicelikler aşağıdaki ifadelerle tanımlanmaktadır.

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

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

$$M(H, T) = -\frac{\partial}{\partial H} \left(\frac{f(H, T)}{kT} \right) \quad (2.14)$$

$$\chi(H,T) = \frac{\partial}{\partial H} M(H,T). \quad (2.15)$$

Burada H_1 iç enerji, C özısı, M mıknatıslanma ve χ ise manyetik alınganlıktır. Manyetizasyon cinsinden ifade edilebilen bir nicelik olan Binder kümülanı (g_L) ise aşağıdaki ifade ile tanımlanır[57].

$$g_L = 1 - \langle M^4 \rangle / (3 \langle M^2 \rangle^2) \quad (2.16)$$

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

İkinci derece faz geçişlerinde mıknatıslanma düzen parametresi ismini alır. Ising model faz geçişi yapabilen sistemleri temsil eden bir modeldir. Fiziksel sistemlerin dışında birçok alandaki problemler de Ising modelle çözülebilir. Bu nedenle Ising modelin çözümü oldukça önem kazanmaktadır.

2.5.1. Termodinamik Niceliklerin Sıcaklıkla Değişimi

Kritik sıcaklık yakınında termodinamik niceliklerin indirgenmiş sıcaklığa $t \equiv (T - T_c)/T_c$ bağlı olarak değişimi $t \rightarrow 0$ limitinde sonlu olan düzenli bir kısım ile ıraksayan (singüler) bir kısma ayırabilmektedir. Dış manyetik alanın olmadığı durumda singüler kısımlar t 'nin bir kuvvetiyle orantılı olarak değişmektedir[1,3-6].

$$M(T) \sim |t|^\beta \quad (t \rightarrow 0^-) \quad (2.17)$$

$$C(T) \sim |t|^{-\alpha} \quad (t \rightarrow 0^+) \quad (2.18)$$

$$\chi \sim |t|^{-\gamma} \quad (t \rightarrow 0^+) \quad (2.19)$$

$d \geq 4$ için $\alpha=0$, $\beta=1/2$, $\gamma=1$, $d < 4$ için ise bu değerler $d=2$ için $\alpha \equiv 0(\log)$, $\beta=0.125$, $\gamma=1.75$, $d=3$ için $\alpha \equiv 0.11$, $\beta=0.33$, $\gamma=1.24$ [57].

Kritik davranışı açıklayacak en basit fiziksel teori ölçeklemedir. Ölçekleme termodinamik terimlerle desteklenmeye ihtiyaç duymaktadır. Simetrisi birtakım basitleştirmelere uygun olduğundan ölçeklemenin miknatis üzerinde açıklanması daha uygundur. Helmholtz serbest enerjisi $F(T,H)$, şu temel diferansiyel termodinamik bağıntıyı sağlamaktadır.

$$dF = -SdT - MdH \quad (2.20)$$

bu ifade de S toplam entropidir. Legendre dönüşümü yardımıyla bu ifadeden alternatif serbest enerji

$$A(T, M) = F + MH \quad (2.21)$$

üretilir ve aşağıdaki basit diferansiyel bağıntı elde edilir.

$$dA = -SdT + HdM \quad (2.22)$$

manyetik alan ve manyetik alınganlık, $A(T,M)$ fonksiyonundan aşağıdaki gibi elde edilir.

$$H = \left(\frac{\partial A}{\partial M} \right)_T \quad \text{ve} \quad \chi^{-1} = \left(\frac{\partial^2 A}{\partial M^2} \right)_T \quad (2.23)$$

$T \rightarrow T_c$ olduğunda manyetik alınganlık iraksamaktadır. Ancak yapısı itibariyle negatif değildir. Gerçekte negatif alınganlık termodinamik olarak uygun değildir. Bu M 'nin bir fonksiyonu olarak serbest enerji A 'nın dış bükey bir fonksiyon olduğu anlamına gelir. A 'nın M ile değişim grafiğinde eğrilik kesinlikle pozitif olmalıdır.

2.5.2. Serbest Enerji, İç Enerji ve Özısı

Termodinamik limitte spin başına serbest enerji

$$f(H,T) = -kT \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \ln Z_1(H,T) \quad (2.24)$$

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

$$\langle X \rangle = Z^{-1} \sum_s X(s) \exp[-E(s)/kT] \quad (2.25)$$

şeklinde tanımlanır[76]. Burada,

$$H_1 = \langle E \rangle = Z^{-1} \sum_s E(s) \exp[-E(s)/kT] \quad (2.26)$$

ifadesi yazılabilir. Denklem 2.25 ve denklem 2.26'yı kullanarak iç enerji ifadesi denklem 2.27 şeklinde tanımlanır.

$$H_1 = kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln Z \quad (2.27)$$

$$H_1 = -kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{f}{kT} \right). \quad (2.28)$$

Diğer taraftan spin başına özısı ise,

$$C(H,T) = \frac{\partial H_1}{\partial T} \quad (2.29)$$

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

$$C_v(TC^-) \neq C_v(TC^+) \quad (2.30)$$

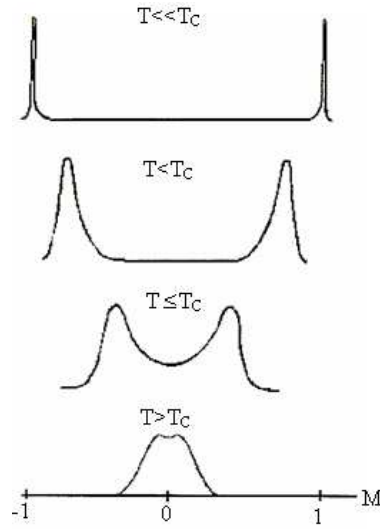
özısı düz olarak, kritik sıcaklığın her iki yanında ani bir hızla artar. Kritik sıcaklıkta C_v 'nın bir pike sahip olup olmadığı veya sonsuzda ıraksayıp ıraksamadığı oldukça önemlidir. Onsager özısını $C_v(T) = A \ln(t) +$ sonlu belirsizlik terimleri şeklinde tanımlar. $\alpha = 0$ (log) olması özısının singüler olmayan bir kısma sahip olmasındandır. Özısı $T < T_c$ için α' ve $T > T_c$ için α şeklinde iki üs ile tanımlanır. Teorik ve deneysel olarak $\alpha = \alpha'$ olduğu ispatlanmıştır.

2.6. İkinci Derece Faz Geçişi

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

örgü boyu ile sınırlanmasını beraberinde getirmektedir. Bunun sonucu olarak, sonsuz hacim limitinde, geçiş noktasında, termodinamik niceliklerde ortaya çıkan sonsuz değerler örgü büyüklüğüne bağlı olarak sonlu değerlere sahip olur.

İkinci derece faz geçişini tanımlamanın bir başka yolu ise düzen parametresi olasılık dağılımı $P(M)$ ve iç enerji olasılık dağılımı $P(E)$ 'yi incelemektir[77-79]. Şekil 2.4'de görüldüğü gibi $P(M)$, faz geçişi kritik sıcaklığının altında düzeni ifade eden bir pike, kritik sıcaklıkta ise iki eşit yükseklikte pike sahiptir. Sıcaklık arttıkça yaklaşan pikler kritik sıcaklığın üstünde düzensizliği işaret eden tek pike dönüşür.



Şekil 2.3. İkinci derece faz geçişlerinde, düzen parametresi olasılık dağılımı $P(M)$ 'nin farklı sıcaklık bölgelerinde değişimi [80].

Olasılık dağılımından yola çıkılarak sistemin entropisi ve serbest enerjisini tanımlamak mümkündür[78]. Düzen parametresi olasılık dağılımı ile serbest enerji arasındaki fonksiyonel ilişki $F(M) = -k_B T \ln P(M)$ ifadesi ile verilir[80].

2.7. Düzen parametresi olasılık dağılım fonksiyonu

Düzen parametresi olasılık dağılım fonksiyonu sadece manyetik sistemlerin değil, aynı zamanda sıvı-gaz kritik noktasının ve elektromanyetik etkileşimlerin kritik noktasının çalışılması açısından onaylanmış en güçlü araçtır. Sonlu sistemlerde M

manyetizasyonu dalgalı bir niceliktir ve $P(M)$ olasılık dağılımı ile ifade edilir. Ising model gibi sistemlerde ikinci derece faz geçiş bölgesinde (Şekil 2.3) ve T_c kritik sıcaklığın altında $P(M)$ dağılımı $+M$ ve $-M$ bölgelerinde kendiliğinden oluşmuş olan çift pikli bir yapıya sahiptir. T_c kritik sıcaklığının üstünde ise, $P(M)$ dağılımı "0" manyetizasyonunda tek pikli durum gösterir ve bu durum düzensiz yapıyı temsil eder, kritik sıcaklıkta ise birbirine eşit iki pik gözlenir[81].

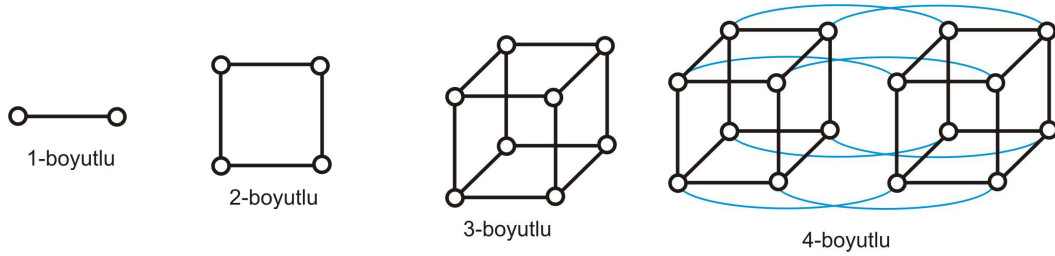
Ising modelin düzen parametresinin olasılık dağılımı $P(M)$ için sonlu örgü ölçekleme fonksiyonunun bilinmesi düzen parametresinin bütün moment ve kümülanlarının hesaplanmasını mümkün kılar. Düzen parametresi olasılık dağılımı;

$$P_L(M) = \frac{N_M}{N_{CCAS}} \quad (2.31)$$

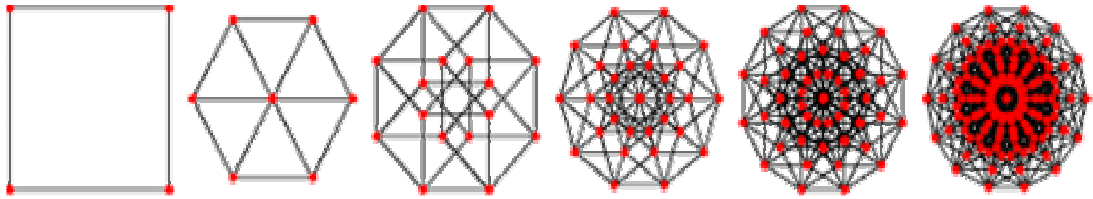
ile hesaplanmıştır. Burada N_M , M 'deki manyetizasyonun ortaya çıkma sayısı; N_{CCAS} ise Creutz cellular automaton adım sayısıdır.

3. ISING MODEL

Ising model faz geişi yapan sistemleri temsil eden , spinler arası etkileşmeleri içeren, ferromanyetik maddelerin termodinamik niceliklerinin incelenmesini sağlayan bir modeldir. Bu modelde incelenen sistem örgü konumları adı verilen N tane sabit noktadan oluşan, d boyutlu periyodik bir örgüdür. Ising modelinde spinler bir boyutlu olup örgünün kendisi bir, iki, üç veya daha fazla boyutlu olabilir. Genel Ising modelin düzenli bir örgünün köşelerinde bulunmaya zorlanmış spinlerden oluştuğu düşünülür. Örgünün geometrik yapısı iki boyutta kare veya üçgen, üç boyutta kübik veya hegzogonal, dört boyutta hiper kübik'dir.



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



Şekil 3.2. $d=1,2,3$ ve 4 boyutlu örgülerin geometrik yapılarının izdüşümleri.

Sistemde tek değişken spindir ve S_i simgesi ile gösterilir. Eğer i . örgü konumunda spin yukarı yönelmişse $S_i=+1$, eğer spin aşağı doğru yönelmişse $S_i=-1$ olarak ifade edilir. Verilen bir $\{S_i\}$ kümesi bütün sistemin konfigürasyonunu belirler. Örgüdeki spinler arasında etkileşim enerjisi aşağıdaki gibi verilir.

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

Burada E_I Ising enerjisi $\langle ij \rangle$ yakın komşu çiftleri üzerinden toplamı göstermektedir. H dış manyetik alan ve J_{ij} en yakın komşu etkileşme sabiti olarak verilmektedir. $J > 0$ ferromanyetizma, $J < 0$ ise antiferromanyetizma durumuna karşılık gelmektedir. Ising modelde bütün termodinamik fonksiyonlar E_I enerjili mümkün konfigürasyon üzerinden hesaplanmaktadır.

3.1. Ising Modelin Simülasyonu İçin Algoritmalar

Birçok fiziksel problem Ising modeli ile incelenebilmektedir. Ferromanyetik maddeler bu model ile modellenmekte ve termodinamik özellikleri incelenmektedir. Faz geçişi gösteren sistemler için ortaya konulan modellerin analitik çözümleri zor olduğundan bu sistemleri incelerken bilgisayar simülasyonları kullanılması oldukça doğaldır. Faz geçişi ve kritik olay çalışmalarında ilerlemenin büyük bir kısmı bilgisayar simülasyon sonuçları sayesinde.

Monte Carlo ve Molekül Dinamiği ilk simülasyon çalışmaları olarak bilinir. Molekül Dinamiğinde ilk simülasyon teknikleri, tanımlanan bir sistem içinde hareket boyunca enerjinin sabit kalması düşünülerek ortaya çıkmıştır. Mikrokanonik kümede parçacık sayısı(N), hacim(V) ve toplam enerji(E) sabit olarak alınır. Etkileşme potansiyellerinin bilinmesi parçacıklar üzerine etkiyen kuvvetlerin hesaplanmasını sağlar. Sonra mikrokanonik topluluk için bir Δt zaman adımında Newton hareket denklemleri çözülür. Kısa bir zaman sonrasında i . parçacığın X_i koordinatları ve V_i hızları aşağıdaki ifadelerle bulunabilir.

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

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

Molekül dinamiği için parçacık sayısı ve hücre hacmi korunan bir hücre tanımlanmalıdır. Böyle bir sistem için toplam kinetik enerji

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

ve sistemin potansiyel enerjisi

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

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

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

dir. Sistemin hareket denklemleri ise

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

dir. Molekül Dinamiği arasında yer alan simülasyon çalışmalarının temeli, ilk olarak 1953 yılında Metropolis ve arkadaşları tarafından ortaya konulan algoritmaya dayanmaktadır[23]. Bu simülasyon çalışmaları zamanla geliştirilmiş ve bir çok yeni simülasyon metodu ve algoritma ortaya çıkmıştır.

3.1.1. Metropolis Algoritması

Metropolis algoritması, Metropolis ve arkadaşları tarafından 1953 yılında geliştirilmiştir[23]. Bu algoritma markov yöntemi ile sistemin var olan konfigürasyonundan yeni konfigürasyonlar üretir. Sistemin spin konumlarının α durumundan α' durumuna değişimi ile sistemin enerjisindeki değişim hesaplanır.

Enerji deęiřimi pozitif ise yeni konfigürasyon $e^{-\beta(E_{a'}-E_a)}$ olasılıęı ile kabul eder. Yani ;

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

Burada A normalizasyon sabitidir ve $\sum_{a'} P(a \leftarrow a') = 1$ denklemini saęlamak için seçilir. Metropolis algoritmasının başarısının temel sebebi pratik uygulamasının oldukça açık olmasıdır. Simülasyonda ilk olarak tek spin ters çevrilmeye uğraşılır. Bu spin rasgele seçilir ya da örnek spinlerden her biri ters çevrilebilir. Daha sonra eski ve yeni enerjiler karşılaştırılır. Bir spinin ters çevrilmesi üzerine enerji deęiřimi sadece komřu spin deęerlerine baęlıdır. Bilgisayar yoluyla yeni konfigürasyon verilen olasılıęa göre kabul ya da ret edilir.

3.1.2 Spin Kümesi (cluster) Algoritmaları

3.1.2.1. Swendsen-Wang Algoritması

Swendsen-Wang algoritması 1987 yılında Swendsen ve Wang tarafından sunulmuřtur[22,76]. Spinlerin kendilięinden ters çevrilmesi ve spin kümelerinin “cluster” řeklinin belirlenmesine sistemin kendisinin karar vermesi fikrine dayanan ilk başarılı çalışmadır. Ising modele de uygulanabilen bir algoritmadır. Uygun küme konfigürasyonları oluřturup küme ya da kümelerin bir kerede ters çevrilmesiyle dinamik kritik üs azaltılır. Öncelikle en yakın komřu l ve m hücresi seçilir. Bu l ve m hücreleri arasındaki katkıların çıkarıldıęı eskisine eřit yeni bir hamiltonyen tanımlanır. Daha sonra S_l ve S_m spinlerinin aynı ya da zıt yönde olmalarına göre bu hamiltonyene uyan üleşim (partition) fonksiyonu hesaplanır. Swendsen-Wang spin temsilinden baę temsiline geçen ve tekrar geri dönen bir algoritma ortaya koymuřlardır.

Bu algoritma řöyledir:

- 1- Bařlangıç spinleri rastgele yönlendirilir. Komřu spinler arasında baęlar oluřturulur ve bu baęlar tek tek incelenir.
- 2- Komřu iki spin zıt yönlü ise silinir. Aynı yönlü ise bu baęlar $1-e^{-2\beta_j}$ ihtimali ile korunur veya $e^{-2\beta_j}$ ihtimali ile silinir. Bu basamak büyük spin kümelerini iki ya da daha fazla küçük spin kümesine böler.
- 3- Temel birimler olarak yeni daha küçük spin kümelerinin yönelimleri ele alınır ve eşit olasılıkla rasgele olarak ařaęı veya yukarı yönlendirilir.
- 4- Son olarak, yeniden yönlendirilmiş spin kümelerinden bařlangıçtaki spin örgüsü yeniden oluřturulur.

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

3.1.2.2. Wolff Algoritması

Spin kümesi algoritmalarından bir dięeri olan Wolff algoritması 1989 yılında Wolff tarafından tanımlanmıřtır[82]. Bu algoritma Ising sistemi için tanımlanmıřtır. Swendsen-Wang algoritmasının mantıęına benzer bir algoritmadır ve kritik yavaşlama problemini tamamen ortadan kaldırmaktadır. Wolff algoritmasının yineleme basamaęı bir spin kümesinde bulunan spinlerin yön deęiřtirmesi işlemini içerir.

Bu algoritma řöyledir.

- 1- Örgü üzerinde rasgele bir i hücresi seçilir.

- 2- Bütün komşu j hücreleri ziyaret edilir ve $P_{ekle}(S_i S_j) \equiv 1 - e^{-\min(0, 4, \beta J S_i S_j)}$ ihtimaliyle j örgüsü i 'yi içeren spin kümesine eklenir. Ferromanyetik ($J < 0$) bir model için eğer spinler zıt yönde iseler P_{ekle} sıfır ve spinler aynı yönde iseler $1 - e^{-4\beta J}$ dir.
- 3- i 'li spin kümesi ile birleşen yeni hücrelerin her biri j indisine eşit alınarak ikinci basamak tekrarlanır.
- 4- Daha fazla yeni hücre ekleninceye kadar üçüncü basamak tekrarlanır.
- 5- Spin kümesindeki bütün hücelere ait spinler yön değiştirir ve işlem tamamlanır.

Wolff algoritması ve Swendsen-Wang algoritması oldukça benzerdir. Spin kümesine yeni bir spin bağlanma ihtimali Swendsen-Wang algoritmasında bir bağı yakalama ihtimali ile aynıdır. İki algoritmada da spin kümesinin artışı aynı ortalama üzerindedir. Fakat Swendsen-Wang algoritmasında bütün spin kümelerinde her basamakta bir spin yön değiştirir. Wolff yönteminde ise o sadece başlama spinini içeren spin kümesidir. Bu daha büyük spin kümelerinin bu işlemde daha sık böyle yön değiştirdiklerini göstermektedir. Bu büyük spin kümelerinde algoritmayı daha etkin yapar.

3.1.3. Creutz' un Gezgin “Demon” Algoritması

Moleküler dinamik olarak bilinen yöntem Monte Carlo yönteminin bir alternatifidir. Yöntem klasik bir dinamik sistem için Hamilton hareket denkleminin integrasyonunu içerir. Başlangıç şartı olarak p genelleştirilmiş momentum ve q genelleştirilmiş koordinatlar belirlidir. Toplam enerji sabittir. Metropolis ve arkadaşlarının algoritması ile molekül dinamiği arasına giren bir simülasyon yöntemi 1983 yılında M. Creutz tarafından geliştirilmiştir[24]. Öncelikle “demon” (spine eşlenik momentum) denilen bir serbestlik derecesi tanımlanmaktadır. Bu yeni değişken molekül dinamiğindeki eşlenik momentumun benzeridir.

Molekül dinamiğindeki eşlenik momentum kinetik enerjinin hesaplanmasında kullanılmasına benzer şekilde “demon”da kinetik enerji taşır. Sistemin toplam enerjisi korunacak şekilde gezgin “demon” rasgele olarak spinleri ziyaret eder. Demon bir

hücreye ulaştığı zaman uygun bir spini ters çevirmek için girişimde bulunur. Eğer spinin enerjisi düşükse “demon” spine enerji aktarır ve spinin ters çevrilmesine yetecek kadar enerji aktarılmışsa spin ters çevrilir. Aksi takdirde başka uygun bir hücredeki spini ters çevirmek için hareket eder. Demon, enerjisini üstel olarak aktarır. Büyük sistemlerde demonun enerjisi toplam enerjinin sadece küçük bir kısmını gösterir. Demon’un spinleri rasgele ziyaret etmesinden dolayı bu algoritmaya Creutz’un gezgin “demon” algoritması denir. Bu algorithmada tek bir gezgin “demon” kullanılabileceği gibi birden fazla gezgin “demon” da kullanılabilir.

3.1.4. “Cellular Automaton”lar

1983 yılında ilk temel teorisi Wolfram tarafından verilen “Cellular automaton” lar ilk olarak Neuman ve Ulam tarafından “cellular space” adı ile biyolojik sistemlerin simülasyonu için önerilmiştir[26-28]. Fizik, Kimya ve Biyolojide karşılaşılan bir çok dinamik sistem için uygulama alanları vardır.

Kinetik enerji terimi içeren dinamik Ising modeli ve diğer örgü spin sistemleri basit bir “cellular automaton” problemi olarak ele alınmaktadır. Daha genel olarak makroskobik seviyede her hücre birçok molekül ihtiva eden bir bölgeyi temsil edebilir ve onun değeri birkaç farklı mümkün fazlardan birini temsil edebilir. “CA” bu şekliyle doğrusal olmayan kimyasal sistemler için kesikli modeller olarak kullanılmıştır. “CA” larda uzay ve zaman kesikli değerlere sahiptir. Sonsuza kadar genişletilebilen düzenli hücreler örgüsünden oluşur. Örgünün her bir hücresinde kesikli değerler alabilen değişkenler yer almaktadır. Bir “CA” bu hücre değişkenlerinin değerleri ile belirlenmektedir.

Genel olarak basit bir “cellular automaton” 0 veya 1 değerli hücre veya sitelerin bir satırından oluşur. Bu değerler kesikli her zaman adımı sırasında yenilenir. “Cellular automaton”un kesikli zaman adımlarındaki gelişimi sırasında 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 komşusu ifadesi ile kendisi ve kendisine en yakın komşu hücreler kastedilmektedir. Hücrenin herhangi bir zaman adımındaki değişkenlerinin değerleri özdeş bir kural

yardımla eş zamanlı olarak elde edilmektedir. Bir boyutlu “CA” larda bir hücrenin bir sonraki zaman adımında alacağı değeri belirleyen bölgesel kural, en yakın üç hücre değerinin fonksiyonu olarak tanımlanmaktadır. i . konumdaki bir hücrenin değeri a_i ile verilirse bu hücrenin yeni değerini veren kural

$$a_i' = \phi(a_{i-1}, a_i, a_{i+1}) \quad (3.9)$$

şeklinde ifade edilebilir. Bu ifadede ϕ kuralı açıklayan bir fonksiyondur. “Cellular automaton”lar bir çok temel özelliğe sahip olup, bu özellikler aşağıda sıralanmıştır.

Uzayda kesiklik: “CA”ın tanımlandığı uzay hücre veya gözler şeklinde kesikli bölgelerden oluşur.

Zamanda kesiklik: her bir hücreye ait değişken kesikli zaman basamaklarında yeni değer alır.

Durumlarda kesiklik: Her bir hücre değişkeninin alabileceği değerler sonlu sayıdadır.

Homojenlik: Bütün hücreler benzerdirler ve düzenli bir örgüde sıralanırlar.

Eş zamanlı yinelenme: Bütün hücrelerin değerleri aynı zamanda yenilenir. Her birinin değeri komşu hücrelerin bir önceki adımda sahip olduğu değere bağlıdır.

Deterministik kural: Her bir hücrenin değeri sabit belirleyici kurala göre yenilenir.

Uzay ile ilgili yerel kural: Her bir gözdeki kural sadece bu gözün etrafında bulunan komşuların değerlerine bağlıdır.

Zaman ile ilgili yerel kural: Bir gözün yeni değeri, kural daha önceki belli sayıda basamakta oluşan değerlere uygulanarak elde edilir.

Herhangi bir fiziksel sistem için cellular automaton ile bir model oluşturulurken ;

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

Ising modeli için iki farklı “CA” vardır. Bunlardan ilki Vichniac tarafından Q2R “CA”ı adı altında sunulmuştur[29] ve Pomeau ve Heermann tarafından geliştirilmiştir[31,32,49,83]. İkincisi Creutz tarafından ortaya atılmış olup “cellular automaton”ı adıyla bilinmektedir[25].

Fiziksel sistemlerin yanı sıra biyoloji, kimya ve sosyal bilimlerdeki bir çok problem bir “cellular automaton” olarak incelenebilmektedir. Biyolojide DNA’nın kopyasını yapan fonksiyonun bulunması, kalbin hızlı ya da yavaş çarpması, “filamentous” organizmalarının büyütülmesi “CA” ile modellenmiştir. Kimyada ise uzaysal diffüzyon ile çiftlenmiş reaksiyonların bir ağını içeren lineer olmayan kimyasal sistemler “CA” olarak modellenmiştir[28].

3.2 Ising Modeli Simülasyonlar İçin “Cellular Automaton”lar

3.2.1. Q2R “Cellular Automaton”ı

Q2R algoritmasında rasgele bir konfigürasyonla hesaba başlanır. Spin-spin etkileşme enerjisi (Ising enerji veya iç enerji) sistemin toplam enerjisine karşılık gelmektedir. Örgünün her bir hücresi, +1 ve -1 değerini alabilen bir spin ile işgal edilir. Her zaman basamağında, eğer değişecek spin aynı sayıda paralel ve paralel olmayan komşu spine sahipse işaretini değiştirir. Böylece ters dönen spin sistemin enerjisini değiştirmez. Simülasyonun bu tipi sabit enerjili mikrokronik kümeye uyar. Sabit sıcaklıklı kanonik kümeye uymaz. Bir kerede bütün spinler yenilenmez. Örgü iki alt örgüye

bölünür. Önce bir yarısı daha sonra diğer yarısı yenilenir. Bunun sebebi "Feedback Catastrophe" denilen durumu önlemek içindir[28]. Feedback Catastrophe olayında belli bir adımdan sonra hep aynı konfigürasyonlar türetilmekte ve bunun sonucu olarakta istenilen adım sayısı kadar gidilememektedir. Q2R automaton'ında hiçbir manyetik alan dikkate alınmaz. İç enerji bütün simülasyon süresince sabit kaldığından özısı enerji dalgalanmaları kullanılarak hesaplanamamaktadır[30,31].

3.2.2. Creutz "Cellular Automaton"ı

1986 yılında M. Creutz tarafından geliştirilen simülasyon yöntemi Metropolis ve arkadaşlarının algoritması ile molekül dinamiği arasına girmiştir[25]. Creutz Ising modelde iç enerji ile spine eşlik eden momentuma karşılık gelen kinetik enerjinin toplamı korunur. Böylece Creutz algoritması kullanılarak üretilen konfigürasyonlardan iç enerjiye bağlı termodinamik nicelikleri hesaplamak mümkün olmaktadır. Üstelik bu algoritma yaygın MC metodlarından on kat daha hızlı çalışmakta ve yüksek kalitede rastgele sayı üreticisine gereksinim duymamaktadır.

Creutz cellular automaton (CCA) algoritması kullanılarak dış manyetik alan yokluğunda iki ve üç boyutlu Ising modelde yapılan hesaplamalar algoritmanın $2 \leq d \leq 8$ boyutlu uzaylardaki Ising modellerinin simülasyonlarında oldukça başarılı olduğunu göstermiştir[17,19,34-50,74]. Bu algoritmanın ayrıntıları[33] verilmektedir. Bu algoritmadan türetilen çeşitli algoritmalar dış alan[26], ikinci derece en yakın komşu etkileşme ve dört spin etkileşim terimleri içeren Ising model problemlerine uygulanmış ve literatürle uyumlu sonuçlar elde edilmiştir[36,37].

Bu tez çalışmasında Creutz "cellular automaton"ında beş boyutlu Ising modelin simülasyonu yapılmaktadır. Her bir hücreye 5 ikili "bit" karşılık gelmektedir ve bir hücredeki değişkenlerin alacağı değer bir önceki zaman adımındaki kendi değeri ile ona en yakın komşularındaki değişkenlerin değerlerinden aşağıda verilen kurallara göre tayin edilmektedir. Beş ikili "bit"ten ilki B_i Ising spinidir. "0" veya "1" değerini alabilir. $S_i=2B_i-1$ olmak üzere sistemin Ising spin enerjisi H_i aşağıdaki gibi tanımlanır.

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

kalan 4 “bit”ten 3’ü “demon” veya spine eşlik eden momentuma karşılık gelmektedir. Bu üç “bit” (0,7) arasında değerler alabilen bir tam sayı oluşturmaktadır. Yerleşik “demon”a ait kinetik enerji bu tam sayı değerlerinin 4 katını almaktadır. Toplam enerji ise

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

olmak üzere tüm zaman adımlarında korunur. Verilen bir toplam enerji için sistemin sıcaklığı T, kinetik enerjinin ortalama değerinden elde edilir.

$$\langle E_D \rangle = \sum_{n=0}^7 n e^{-4n\beta} / \sum_{n=0}^7 e^{-4n\beta} . \quad (3.12)$$

Spinler ve spine eşlenik eden momentum değişkenleri için yineleme kuralları aşağıdaki gibidir; bir hücrenin yenilenmesi için spini ters çevrilir. Sistemin iç enerji değişimi hesaplanır. Toplam enerji H korunmak üzere, eğer sistemin iç enerjisindeki değişim bu hücreye ait momentum değişkenine verilebilecek veya ondan alınabilecek miktarda ise, o zaman bu spinin yönünde değişiklik yapılır ve buna uygun olarak da momentum değiştirilir. Aksi halde spinin yönü ve momentum değiştirilmez.

Başlangıçta en düşük iç enerjili (Ising enerji) durum taban durumu olarak tanımlanır ve başlangıç konfigürasyonu olarak alınır. Başlangıç durumunda sistemdeki bütün spinler aşağı veya yukarı yönde yönelir. İlk kinetik enerji hücrelerdeki momentum değişkenlerinin “bit” leri vasıtasıyla örgüye rastgele verilir. Toplam enerjideki sınırlama devam edeceğinden rastgele hareket, konfigürasyon uzayı boyunca devam eder. Demon (spine eşlenik eden momentum) denen yeni bir serbestlik derecesi tanımlanır. Bu yeni değişken , molekül dinamiğindeki, eşlenik momentumla taşınan kinetik enerjiye benzer. “Demon” enerjisinin hesabı yapılırken “bit” sayısı göz önünde bulundurulur. Çünkü “demon”un alacağı enerji değerleri “bit” sayısına göre değişmektedir[49].

3.3 Demon Enerjisinin Hesaplanması

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'un bit sayısı 2 ise E_D "demon" enerjisi (3.13) denkleminde hesaplanır.

$$E_D = 4 \times (D_2 \times 2^1 + D_1 \times 2^0) \quad (3.13)$$

Bilgisayarda ikili sayı sistemi kullanıldığı için D_1 , D_2 , 1 ve 0 değerlerini alabilir. 2 bitli demon'un olabileceği enerji düzeyleri Çizelge 3.1'de verilmiştir. Burada görüldüğü gibi 0, 1, 2, 3 olmak üzere dört enerji seviyesi vardır.

Çizelge 3.1. İki "bit"li "demon"ların alabileceği tam sayı değerleri.

D_2	D_1	E_D
0	0	0
0	1	1
1	0	2
1	1	3

Eğer "demon"un "bit" sayısı üç ise E_D demon enerjisi eşitlik 3.14 deki gibi ifade edilir.

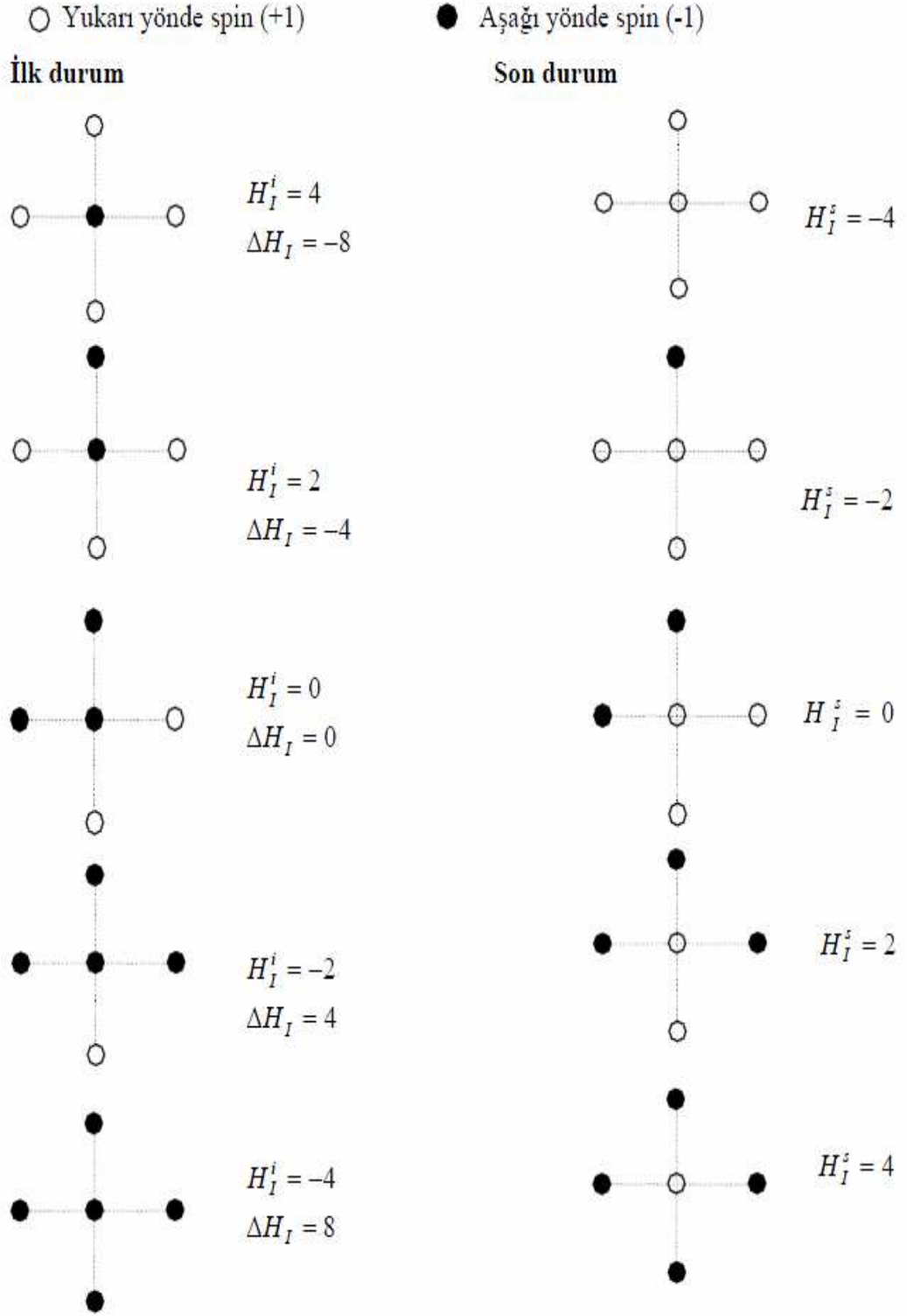
$$E_D = 4 \times (D_3 \times 2^2 + D_2 \times 2^1 + D_1 \times 2^0) \quad (3.14)$$

Çizelge 3.2. Üç “bit”li “demon”ların alabileceği tam sayı değerleri.

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

“Demon” “bit” sayısı üç olduğunda “demon” (0,7) arasında tam sayı değerleri almaktadır. “Demon” enerjisi bu tam sayının dört katıdır. Bir boyutlu uzayda bir spinin en yakın komşu sayısı iki, iki boyutlu uzayda dört, üç boyutlu uzayda altı, dört boyutlu uzayda sekiz ve beş boyutlu uzayda on olur. İki ve üç boyutlu uzayda bir spin ters çevrildiğinde Ising enerjisinde değişim meydana gelir. ΔH_I Ising enerji değişimi 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 alır. Benzer şekilde düşünülerek beş boyutlu uzayda ΔH_I 'in 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 $E_D=4(2^0 \times D_1 + 2^1 \times D_2 + 2^2 \times D_3)=4(1+2+4)=4(7)=28$ dir.

İki ve üç boyutlu uzayda bir spinin ters çevrilmesiyle meydana gelen enerji açık olarak Şekil 3.2 ve Şekil 3.3'te verilmektedir. Her durum için H_I Ising enerjisi (3.10) dan hesaplanmaktadır.



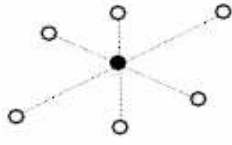
Şekil 3.3. Kare örgüde bir spin ters çevrildiğinde, ΔH_I Ising enerjisindeki değişimler.

○ Yukarı yönde spin (+1)

● Aşağı yönde spin (-1)

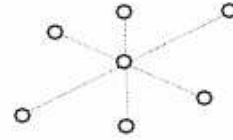
İlk durum

Son durum

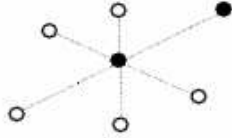


$$H_I^i = 6$$

$$\Delta H_I = -12$$

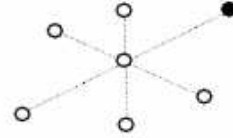


$$H_I^s = -6$$

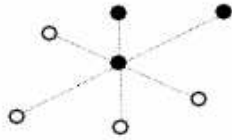


$$H_I^i = 4$$

$$\Delta H_I = -8$$

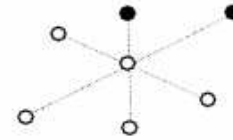


$$H_I^s = -4$$

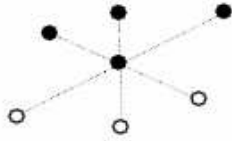


$$H_I^i = 2$$

$$\Delta H_I = -4$$

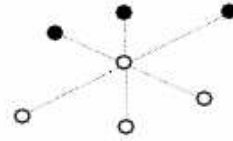


$$H_I^s = -2$$

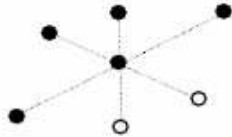


$$H_I^i = 0$$

$$\Delta H_I = 0$$

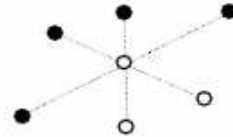


$$H_I^s = 0$$

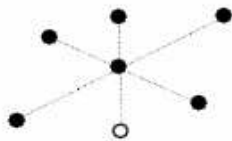


$$H_I^i = -2$$

$$\Delta H_I = 4$$

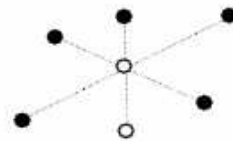


$$H_I^s = 2$$

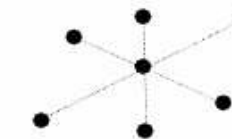


$$H_I^i = -4$$

$$\Delta H_I = 8$$

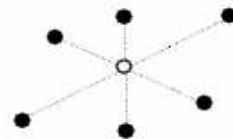


$$H_I^s = 4$$



$$H_I^i = -6$$

$$\Delta H_I = 12$$



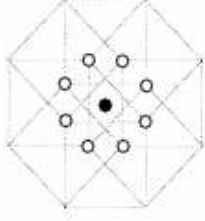
$$H_I^s = 6$$

Şekil 3.4. Basit kübik örgüde bir spin ters çevrildiğinde, ΔH_I Ising enerjisindeki değişimler.

○ Yukarı yönde spin (+1)

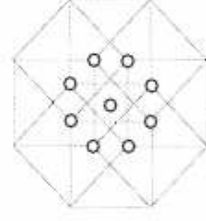
● Aşağı yönde spin (-1)

İlk durum

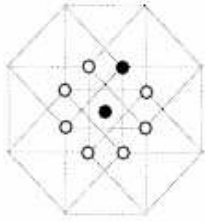


$$H_I^i = 8$$
$$\Delta H_I = -16$$

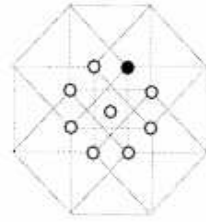
Son durum



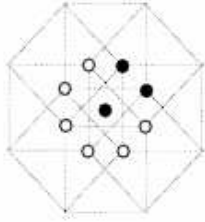
$$H_I^s = -8$$



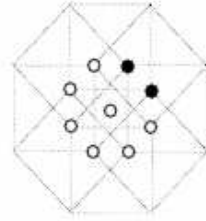
$$H_I^i = 6$$
$$\Delta H_I = -12$$



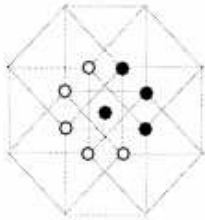
$$H_I^s = -6$$



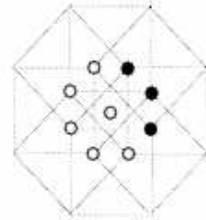
$$H_I^i = 4$$
$$\Delta H_I = -8$$



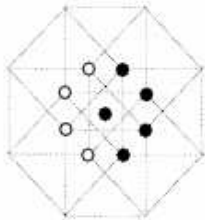
$$H_I^s = -4$$



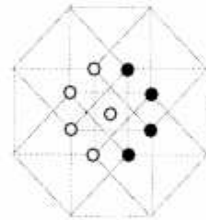
$$H_I^i = 2$$
$$\Delta H_I = -4$$



$$H_I^s = -2$$



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

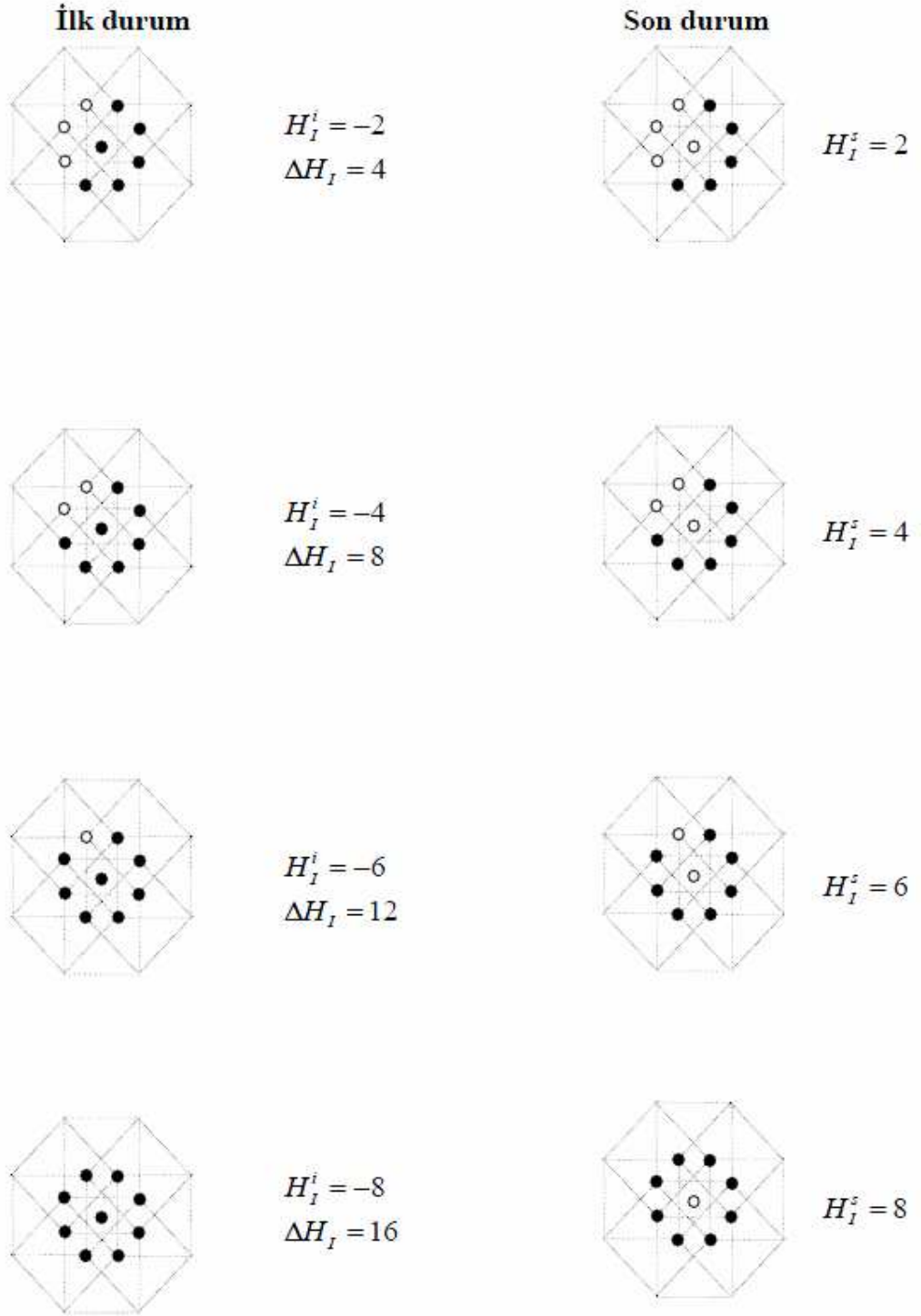


$$H_I^s = -0$$

Şekil 3.5. Soyut küp örgüde bir spin ters çevrildiğinde, ΔH_I , Ising enerjisindeki değişimler.

○ Yukarı yönde spin (+1)

● Aşağı yönde spin (-1)



Şekil 3.5. (Devam) Soyut küp örgüde bir spin ters çevrildiğinde, ΔH_I , Ising enerjisindeki değişimler.

3.4. Creutz "Cellular Automaton"ında Termodinamik Niceliklerin Hesabı

Standart istatistiksel mekanik tartışmalar ve simülasyon sonuçları “demon” enerjisinin $P(E_D) \propto \exp(-\beta E_D)$ dağılımına sahip olduğunu yani Boltzmann dağılımına uyduğunu göstermektedir. Bu özellikten yararlanarak β 'nın değeri, dolayısıyla sistemin sıcaklığı $T=1/\beta$ 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.

$$\langle E_D \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{31} 4ne^{-4n\beta}}{\sum_{n=0}^{31} e^{-4n\beta}} . \quad (3.15)$$

Burada her bir zaman adımı için örgünün bütün gözlerindeki kinetik enerji (H_K)'ler için toplanıp toplam spin sayısına bölüldüğü 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.

$$M = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i \quad (3.16)$$

$$H_I = \frac{1}{2N} \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad (3.17)$$

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} = L^d \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{kT} \quad (3.18)$$

$$\frac{C}{k} = \frac{\partial H_I}{\partial T} = L^d \frac{\langle H_I^2 \rangle - \langle H_I \rangle^2}{(kT)^2}. \quad (3.19)$$

Eşitliklerde $N=L^d$ örgüdeki hücre sayısıdır ve $\langle \rangle$ 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.

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

Eşitlik 3.20 ile verilen (burada s spin başına manyetizasyonu ifade etmektedir) Binder parametresinin sıcaklıkla değişim grafiği çizilebilir. Bu grafikteki eğrilerin kesişim noktası, $L \rightarrow \infty$ iken T_c sıcaklığına karşılık gelir[59].

4. SONLU ÖRGÜ ÖLÇEKLEME

4.1 $d < 4$ İçin Sonlu Örgü Ölçekleme

Fiziksel sistemlerin kritik davranışlarını taklit etmek amacıyla yapılan hesaplamalar sonlu örgüler üzerinde gerçekleştirilebilmektedir. Bu nedenle sonlu örgülerdeki hesaplamalardan sonsuz örgü davranışını tahmin edebilmek için sonlu örgü ölçekleme teorisi geliştirilmiştir. Sonlu örgü ölçekleme teorisi, tanecik sayısı N sonlu olduğu sürece, çok büyük olsa bile bir sistem için hiçbir faz geçişi olmamasına rağmen, tanecik sayısı N sonsuz alındığında faz geçişinin nasıl gerçekleştiğini tanımlar. Sonlu örgü ölçekleme bağıntıları; sistemin kritik nokta yakınlarında olması ve tüm uzunlukların, sisteme ait karakteristik uzunluk olan, korelasyon uzunluğu (ξ) cinsinden ifade edilmesi gibi kabullerden elde edilmektedir. Bu yüzden ölçekleme teorisi uzunluk ölçeğinin değişimine bağlı olarak termodinamik niceliklerde görülen değişimlerle ilgilidir. Boyutlu bir niceliğin değeri standart bir birim uzunluğa bağlı olarak değişir[58-62].

Bu olaylar sonlu örgü için termodinamik niceliklerin grafikleri incelendiğinde açıkça görülmektedir. Sonlu sistemdeki faz geçiş bölgelerinde fonksiyonlar hem yuvarlaklaşmış hem de faz geçişi sıcaklıkları T_c^L sonsuz örgünününe göre T_c kaymıştır. Bu kayma ve yuvarlaklaşma bölgesini belirleyen sıcaklık aralığı tanecik sayısı N sonsuza yaklaşırken sıfıra doğru küçülür. Bu sorunlara cevap Fisher'in sonlu boyut ölçekleme teorisiyle verilmektedir. Kritik nokta yakınlarında sadece tek bir önemli karakteristik uzunluk vardır. Bu uzunluğa düzen parametre dalgalanmalarının korelasyon uzunluğu, ξ , denmektedir. Sonlu boyut etkisinin anlaşılması, bu uzunluk karşılaştırmasıyla mümkün olmaktadır. Bu örgünün doğrusal boyutu L ve korelasyon uzunluğu ξ dir.

Kritik nokta yakınlarında termodinamik büyüklüklerin sonsuza gittiği bilinmektedir. Örneğin öz ısısı $C(t, H; L)$ sistemin boyutu sonsuz olduğunda aşağıdaki gibi verilir[57].

$$C_S(t, 0; \infty) \approx (A_{\pm} / a) |t|^{-a}. \quad (4.1)$$

Bu ifadede s , singüler kısmın incelendiğini göstermektedir. Sıfırdan farklı bir dış alan varlığında standart ölçekleme ifadesi aşağıdaki gibidir.

$$C_s(t, H; \infty) \approx |t|^{-\alpha} C_{\pm}(H|t|^{-\Delta}) \quad (4.2)$$

bura da C_{\pm} ölçekleme fonksiyonudur. Bura da + ve - sırayla $t > 0$ ve $t < 0$ durumunu gösterir ve \approx işareti ölçeklemeye ilişkin ihmal edilmiş düzeltmeleri göstermektedir. α ve $\Delta = \beta + \gamma$ evrensel üslerdir. Sonlu sistemler için sistemin doğrusal boyutu L , sonsuz sistemin kolerasyon uzunluğu $\xi(t, H; \infty)$ ile ölçeklenir. Daha açıkça belirtmek gerekirse $L \gg \xi$ ise önemli sonlu boyut kolerasyonları kesmekte ve böylece kritik nokta ıraksamalarında dikkate değer bir eğilme ve yuvarlaklaşma meydana gelmektedir. Sonsuz örgünün kolerasyon uzunluğu eşitlik 4.2'ye benzer olarak ölçeklenir.

$$\zeta(t, H; \infty) \approx |t|^{-\nu} \in_{\pm}(H|t|^{-\Delta}). \quad (4.3)$$

Sonlu örgü ölçekleme teorisi periyodik sınır şartlı, L doğrusal boyutlu ve L/ξ kolerasyon uzunluğunun relatif boyutuna göre sonlu olan sistemin, sonsuz özelliklerini tanımlar. T_c yakınında $\xi \sim (T - T_c)^{-\nu}$ ile orantılıdır. Böylece $(T - T_c)^{-\nu} \approx L$ olduğunda sonlu boyut etkisi gözlenir. Sonlu örgü ölçekleme ifadesi doğal olarak $L/t^{-\nu}$ dir. Böylece

$$C_s(t, H; L) \approx |t|^{-\alpha} C_{\pm}(H|t|^{-\Delta}; L|t|^{\nu}) \quad (4.4)$$

$$\zeta(t, H; L) \approx |t|^{-\nu} \in_{\pm}(H|t|^{-\Delta}; L|t|^{\nu}) \quad (4.5)$$

bağıntıları elde edilir. Eşitlik 4.4 ve eşitlik 4.5 birçok faydalı bağıntının tahmin edilmesine imkan verir. Eşitlik 4.4 ve eşitlik 4.5 bağıntılarının yerine kritik bölge yakınında sistemin evrensel davranışı hakkında daha fazla bilgi veren değişik idelerini elde etmek mümkündür. Bu ifadeler aşağıda belirtilen dört basamakta elde edilmektedir. İlk olarak, t ölçekli bağıntılar yerine L ölçekli bağıntılar kullanılır[49].

t ve H, $tL^{1/\nu}$ ve $HL^{\Delta/\nu}$ ifadelerine doğrusal olarak girerken, analitik kuvvetlerle giren L'ye sahip ölçekleme fonksiyonları yeniden tanımlanır. İkinci olarak, sonlu doğrusal boyutlu sistemler için t, H=0'da hiçbir ıraksamanın olmadığına dikkat etmek gerekir. Böylece ölçekleme fonksiyonu, $tL^{1/\nu}$, $HL^{\Delta/\nu}=0$ 'da düzgün ve analitik olacaktır. Üçüncü basamak olarak $atL^{1/\nu}$ ve $bHL^{\Delta/\nu}$ ölçekleme ifadelerini kullanarak t ve H için evrensel olmayan metrik faktörlere izin verilmiş olur. O zaman ölçekleme fonksiyonu evrensel olacaktır. Son olarak, öz ısısı yerine $k_B T$ başına ölçülen serbest enerji yoğunluğu f kullanılmaktadır. Çünkü çeşitli termodinamik büyüklükler serbest enerjinin türevlerinden elde edilmektedir. Yukarıdaki tanımları gerçekleştirdikten sonra ve “hyperscaling” bağıntısını da, $2-\alpha=d\nu$, kullanarak serbest enerjinin “singüler” kısmı için,

$$f_s(t,H;L) \approx L^{-d} Y(atL^{1/\nu}, bHL^{\Delta/\nu}) \quad (4.6)$$

kolerasyon uzunluğu içinde,

$$\xi(t,H;L) \approx LX(atL^{1/\nu}, bHL^{\Delta/\nu}) \quad (4.7)$$

elde edilir. Bu iki bağıntı kritik noktadaki evrensel davranışı türetmeye en uygun yapıya sahiptir. Bunlardan elde edilen iki evrensel büyüklüğü içeren bağıntılar şunlardır.

$$f_s(0,0;L) \approx Y(0,0)L^{-d} \quad (4.8)$$

$$\xi(0,0;L) \approx X(0,0)L. \quad (4.9)$$

Bu sonlu örgü ölçekleme bağıntıları $d < 4$ için geçerlidir. Beş boyutlu Ising modeli için bazı düzeltmeler gerekir. Bu düzeltmeler Binder tarafından yapılmıştır. Beş boyutlu Ising modeli için geçerli olan sonlu örgü ölçekleme bağıntısı aşağıdaki bölümlerde verilmektedir[84].

4.2. Sonlu Örgü Ölçeklemede Evrensel Kritik Büyüklükler

Kritik üslerin ve bazı kritik büyüklük oranlarının evrenselliği kritik olayın modern teorisinde temel bir kavramdır. Örneğin basit bir mıknatısın indirgenmiş “bulk” serbest enerji yoğunluğunun “ıraksayan” kısmı için

$$f_{\infty}^{(s)} \equiv F^{(s)} / V k_B T \approx A_1 |t|^{2-a} W_{\pm}(A_2 h |t|^{-\Delta}), t \equiv (T - T_c) / T_c \rightarrow 0 \quad \text{ve}$$
$$h = H / k_B T \rightarrow 0 \quad (4.10)$$

yazılabilir. Burada + ve -, $t < 0$ ve $t > 0$ 'a karşılık gelmektedir. Verilen evrensellik sınıfı içerisinde a , $\Delta \equiv \beta + \gamma$ üsleri ve W ölçekleme fonksiyonları bütün sistemler için aynıdır. Evrensellik sınıfı içinde örgü yapısı, eşleşme sabiti, vb. farklı olabilir, ama tüm bu farklılıklar A_1 ve A_2 evrensel olmayan metrik faktörlerinin değerlerini de içermektedir. Basit olması açısından periyodik sınır şartlı, $L \times L \times L \times L \times \dots \times L = L^d$ boyutlu küpler ve $L^{d-1} \times \infty$ boyutlu silindirler göz önüne alınmaktadır. Böylece uygun asimtotik sonlu örgü ölçekleme bağıntısı oldukça genel olarak aşağıdaki gibi yazılabilir;

$$f^{(s)} \approx L^{-d} Y(C_1 t L^{\Delta/v}, C_2 h L^{\Delta/v}) . \quad (4.11)$$

Üst kritik boyut $d=4$ 'den daha küçük boyutlar için sadece C_1 ve C_2 metrik faktörlerinin, sistemin özelliklerine bağlı parametrelerin girdiği evrensel olmayan faktörler olduğu gösterilmektedir. Başka bir deyişle $Y(x,y)$ ölçekleme fonksiyonu küp ve silindir için evrenseldir. Ancak $Y(x,y)$ 'nin önünde çarpan şeklinde daha başka evrensel olmayan bir C_0 metrik faktörüne gerek yoktur.

4.3. Serbest Enerji İçin Sonlu Örgü Ölçekleme

Basit mıknatıslardaki gibi sıradan sürekli geçişler için iki alakalı ölçekleme alanı vardır. Bunlar sıcaklığa benzeyen g_t ve dış manyetik alana benzeyen g_h olup, üs değerleri de $\lambda_t = 1/v$ ve $\lambda_h = \Delta/v$ 'dir. Kritikliğe yaklaşılrken g_t ve g_h 'nin doğrusal olmama özelliğinden ve alakasız ölçekleme alanlarından kaynaklanan ölçeklemeye

ilişkin düzeltmeler ihmal edilirse, $g_t \approx C_1 t$ ve $g_h \approx C_2 h$ olur. Burada C_1 ve C_2 sistemin özelliklerine bağlı parametreler, t ve h 'da indirgenmiş sıcaklık ve indirgenmiş manyetik alandır. Böylece $b \gg l$ uzaysal ölçekleme faktörüyle yapılan asimtotik “bulk” renormalizasyon dönüşümü aşağıdaki gibi olur.

$$f_{\infty}^{(s)}(t, h) \approx b^{-d} \bar{f}_{\infty}^{(s)}(c_1 t b^{1/\nu}, c_2 h b^{\Delta/\nu}; 0, 0, \dots) \quad (4.12)$$

dir. $\bar{f}_{\infty}(g_t, g_h; 0, 0, \dots)$ ifadesi tüm alakasız(irrelevant) değişkenlerin eşit olduğu G (Ginzburg-Landau-Wilson) modelinin serbest enerjisini verir. Burada herhangi bir “marjinal” ya da tehlikeli(dangerous) alakasız(irrelevant) değişkenlerin oluşumu açıkça dahil edilmemiştir. Böylece sonuçlar $d < 4$ ile sınırlı kalmıştır. Çünkü sadece bu uzay boyutlarında alakasız(irrelevant) değişkenlerin tehlikeli(dangerous) olmadığı düşünülmektedir.

Periyodik sınır şartlı sonlu sistemler için alanlar teorisine dayanan hesaplamalar üzerine tartışmalar Brezin tarafından yapılmıştır. Sonlu bir sistemin enerjisinin “singüler” kısmının asimtotik davranışı aşağıdaki formülle verilmektedir.

$$f_{\infty}^{(s)}(t, h; L) \approx b^{-d} \bar{f}^{(s)}(c_1 t b^{1/\nu}, c_2 h b^{\Delta/\nu}; 0, 0, \dots; L/b). \quad (4.13)$$

$\bar{f}^{(s)}$, nin L 'ye bağımlılığı, momentum değişkeni üzerinde uygun kızıl ötesi (infrared) kesilmesi meydana getirir[49]. $b=L/l_0$ referans uzunluğu olarak seçilmelidir. l_0 ; sisteme bağımlı $l_0 \gg \alpha_0$ şartını sağlayan keyfi bir sabittir. $L \gg l_0$ için

$$L^d f^{(s)}(t, h; L) \approx l_0^d \bar{f}^{(s)}(c_1 t L^{1/\nu} l_0^{-1/\nu}, c_2 h L^{\Delta/\nu} l_0^{-\Delta/\nu}; 0, 0, \dots; l_0) \quad (4.14)$$

bağıntısı elde edilir. İfadenin sol tarafı $L \gg \alpha_0$ için l_0 ' ın seçimine bağlı olmayabilir. Böylece bu ifade sadece $c_1 t L^{1/\nu}$, $c_2 h L^{\Delta/\nu}$, lerin evrensel fonksiyonu olmalıdır. Böylece C_1/c_1 ve C_2/c_2 evrensel sabitli denklem 4.11 iddiası elde edilir[49]. Benzer biçimde, B sistemden bağımsız bir orantı sabiti olmak üzere $b = B|c_1 t|^{-\nu}$ seçmekle, denklem

(4.12)'den $A_1/c_1|^{2-a}$ ve $A_2/c_2|c_1|^{-\Delta}$ evrensel sabiti denklem (4.10)'dan elde edilir. Bu iki termodinamik metrik faktör ile C_1 ve C_2 sonlu örgü metrik faktörleri, sadece c_1 ve c_2 sistem parametrelerine bağlıdır. Böylece “iki ölçek faktörlü evrensellik” hipotezi veya “hyperuniversality” hipotezi adı verilen sonlu örgü formülü elde edilir.

4.4. $d>4$ İçin Sonlu Örgü Ölçekleme

Renormalizasyon grup teorisine(RG) dayanılarak türetilen sonlu örgü ölçekleme, serbest enerjinin “singüler” kısmı ve kolerasyon uzunluğu aşağıdaki formüllerle verilmektedir[59].

$$f_L = L^{-d} f(tL^{Y_T}, hL^{Y_H}, uL^{Y_U}) \quad (4.15)$$

$$\xi_L = L\xi(tL^{Y_T}, hL^{Y_H}, uL^{Y_U}) \quad (4.16)$$

burada $t = (T-T_c)/T_c$ indirgenmiş sıcaklıktır. $y_T > 0$, $y_H > 0$, ve $y_U < 0$ Renormalizasyon Grup üsleri, h dış manyetik alan, u 'da alakasız(irrelevant) değişkendir. Eşitlik işareti burada asimtotik ölçekleme bağıntılarını göstermek için kullanılmaktadır. Eğer serbest enerji ölçekleme fonksiyonu $f(x,y,z), z \rightarrow 0$ iken “singüler” ise, o zaman u tehlikeli(dangerous) alakasız(irrelevant) değişken olarak adlandırılır. Kolaylık olması bakımından $\xi(x,y,z)$ kolerasyon ölçekleme fonksiyonunun bu sınır durumunda ($z \rightarrow 0$) düzenli olduğu varsayılmıştır. Ancak daha sonra singüler olma ihtimali göz önüne alınmaktadır. Küçük z değerleri için

$$f(x,y,z) = z^{P_1} \bar{f}(xz^{P_2}, yz^{P_3}) \quad (4.17)$$

alınabilir. Serbest enerji yoğunluğu f 'nin bu şekilde seçimi; $d > d_c = 4$ boyutunda “bulk” ölçeklemesi için bilinen mekanizma ile desteklenmektedir.

$$f_L = L^{-d^*} F(tL^{Y_T^*}, hL^{Y_H^*}) \quad (4.18)$$

Eşitlik 4.18 metrik faktörler t ve h 'ı içermekte olup $d^* = d - P_1 y_U$, $y_T^* = y_T + P_2 y_U$ ve $y_H^* = y_H + P_3 y_U$ etkin üslerdir. Fisher üssü

$$w^* = d - d^* / (y_T^* v). \quad (4.19)$$

Monte Carlo simülasyonlarında kullanıldığı gibi kübik veya benzer sistemler için $d = d^*$ olduğu gösterilmektedir. $L \rightarrow \infty$ iken f_L 'nin f_∞ serbest enerjisine uygunluğunun var olması $x \rightarrow \pm\infty$ ve $y|x|^{-\Delta}$ için sabit olduğu işaret edilir.

$$F(X, Y) = |x|^{d^*/y_T^*} Y_\pm (y|x|^{-\Delta}) \quad (4.20)$$

bu ifadede $\Delta = y_H^* / y_T^*$, ve Y_\pm ölçekleme fonksiyonudur. “Bulk” kolerasyon uzunluğunun varlığındaki gibi bu sınırdaki asimtotik formüle götürür.

$$\xi(x, y, 0) = |x|^{-v} X_\pm (y|x|^{-\Delta}) \quad (4.21)$$

burada

$$v = 1/y_T \text{ ve } \Delta^* = y_H/y_T \quad (4.22)$$

dır. Burada eşitlik 4.16'daki ξ ölçekleme fonksiyonunun $z \rightarrow 0$ iken singüler olmadığı varsayılmıştır. Serbest enerjinin uygun türevleri alınarak aşağıdaki ölçekleme bağıntıları elde edilebilir.

$$a = 2 - d^* / y_T^*, \beta = d^* / y_T^* - \Delta, \text{ ve } \gamma = 2\Delta - d^* / y_T^* \quad (4.23)$$

burada α , β ve γ sırasıyla öz ısı, manyetizasyon ve manyetik alınganlık için kritik üslerdir. Sonuç olarak y_T^* ve y_H^* aşağıdaki gibi verilmektedir.

$$y_T^* = \frac{1}{v^*} = d^* / (\gamma + 2\beta) \quad (4.24)$$

$$y_H^* = \frac{\Delta}{v^*} = d^* (\gamma + \beta) / (\gamma + 2\beta) . \quad (4.25)$$

y_T^* ve Δ^* kolerasyon uzunluğunun ölçekleme formüllerinde görünen $y_T = l/v$ ve $\Delta^* = y_H / y_T$ kritik üslerinden farklı ise “hyperscaling”de bozulma oluşur. Ancak bu durumda bile $d=d^*$ alınmalıdır. Aşağıda $d=d^*$ olduğunu destekleyen üç tartışma verilmektedir. İlk olarak sonlu örgü boyutlu örgüde manyetizasyon ve manyetik alınganlık göz önüne alınmaktadır.

$$m_L = \langle s \rangle_L \quad (4.26)$$

$$X_L = L^d (\langle s \rangle_L - \langle s \rangle_L^2) \quad (4.27)$$

burada $s = (1/L^d) \sum s_i$ ve s_2 i'inci hücreye ait spindir. Eşitlik 4.18'e göre manyetizasyon m_L ve manyetik alınganlık χ_L aşağıdaki ölçekleme formüllerine sahiptir.

$$m_L = \frac{\partial f_L}{\partial h} = L^{Y_H^* - d} V(tL^{Y_T^*}, hL^{Y_H^*}) \quad (4.28)$$

$$\chi_L = \frac{\partial^2 f_L}{\partial h^2} = L^{2Y_H^* - d} W(tL^{Y_T^*}, hL^{Y_H^*}) \quad (4.29)$$

buradaki V ve W ölçekleme fonksiyonları, F 'den türetilmiştir. Manyetik alınganlık kadar manyetizasyona “bulk” manyetizasyon için kritik sıcaklık ($T < T_c$) altında $L \rightarrow \infty$ $h \rightarrow \pm 0$ sınırında özel dikkat verilmelidir. İlk önce $L \rightarrow \infty$ iken sonra da $h \rightarrow \pm 0$ iken limit alındıktan sonra genel “bulk” değerleri elde edilir.

$$T \rightarrow T_c^- \text{ ye giderken } m_b = |t|^\beta \text{ ve } \chi_b = |t|^{-\gamma} \quad (4.30)$$

dir. Eşitlik 4.27 ile

$$\langle s^2 \rangle_L = m_b^2 + L^{-d} \chi_b \quad (t < 0, L \rightarrow \infty) \quad (4.31)$$

elde edilir. Eğer ilk önce $h=0$ alıp daha sonra $L \rightarrow \infty$ iken limit alınır ise $\langle s^2 \rangle_L = 0$ olur ve

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \left[\langle s^2 \rangle_{L,h=0} \right] = m_b^2 \quad (4.32)$$

elde edilir. Ancak eşitlik 4.31 bu limitte de uygulanabilir. Eşitlik 4.27 ve eşitlik 4.28 sıfır alanlı manyetik alınganlığın eşitlik 4.33'e göre davranmasını gerektirir.

$$\chi_L \propto L^d |t|^{2\beta} \quad T \rightarrow T_c^- \quad (4.33)$$

Eşitlik 4.29'dan bu ölçekleme formülünü elde etmek için

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} W(x,0) \propto |x|^{2\beta} \quad (4.34)$$

$$d^* = 2(y_H^* + \beta y_T^*) - d \quad (4.35)$$

Eşitlik 4.35'e eşitlik 4.24, eşitlik 4.25'deki ifadeleri koymakla, eşitlik 4.17' de $p_1=0$ sonucuna götüren 4.36 eşitliği elde edilir.

$$d^* = d. \quad (4.36)$$

İkinci olarak kritik sıcaklığın altında ($T < T_c$) sonlu boyutlu manyetizasyon m_L

$$m_L = m_b \tanh(m_b h L^d) \quad (4.37)$$

ifadesine sahiptir. ξ_b “bulk” kolerasyon uzunluğu ve m_b “bulk” manyetizasyonu olmak üzere, $L \gg \xi_b$ ve $|h| \ll (m_b \xi_b)^{-1} L^{1-d}$ için χ_L nin ifadesi

$$\chi_L = L^d m_b^2 \cosh^{-2}(m_b h L^d) \quad (4.38)$$

olur. $T \rightarrow T_c^-$ ve $h=0$ için χ_L denklem 4.33’e indirgenir ve böylece $d^* = d$ elde edilir.

Son olarak, kritik sıcaklığın altında ($T < T_c$) manyetizasyonun sıfır alanlı ihtimaliyet dağılımı $P_L(s)$ ’nin sonlu örgü ölçekleme özellikleri göz önüne alınmaktadır. $P_L(s)$ ’nin L ve $\pm m_b$ için yaklaşık olarak denklem 4.39’daki gibi yazılabileceği gösterilmiştir.

$$P_L(s) = \frac{L^{d/2}}{2(2\pi\delta\chi_b)1/2} (e^{-(s-m_b)^2 L^d / 2\chi_b} + e^{-(s+m_b)^2 L^d / 2\chi_b}). \quad (4.39)$$

Üstel fonksiyonun argümanları aşağıdaki gibidir.

$$(s|t|^{-\beta} + a)^2 \frac{(|t|L^{y_T^*})^{\gamma-2\beta}}{2b} \quad (4.40)$$

$P_L(s)$ de $|t|L^{y_T^*}$ ölçekleme ifadelerinin oluşumunu gösterir. Burada $y_T^* = d^*(\gamma + 2\beta)$ dır. Benzer olarak bir dış manyetik alanın varlığında üstel fonksiyonların argümanları $(s \pm m_b - \chi_b h)^2 L^d / 2\chi_b$ olur. h ’nin birinci kuvvetini içeren (linear) terim $(b|t|L^{d/(\gamma+2\beta)})^{-(\gamma+\beta)} h L^{y_H^*}$ ’dir. Bu ölçekleme değişkeni $P_L(s)$ ’nin $L^{y_H^*}$ ’ya bağımlılığını göstermektedir. Burada $y_H^* = d^*(\gamma + \beta) / \gamma + 2\beta$ ’dır. Bu ifadeler ancak $d^* = d$ olduğunda y_T^* ve y_H^* denklem 4.24 ve denklem 4.25’te verilen ifadelere eşit olurlar.

Başka hiçbir ölçekleme değişkeninin olmadığı düşünülürse, Denklem 4.18 ölçekleme formülünde $d^* = d$ olması gerektiği anlaşılır.

Renormalize edilmiş eşleşme sabiti(Binder parametresi) Binder tarafından aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır[59].

$$g_1 = \frac{\langle s^4 \rangle_L}{\langle s^2 \rangle_L} - 3 = \left[\frac{\chi_L^{(4)}}{L^d \chi_L^2} \right]_{h=0} \quad (4.41)$$

burada χ_L eşitlik 4.29'da verilen ifade olup, dördüncü türev $\chi_L^{(4)}$ ise aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır.

$$\chi_L^{(4)} = \frac{\partial^4 f_L}{\partial h^4} = L^{4Y_h^* - d} W^{(4)}(tL^{Y_T^*}) \quad (4.42)$$

eşitlik 4.41'de $h=0$ alınarak eşitlik 4.29 ve eşitlik 4.42 yerine konursa

$$g_L = L^{d^* - d} G(tL^{Y_T^*}), L \rightarrow \infty \quad (4.43)$$

elde edilir. Burada G ölçekleme fonksiyonudur. $d^* = d$ olduğunda g_L genel olarak $T=T_c$ 'de sıfırdan farklı bir sabittir. Burada "hyperscaling" bozulduğunda dahi $d^* = d$ olduğu gösterilmiştir. Eşitlik 4.17'ye benzeterek

$$\xi(x, y, z) = z^{q_1} \bar{\xi}(xz^{q_2}, yz^{q_3}) \quad (4.44)$$

$$\xi_L \approx L^{1+q_1 y_U} Z(tL^{y_T^*}, hL^{y_H^*}) \quad (4.45)$$

elde edilir. Burada $y_T^* = y_T + q_2 y_U$ ve $y_H^* = y_H + q_3 y_U$ 'dir. $x \rightarrow \pm\infty$ limitinde ve $y|t|^{-\Delta^*}$ değişmemek kaydıyla aşağıdaki ifade yazılır.

$$Z(x,y) \rightarrow |x|^{-\nu} \tilde{Z}_{\pm}(y|x|^{-\Delta^{**}}). \quad (4.46)$$

Burada $\nu = (1 + q_1 y_U) / y_T^{**}$ ve $\Delta^{**} = y_H^{**} / y_T^{**}$ 'dir. Sonlu örgü kolerasyon uzunluğu ξ_L , L ile sınırlandırılmış olduğundan $q_1 y_U \leq 0$ olması gerekir. $t=h=0$ olduğu kabul edilse bile, kolerasyon uzunluğu örgünün doğrusal boyut değerine kadar artar. Bu durum $q_1=0$ ve $\nu = 1 / y_T^{**}$ olduğunu gösterir. y_T^{**} 'in y_T 'ye eşit olması gerekmez. Bu da "hyperscaling" bozulması için muhtemel yeni bir kaynak oluşturur. Yukarıda yapılan tahminler, indirgenmiş sıcaklık, kaymış bir t_L sıcaklığıyla

$$t_L = [T - T_c(L)] / T_c \quad (4.47)$$

yer değiştirirse de termodinamik limitte değişmezler. $T_c(L)$ doğrusal boyutu L olan örgünün kritik sıcaklığıdır ve manyetizasyonun iki tepeli (pikli) bir yapı geliştirmeye başladığı sıcaklık olarak tanımlanır. Buna göre aşağıdaki gibi bir Ψ kayma üssü

$$[T_c(L) - T_c] / T_c = AL^{-1/\Psi} \quad (4.48)$$

tanımlanabilir. Bu ifadede A bir sabittir. Burada periyodik sınır şartlı bir örgü için ve $d > 4$ için $\Psi = \nu^* = 1 / y_T^*$ [59].

4.5. Düzen Parametresi İhtimaliyet Dağılımı İçin Sonlu Örgü Ölçekleme Bağıntısı

Ising modelinde düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı için sonlu örgü ölçekleme hipotezi, dış manyetik alan yok iken, genel olarak şöyle ifade edilebilir[85-88];

$$P_L(M, t) = a(L) p(Ma(L), TB(L)), t \rightarrow 0, L \rightarrow \infty \quad (4.49)$$

bu ifadede M düzen parametresi, $t = (T - T_c) / T_c$ 'de, T_c sonsuz örgünün kritik sıcaklığı olmak üzere, indirgenmiş sıcaklıktır. a(L) ve b(L)'nin L 'ye bağımlılığı,

$|M_L(t)|$ için sonlu örgü ölçekleme bağıntısı ve aşağıda verilen tanım kullanılarak bulunabilir.

$$|M_L(t)| = \int_{-\infty}^{\infty} P_L(M, t) |M| dM \quad (4.50)$$

$|M_L(t)|$ için sonlu örgü ölçekleme bağıntıları $d < 4$, $d = 4$ ve $d > 4$ 'de birbirinden farklıdır. $d > 4$ 'de sonlu örgü ölçekleme bağıntısı aşağıda verilmektedir[89,90].

$$f_L^{(S)}(t, h) = L^{-d} Y(C_1 t L^{d/2}, C_2 h L^{3d/4}), \quad t \rightarrow 0, h \rightarrow 0, L \rightarrow \infty. \quad (4.51)$$

Düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı için türetilen sonlu örgü ölçekleme bağıntısı aşağıda verilmektedir[47].

$$P_L(M, t) = C_2^{-1} L^{d/4} p(M C_2^{-1} L^{d/4}, t C_1 L^{d/2}), \quad t \rightarrow 0, L \rightarrow \infty \quad (4.52)$$

Bu, düzen parametresi dağılımı için sonlu örgü ölçekleme fonksiyonunun, $p(m, x)$, analitik olarak bilindiği durum olup, $p(m, x)$ ortalama alana uygun yapıdadır[87,88].

4.6. Düzen Parametresi Olasılık Dağılımı Sonlu Örgü Ölçekleme Fonksiyonunun Kritik Noktadaki Analitik İfadesi

$d=4$ 'de sonlu örgü ölçekleme fonksiyonunun ardışık normalleştirilmesinin kullanıldığı ortalama alan seviyesinde kritik noktadaki analitik ifadesi aşağıda verilmektedir [59,71,72,74];

$$p(m, 0) = p_0 \exp(-(Am^2 + Bm^4)). \quad (4.53)$$

Eşitlik 4.53 ortalama alana uygun yapıdadır. p_0 , A ve B birer sabit olup, analitik fonksiyon karşılığı olan sayısal fonksiyona uydurularak değerleri belirlenebilir[87]. Sayısal fonksiyon ise doğrusal boyutu yeterince büyük örgülerdeki simülasyonlar ve

düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı için sonlu örgü ölçekleme bağıntısı kullanılarak elde edilebilir. Gerekli düzeltmeler yapılırsa sonlu örgü ölçekleme fonksiyonu, aşağıdaki şekli alır[47,74].

$$p(m,0) = p_0 \exp(-(Am^2 + Bm^4 + CL^{-2}m^6)) \quad (4.54)$$

Bu ifadedeki m ölçeklenmiş mıknaatıslanmadır. Buradaki A , B ve C ise sayısal fonksiyona uydurularak değerleri belirlenecek olan parametrelerdir. Analitik fonksiyonun bu hali yerine, daha fazla bilgi verecek parametreleri içeren aşağıdaki yeniden düzenlenmiş hali

$$p(m,0) = p(m_0,0) \exp(-((m^2 / m_0^2) - 1)^2 (a(m^2 / m_0^2) + c)) \quad (4.55)$$

sayısal fonksiyona uydurulmaktadır. m_0 , $p(m,0)$ 'ın en büyük değer olan $p(m_0,0)$ 'a eşit olduğu m değeridir; yani m_0 , m 'nin en büyük ihtimal ile alacağı değerdir. a ve c 'nin değerleri ölçeklenmenin gerçekleştiği uç durumda evrenseldir. $a = 0$ olduğunda $p(m,0)$ basitleşerek ortalama alana uygun yapıyı alır. $p(m,0)$ bu haliyle m^6 'yı içeren terimin L 'ye nasıl bağlı olduğunu açıkça göstermemekle beraber, eşitlik 4.54 ve eşitlik 4.55'deki m^6 'ların katsayılarının karşılaştırılması C 'yi belirlemek için aşağıdaki denklemi verir.

$$CL^{-2} = am_0^{-6} \quad (4.56)$$

Bu çalışmada doğruluğu denenecek olan fonksiyon Eşitlik 5.9 ile verilen fonksiyon olup, deneme Creutz CA simülasyonlarla yapılmıştır.

4.7. d=5'de Düzen Parametresi İhtimaliyet Dağılımı İçin Sonlu Örgü Ölçekleme Bağıntılarının Tespiti

M , M_{sp} ile ölçeklendiğinde ℓ ile gerçekten L ile ölçeklenebilen $P_L(M)$ çifte gaussian form tarafından aşağıdaki gibi yaklaşılabilir;

$$P_L(M) \propto \left\{ \exp[-(M - M_{sp})^2 L^d / 2k_B T \chi] + \exp[-(M + M_{sp})^2 L^d / 2k_B T \chi] \right\} \quad (4.57)$$

$$P_L(M) = \left\{ + \exp[-(M / M_{sp} - 1)^2 (L/1)^2 / 2] + \exp[-(M / M_{sp} + 1)^2 (L/1)^2 / 2] \right\}. \quad (4.58)$$

$P_L(M)$ 'nin l momenti, deęiş tokuř etkileřim sabiti J olmak üzere $H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j$ Ising hamiltoniyeni için alınganlık ve özısı (C) ve i noktasındaki $S_i = \pm 1$ ile J noktasındaki $S_j = \pm 1$ arasındaki en yakın komřu etkileřmesi ařaęıdaki gibi tanımlanır[60].

$$\langle |M| \rangle := L^{-d} \langle \left| \sum_i S_i \right| \rangle \quad (4.59)$$

$$\langle M^k \rangle := L^{-kd} \langle \left(\sum_j S_j \right)^k \rangle \quad (4.60)$$

$$\chi := (L^d / k_B T) (\langle M^2 \rangle - \langle |M| \rangle^2) \quad (4.61)$$

$$C/k_B := (\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2) / L^d (k_B T)^2 \quad (4.62)$$

Burada k_B boltzman sabiti ve $\langle . \rangle$ ise T sıcaklıęındaki termal ortalamadır. Ortalama olan limitindeki sonlu büyüklük etkilerinin tanımlaması, düzen parametresinin düzenli olmayan dalgalanmaları pertürbatif olarak entegre edilebilmesiyle ve korunması gereken dominant dalgalanmalar düzen parametresinin düzenli(düzgün) dalgalanmaları olarak belirtilmesiyle çok daha açık hale getirilebilir. Bu yüzden $P_L(M)$ ařaęıdaki gibi Landau cinsi serbest enerji yoğunluęu cinsinden yazılabilir.

$$P_L(M) \propto \exp(-L^d f_L). \quad (4.63)$$

Kritik sıcaklıkta $P_L(M)$ temel olarak $P_L(M) \propto \exp(-L^d u M^4)$ řeklini alır. Bu sonuętan Renormalize çiftlenim sabiti g_L 'nin deęeri ařaęıdaki gibi tahmin edilebilir[60].

$$g_L = -3 + \langle M^4 \rangle / [3 \langle M^2 \rangle^2]. \quad (4.64)$$

Örnek olarak

$$g_L(T_c) = -3 + I^{-4}(1/4)/(8\pi^2) \approx -0.812 \quad (4.65)$$

yazılabilir. Diğer yandan eğer $t_L = t - AL^{-d/2}$, $g_L(T_c)$ 'yi doğrulamış olsaydı A kat sayısına bağlı olurdu. [58,59]'da $g_L(T_c) = -1.0$ ve ölçeklenmiş değişken $\phi = (uL^{1/d})M$ açısından evrensel olarak ölçeklenmiş dağılım fonksiyonu oldukça önemli iki katsayı olan a ve b ile

$$P_L(\phi) \propto \exp[-a(L^{d/2}t - b)\phi^2 - \phi^4] \quad (4.66)$$

biçiminde yazılır. Burada $a=0.56$ ve $b=0.37$ 'dir. ancak Brézin ve Zinn-Justin'e göre $b=0$ 'dır[60].

5. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Beş boyutlu Ising modelinin, doğrusal boyutu $L=4,6,8,10,12$ olan periyodik sınır şartlı örgülerde ve sonsuz örgü kritik sıcaklığı yakınında üç “bit”li demonlar kullanılarak Creutz “cellular automaton”ında simülasyonlar yapılmıştır. Her bir örgü için T_c sıcaklıktaki enerji değeri alınarak her bir toplam enerji için 20 bağımsız simülasyon yapılmıştır. Her bir bağımsız simülasyonda $L=4,6,8,10$ ve 12 örgüsü için 9.6×10^5 kere örgünün bütün spinlerine ters çevirme kuralı uygulanmıştır. Sonlu örgü ölçekleme bağıntıları kullanılarak, sonlu örgü kritik sıcaklık değerlerinden ($T_c^X(L)$) (Çizelge 5.1.) sonsuz örgü kritik sıcaklık değeri (Şekil 5.1.) hesaplanmıştır. Elde edilen sonsuz örgü kritik sıcaklık değeri ($T_c^X(\infty) = 8.7776(1)$) literatür değerleri ile karşılaştırılmış (Çizelge 5.2.) ve uyumlu olduğu görülmüştür.

Düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının, (P_L), indirgenmiş sıcaklığın $t = 0$ değerinde ve doğrusal boyutları $L=4, 6, 8, 10$ ve 12 olan örgüler için, düzen parametresine (M) karşı ve $T_c^X(\infty)=8.7776(1)$ durumu için grafiği çizilmiştir(Şekil5.2.). Düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının, (P_L), düzen parametresinin $M= 0$ değerinde ve doğrusal boyutları $L =4, 6, 8, 10$ ve 12 olan örgüler için sıcaklığa, (T), karşı grafiği çizilmiştir(Şekil 5.39.). Düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının, (P_L), indirgenmiş sıcaklığın $t=0$ değerinde ve doğrusal boyutları $L = 4, 6, 8, 10$ ve 12 olan örgüler ($T_c^X(\infty)=8.7776(1)$) için düzen parametresine (M) karşı sonlu örgü ölçekleme grafiği çizilmiştir(Şekil 5.4.) ($T_c^X(\infty)=8.7776(1)$). Düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının, (P_L), düzen parametresinin $M =0$ değerinde ve doğrusal boyutları $L = 4, 6, 8, 10$ ve 12 olan örgüler için, indirgenmiş sıcaklığa (t) karşı sonlu örgü ölçekleme grafiği çizilmiştir(Şekil 5.5.) ($T_c^X(\infty) = 8.7776(1)$).

Beş boyutlu Ising modeli için sonsuz örgü kritik sıcaklığındaki düzen parametresi olasılık dağılım fonksiyonlarına analitik ifadeye göre fit yapılarak a ve c değerleri tespit edilmiştir(çizelge 5.3). $L=4, 6, 8, 10$ ve 12 örgüleri için analitik fonksiyona

göre yapılan fit eğrileri Şekil 5.6.a, Şekil 5.7.a, Şekil 5.8.a, Şekil 5.9.a ve Şekil 5.10.a'da verilmiştir. Yapılan fitler tüm örgülerde P(M) fonksiyonlarına oldukça iyi uyum sağlamaktadır. Uyumun test edilebilmesi için P(M) fonksiyonu ile yapılmış olan fit fonksiyonu farkları alınarak dağılımı Şekil 5.6.b, Şekil 5.7.b, Şekil 5.8.b, Şekil 5.9.b, Şekil 5.10.b'de gösterilmiştir.

Analitik sonlu örgü ölçekleme fonksiyonunun parametreleri için, bu fonksiyonun L örgü boyuna ait düzen parametresi olasılık dağılımlarının sonlu örgü ölçekleme çizimlerine uydurulması ile elde edilen tüm sonuçlar Çizelge 5.4'te verilmiştir. Çizelge 5.4'te verilen P_0 ve M_0 değerlerinden anlaşılacağı üzere P_0 değerleri örgü boyu arttıkça artar. M_0 değerleri ise örgü boyu arttıkça azalır. a değerleri tüm örgüler için sabit c değerleri ise örgü boyutuna göre değişim göstermektedir.

5.1. Sonlu Örgü Sıcaklık Değerlerinden Sonsuz Örgü Sıcaklık Değerlerinin Elde Edilmesi

Sonlu örgü kritik sıcaklık değerleri ile sonsuz örgü kritik sıcaklık değerleri arasındaki bağıntı Binder[59] tarafından eşitlik 5.1'deki gibi verilmiştir.

$$\frac{[T_c(L) - T_c]}{T_c} = AL^{\frac{-1}{\Psi}} \quad (5.1)$$

Burada Ψ , kayma üssü olarak bilinmektedir. $\Psi = \frac{1}{y_T^*}$ $y_T^* = \frac{d}{2}$ 'ye eşittir. Daha açık olarak eşitlik 5.1, eşitlik 5.2 olarak yazılır.

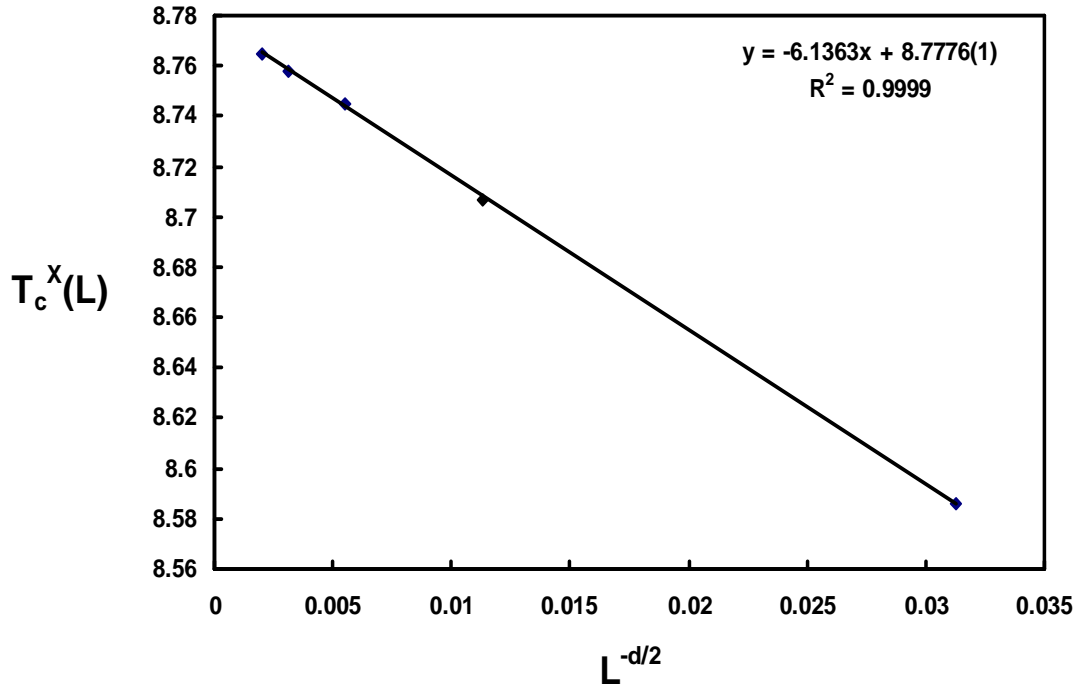
$$T_c^X - T_c^X(L) aL^{-d/2} \quad (5.2)$$

Sonlu örgü sıcaklık değerlerinden sonsuz örgü sıcaklık değerlerinin bulunmasında manyetik alınganlığın maksimum olduğu sıcaklık değerleri kullanılmaktadır. Manyetik alınganlık için değerler Çizelge 5.1.'de verilmektedir.

Çizelge 5.1. Manyetik alınganlığın maksimum olduğu sonlu örgü kritik sıcaklık değerleri.

L	$T_c^X(L)$	χ_{maks}
4	8.586(7)	1.441(8)
6	8.707(1)	4.169(36)
8	8.745(1)	8.921(93)
10	8.758(1)	15.579(30)
12	8.765(1)	24.885(73)

Eşitlik 5.2. kullanılarak Şekil 5.1. çizilmiştir. Bu grafiğin kesim noktasından sonsuz örgü kritik sıcaklık değeri $T_c^X(\infty) = 8.7776(1)$ elde edilmiştir.



Şekil 5.1. Sonlu örgü manyetik alınganlık için $T_c^X(L)$ 'nin $L^{-d/2}$ 'ye karşı grafiği.

$4 \leq L \leq 12$ aralığındaki verilere uyan doğru $L \rightarrow \infty$ iken sonsuz örgü kritik sıcaklık değeri olarak $T_c^{\chi}(\infty) = 8.7776(1)$ vermektedir. Elde edilen bu sıcaklık değeri literatür değerleri ile uyum halindedir.

Çizelge 5.2. Beş boyutlu Ising modelinin farklı çalışmalarda elde edilen sonsuz örgü kritik sıcaklık değerleri.

T_c	Yöntem
8.7774(35)	Monte Carlo[60]
8.7812(23)	Monte Carlo[72]
8.778475(31)	Monte Carlo[68,49]
8.780(10)	Monte Carlo[63]
8.77832(54)	Seri açılımı[49]
8.7769(12)	Seri açılımı[49]
8.77886(77)	Dinamik Monte Carlo[49]
8.7787(79)	Creutz “cellular automaton”ı[49]
8.7776(1), bu çalışma	Creutz “cellular automaton”ı

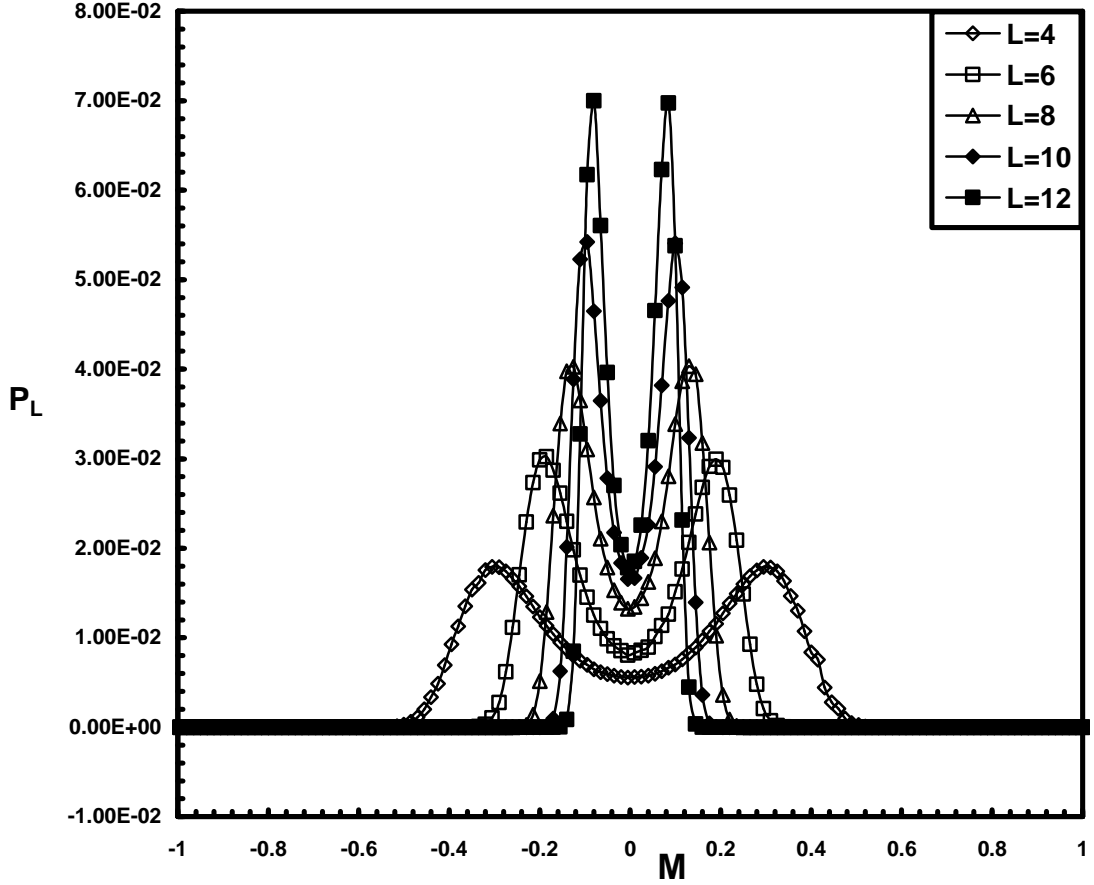
5.2. Düzen Parametresi İhtilamiyet Dağılımı İçin Sonlu Örgü Ölçekleme Bağıntılarının Tespiti

Sonlu sistemlerde M manyetizasyonu dalgalı bir niceliktir ve $P(M)$ olasılık dağılımı ile ifade edilir. Ölçekleme limitinde yani sistem sonsuz örgüye doğru giderken olasılık dağılımı fonksiyonları evrenseldir. Düzen parametresi olasılık dağılımı;

$$P_L(M) = \frac{N_M}{N_{CCAS}} \quad (5.3)$$

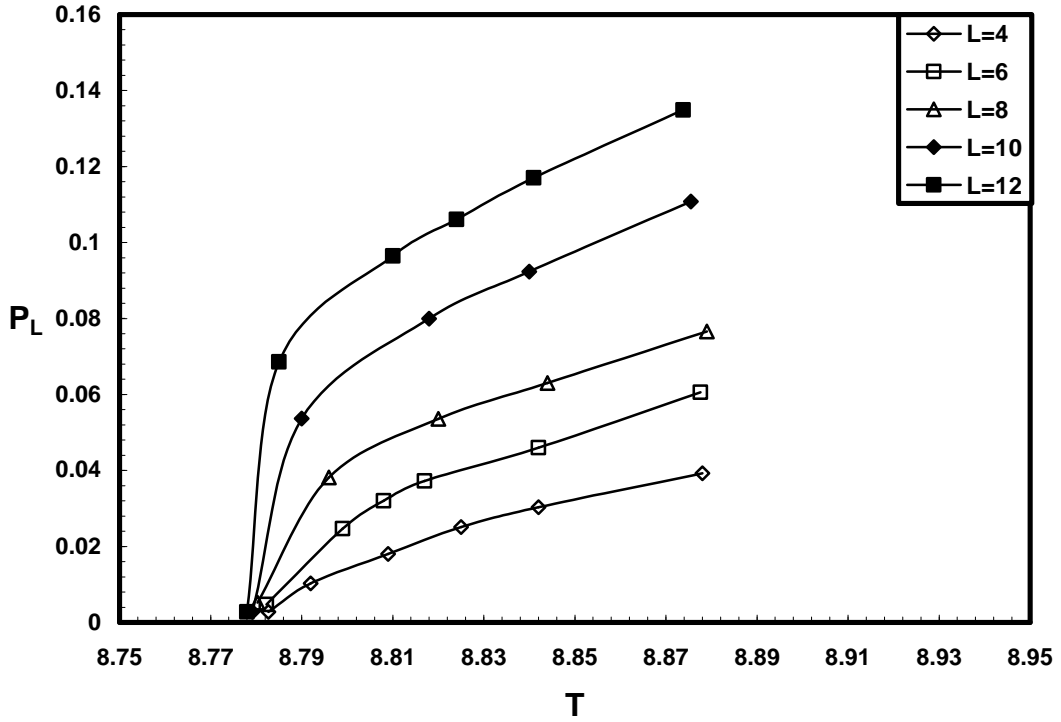
ile hesaplanmıştır. Burada N_M , M 'deki manyetizasyonun ortaya çıkma sayısı; N_{CCAS} ise Creutz cellular automaton adım sayısıdır. Düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının, (P_L) , indirgenmiş sıcaklığın $t=0$ değerinde ve doğrusal boyutları $L=4, 6,$

8, 10 ve 12 olan örgüler için, düzen parametresine (M) karşı ve $T_c^Z(\infty)=8.7776(1)$ durumu için grafiği çizilmiştir(Şekil5.2.).



Şekil 5.2. Düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının, (P_L) indirgenmiş sıcaklığın $t=0$ değerinde ve doğrusal boyutları $L=4, 6, 8, 10$ ve 12 olan örgüler için, düzen parametresine (M) karşı grafiği.

Şekil 5.2 incelendiğinde kritik sıcaklıktaki eğriler örgü boyuna bağlı olarak değişim göstermektedir. Beklenildiği gibi küçük örgülerde daha geniş ve tepesi kısa, örgü boyu büyüdükçe darlaşan ve boyu uzayan eğriler ortaya çıkmaktadır[74]. Düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının, (P_L), düzen parametresinin $M=0$ değerinde ve doğrusal boyutları $L=4, 6, 8, 10$ ve 12 olan örgüler için sıcaklığa, T , karşı grafiği Şekil 5.3. verilmektedir. Örgü boyu büyüdükçe düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının, (P_L), değerleri artmaktadır.



Şekil 5.3. Düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının, (P_L), düzen parametresinin $M=0$ değerinde ve doğrusal boyutları $L = 4, 6, 8, 10$ ve 12 olan örgüler için sıcaklığa, T , karşı grafiği.

Ising modelinde düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı için sonlu örgü ölçekleme hipotezi, dış manyetik alan yok iken genel olarak şöyle ifade edilebilir[85-88];

$$P_L(M, t) = a(L)p(Ma(L), TB(L)), t \rightarrow 0, L \rightarrow \infty \quad (5.4)$$

bu ifadeye M düzen parametresi, $t = (T - T_c) / T_c$ 'de, T_c sonsuz örgünün kritik sıcaklığı olmak üzere, indirgenmiş sıcaklıktır. $a(L)$ ve $b(L)$ 'nin L 'ye bağımlılığı, $|M_L(t)|$ için sonlu örgü ölçekleme bağıntısı aşağıda verilen tanım kullanılarak bulunabilir.

$$|M_L(t)| = \int_{-\infty}^{\infty} P_L(M, t) |M| dM \quad (5.5)$$

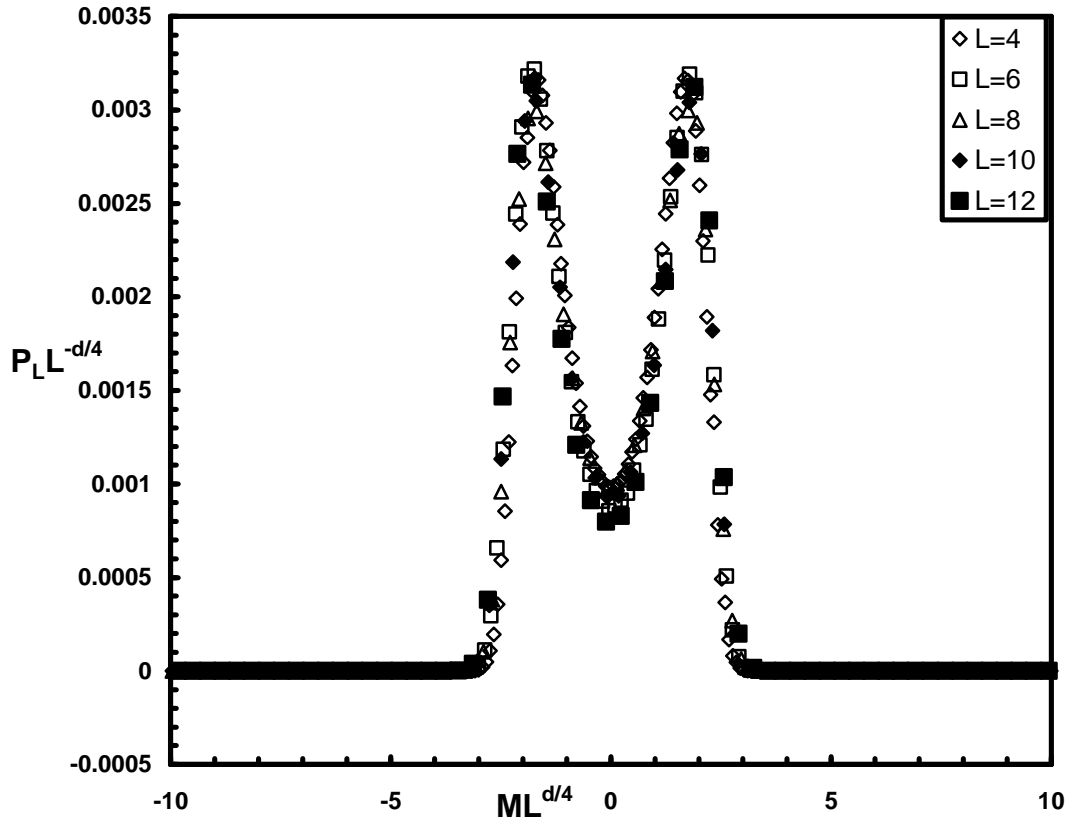
$|M_L(t)|$ için sonlu örgü ölçekleme bağıntıları $d < 4$, $d = 4$ ve $d > 4$ 'de birbirinden farklıdır. $d > 4$ 'de sonlu örgü ölçekleme bağıntısı aşağıda verilmektedir[88-90].

$$f_L^{(S)}(t, h) = L^{-d} Y(C_1 t L^{d/2}, C_2 h L^{3d/4}), \quad t \rightarrow 0, h \rightarrow 0, L \rightarrow \infty. \quad (5.6)$$

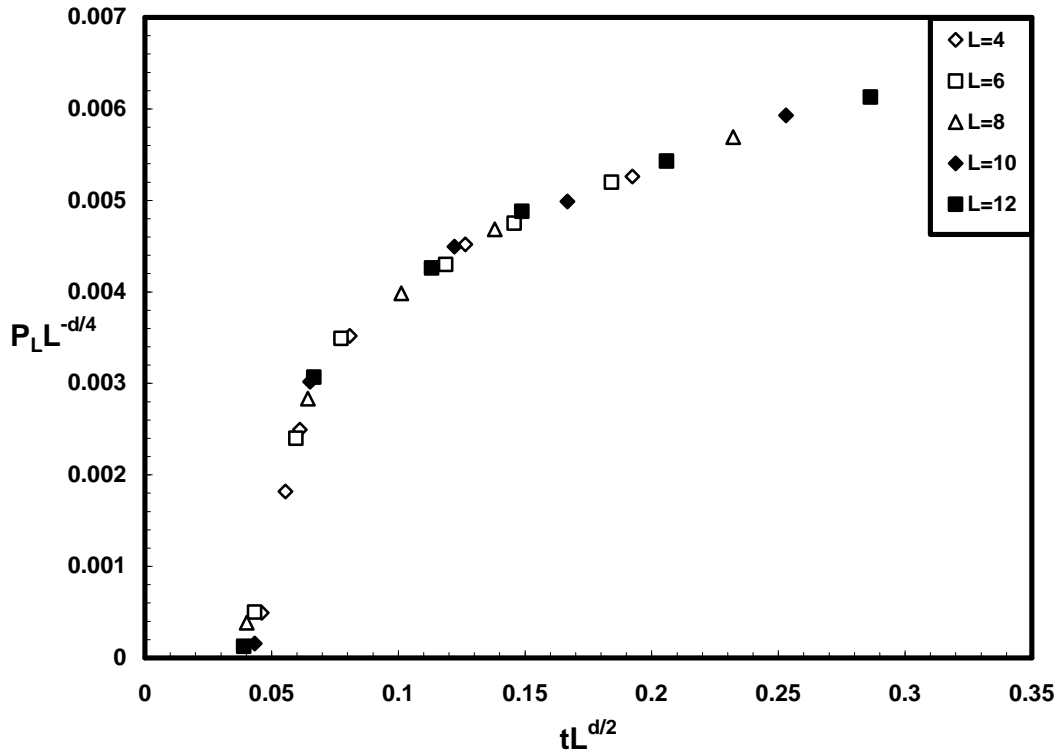
Düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı için türetilen sonlu örgü ölçekleme bağıntısı aşağıda verilmektedir[88].

$$P_L(M, t) = C_2^{-1} L^{d/4} p(M C_2^{-1} L^{d/4}, t C_1 L^{d/2}), \quad t \rightarrow 0, L \rightarrow \infty \quad (5.7)$$

5.7 denkleminin doğruluğu test olacak denklemdir.



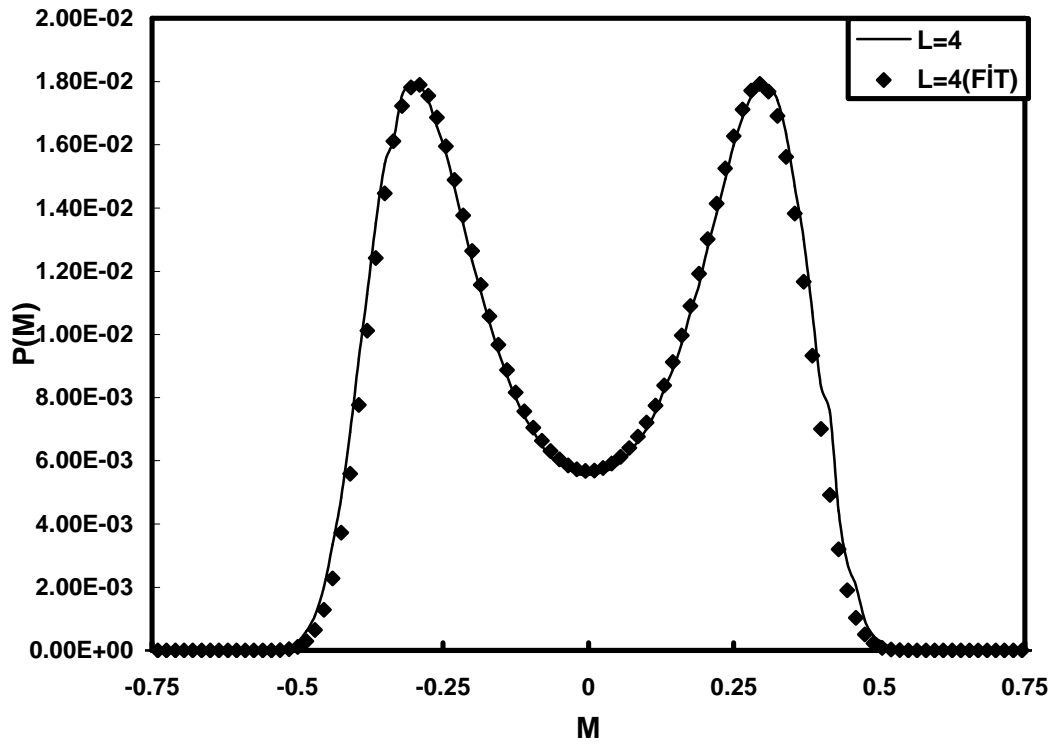
Şekil 5.4. Düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının, (P_L) , indirgenmiş sıcaklığın $t=0$ değerinde ve doğrusal boyutları $L = 4, 6, 8, 10$ ve 12 olan örgüler için, düzen parametresine (M) karşı sonlu örgü ölçekleme grafiği.



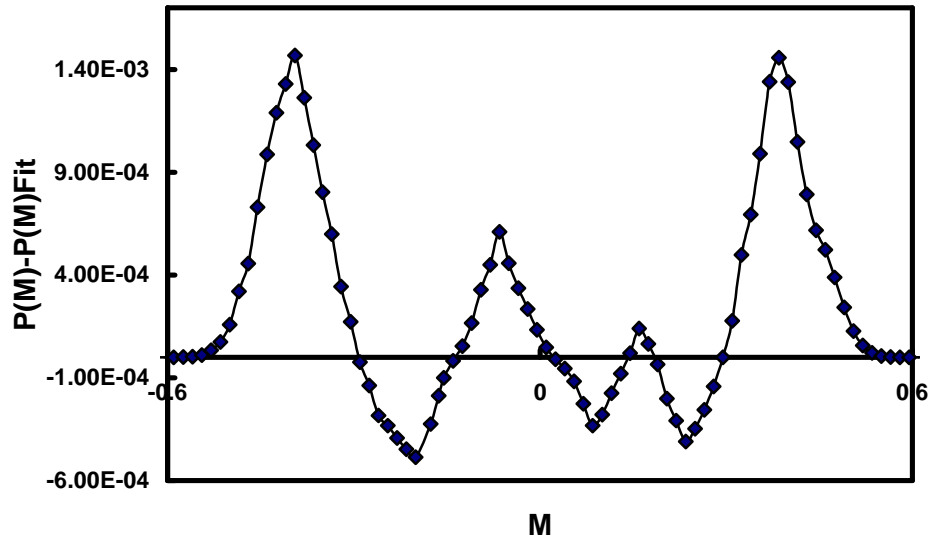
Şekil 5.5. Düzen parametresi ihtimaliyet dağılımının, (P_L), düzen parametresinin $M=0$ değerinde ve doğrusal boyutları $L = 4, 6, 8, 10$ ve 12 olan örgüler için indirgenmiş sıcaklığa, (t) , karşı sonlu örgü ölçekleme grafiği.

Şekil 5.4 ve Şekil 5.5 incelendiğinde simülasyondan elde edilen dataların üst üste gelmesi 5.7 denkleminin doğruluğunu göstermektedir. Bu, düzen parametresi dağılımı için sonlu örgü ölçekleme fonksiyonunun, $p(m, x)$, analitik olarak bilindiği durum olup, $p(m, x)$ ortalama alana uygun yapıdadır[87,88].

Bu tez çalışması kapsamında ilk kez beş boyutlu Ising model için sonsuz örgü kritik sıcaklığındaki düzen parametresi olasılık dağılım fonksiyonlarına analitik ifadeye göre fit yapılarak a ve c değerleri tespit edilmiştir. Analitik fonksiyona yapılan fit sonucunda elde edilen değerler çizelge 5.3'de verilmektedir. Şekil 5.6.a, Şekil 5.7.a, Şekil 5.8.a, Şekil 5.9.a, Şekil 5.10.a, $L=4, 6, 8, 10, 12$ örgüleri için analitik fonksiyona göre yapılan fit eğrilerini göstermektedir. Yapılan fitler tüm örgülerde $P(M)$ fonksiyonlarına oldukça iyi uyum sağlamaktadır. Uyumun test edilebilmesi için $P(M)$ fonksiyonu ile yapılmış olan fit fonksiyonu farkları alınarak dağılımı Şekil 5.6.b, Şekil 5.7.b, Şekil 5.8.b, Şekil 5.9.b, Şekil 5.10.b'de gösterilmiştir.

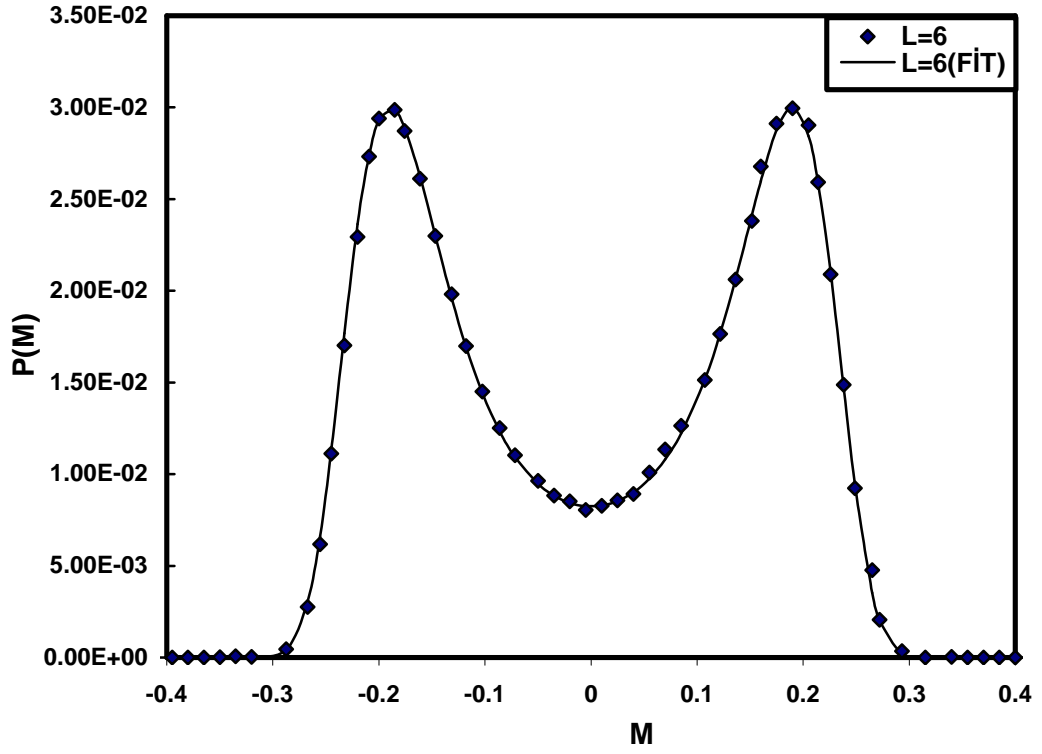


(a)

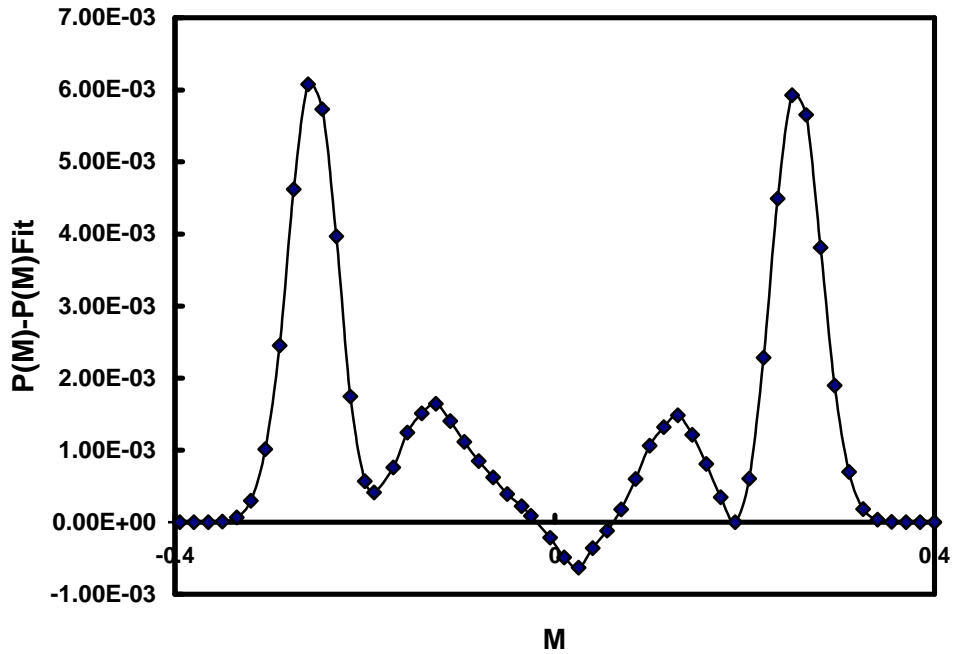


(b)

Şekil 5.6.a. $P(M)$ 'nin $L=4$ için M 'ye karşı analitik ifadesine göre yapılan fit.
b. $L=4$ için $P(M)$ ve fitin farkı.

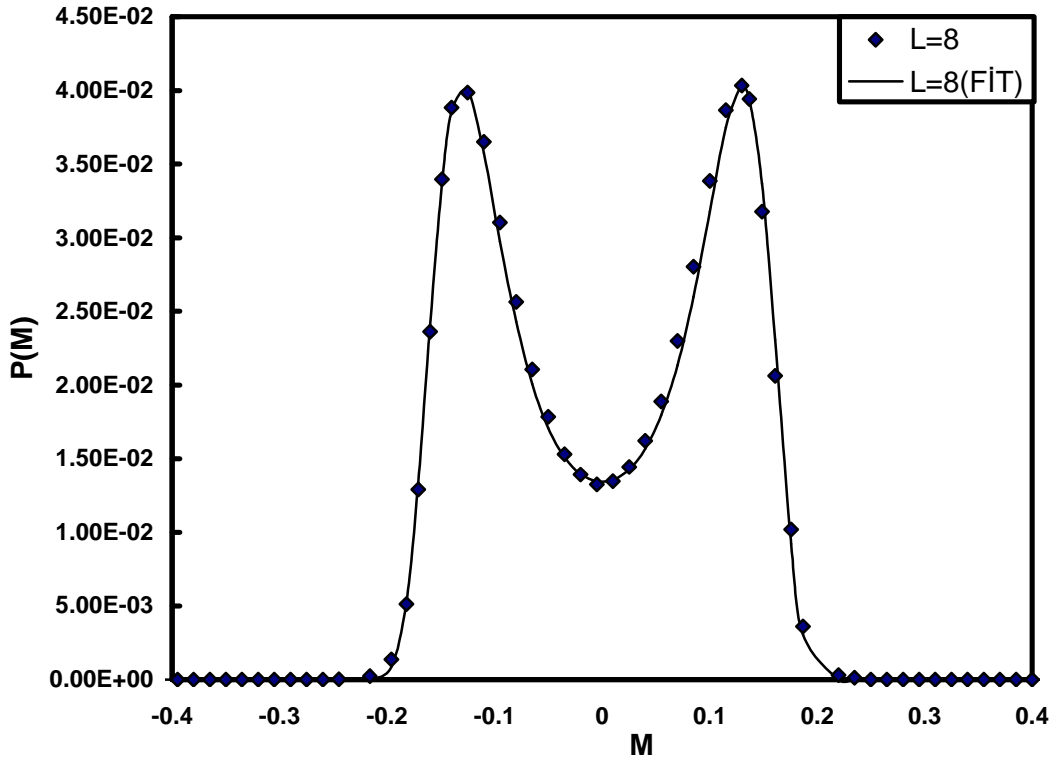


(a)

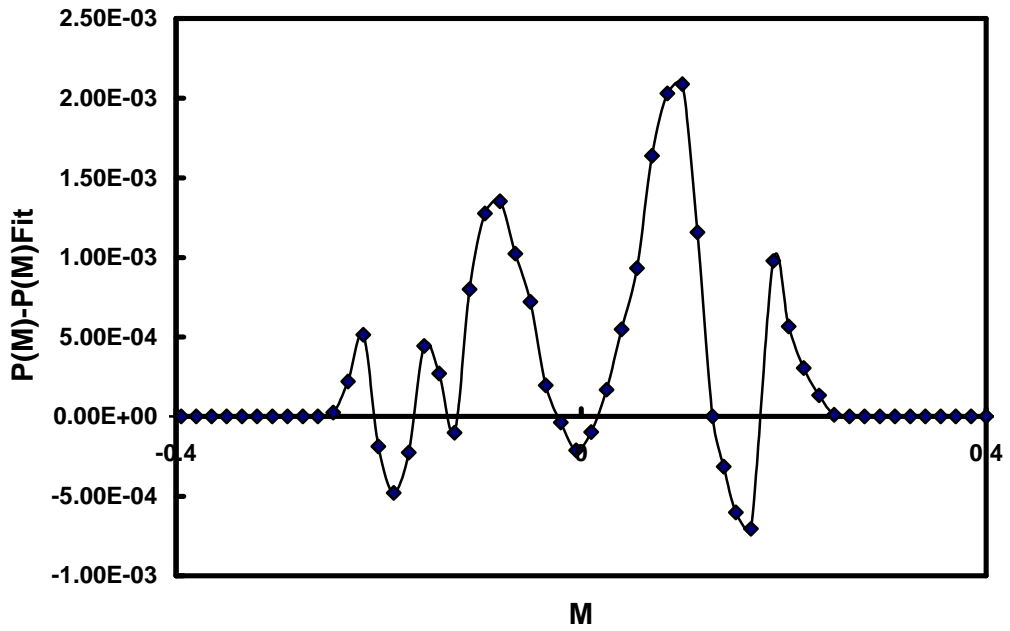


(b)

Şekil 5.7.a. $P(M)$ 'nin $L=6$ için M 'ye karşı analitik ifadesine göre yapılan fit.
b. $L=6$ için $P(M)$ ve fitin farkı.

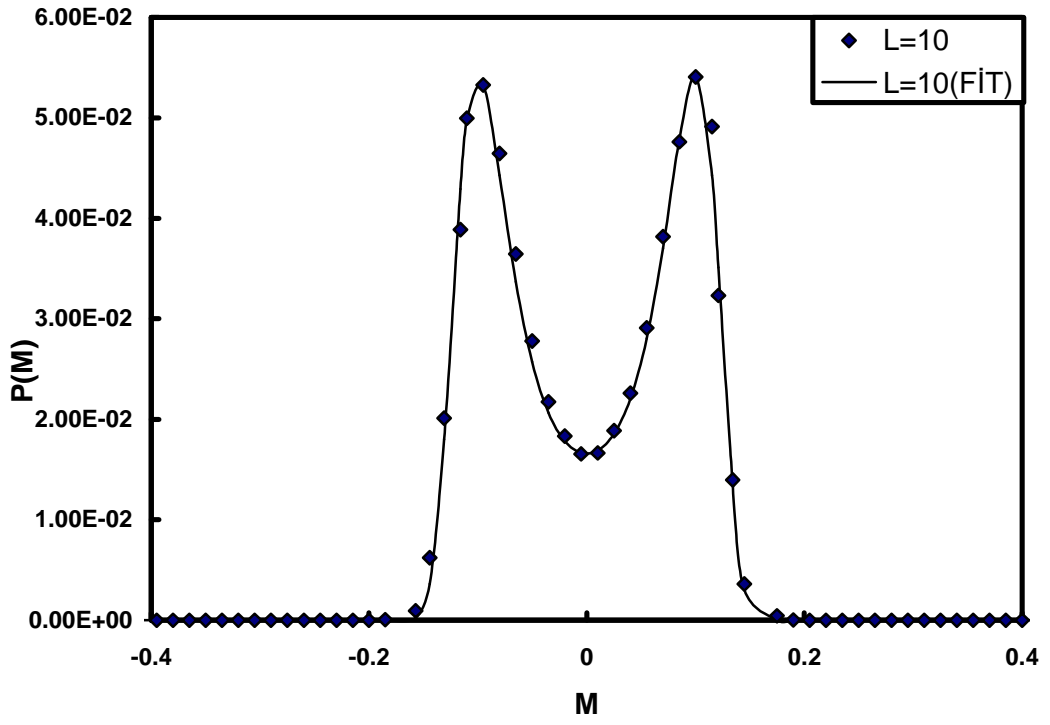


(a)

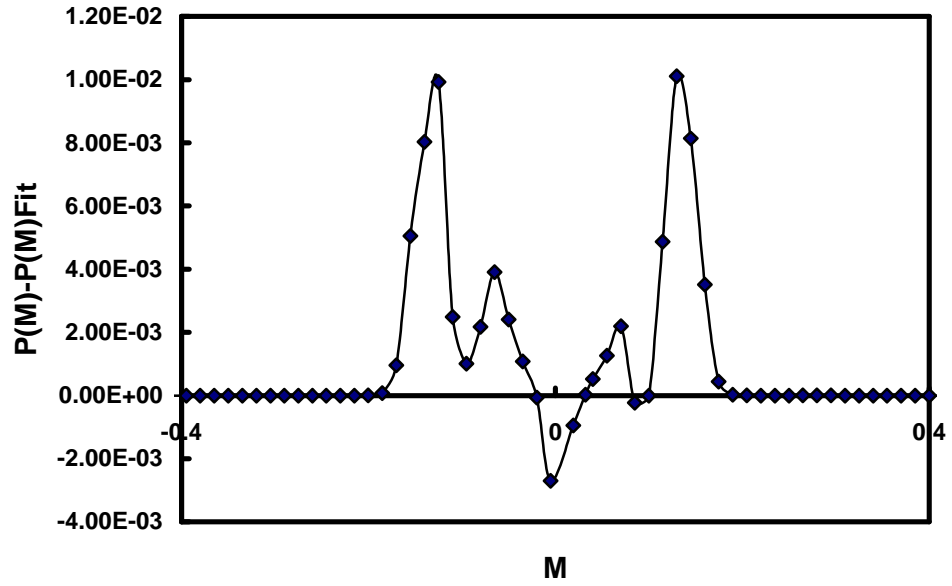


(b)

Şekil 5.8.a. $P(M)$ 'nin $L=8$ için M 'ye karşı analitik ifadesine göre yapılan fit.
b. $L=8$ için $P(M)$ ve fitin farkı.



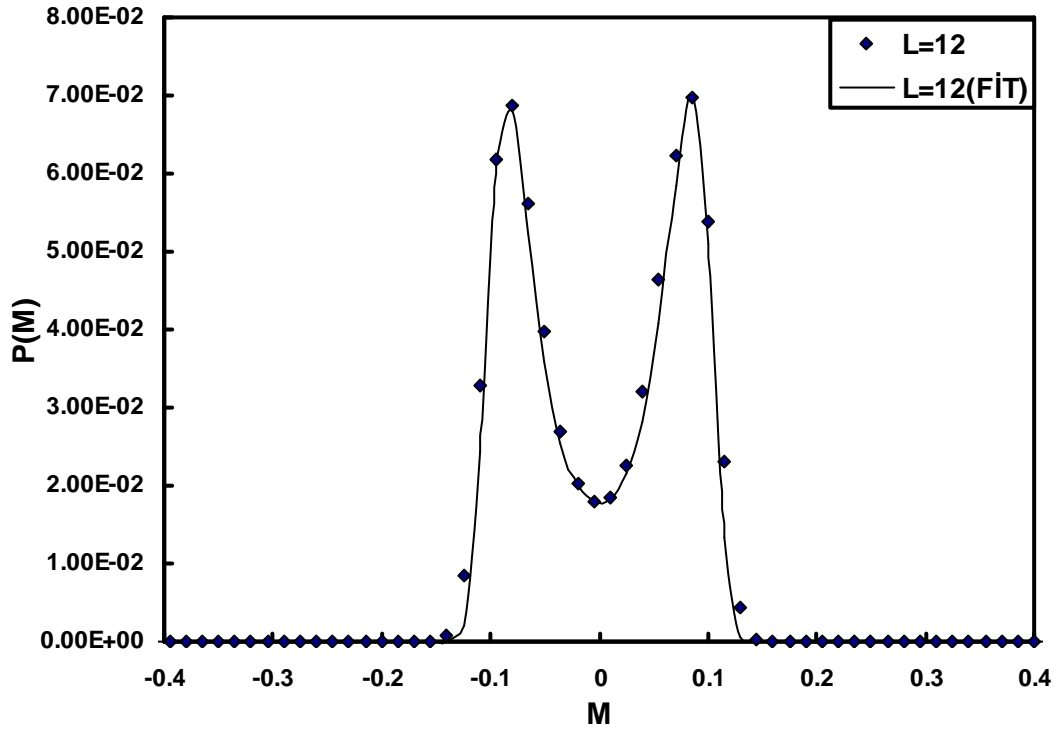
(a)



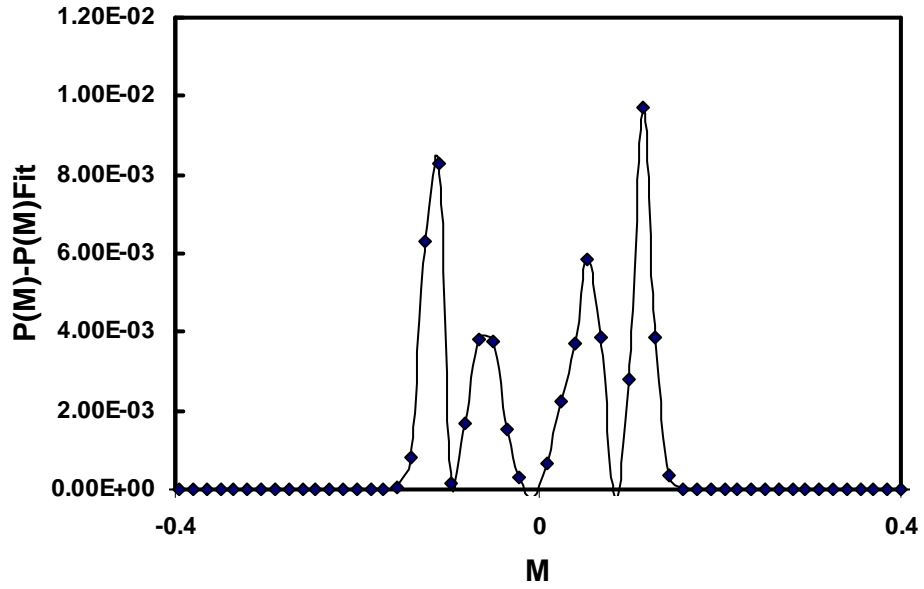
(b)

Şekil 5.9.a. $P(M)$ 'nin $L=10$ için M 'ye karşı analitik ifadesine göre yapılan fit.

b. $L=10$ için $P(M)$ ve fitin farkı.



(a)



(b)

Şekil 5.10.a. $P(M)$ 'nin $L=12$ için M 'ye karşı analitik ifadesine göre yapılan fit.

b. $L=12$ için $P(M)$ ve fitin farkı.

Analitik sonlu örgü ölçekleme fonksiyonunun parametreleri için, bu fonksiyonun L örgü boyuna ait düzen parametresi olasılık dağılımlarının sonlu örgü ölçekleme çizimlerine uydurulması ile elde edilen tüm sonuçlar çizelge 5.4'de verilmektedir. Burada verilem $T_c(L)$, manyetik alınganlık ve düzen parametresinin ortalama değerleri, belirlenen örgü kritik sıcaklığında 9.10^6 cellular automaton zaman adımı simülasyon yapılarak bulunan değerlerdir. Çizelge 5.3'de verilen kritik sıcaklık, manyetik alınganlık ve düzen parametresi değerlerine \pm standart sapmaları yazılarak verilmiştir. Ayrıca çizelgede, kritikteki $P(M)$ fomksiyonlarının M_0 ve P_0 değerleride verilmektedir.

Çizelge 5.3. Analitik sonlu örgü ölçekleme fonksiyonun parametreleri için, bu fonksiyonun L örgü boylarına ait sıcaklık, düzen parametresi, manyetik alınganlık ortalama değerleri.

	$T_c(L)$	M_{ort}	X_{ort}
L=4	8.586 ± 0.007	0.248 ± 0.001	1.441 ± 0.008
L=6	8.707 ± 0.001	0.159 ± 0.001	4.169 ± 0.036
L=8	8.745 ± 0.001	0.109 ± 0.001	8.921 ± 0.093
L=10	8.758 ± 0.001	0.084 ± 0.001	15.784 ± 0.276
L=12	8.765 ± 0.001	0.070 ± 0.001	24.816 ± 0.616

Çizelge 5.4. Analitik sonlu örgü ölçekleme fonksiyonun parametreleri için, bu fonksiyonun L örgü boylarına ait düzen parametresi olasılık dağılımlarının sonlu örgü ölçekleme çizimlerine uydurulması ile elde edilen değerler.

	a	c	M_0	P_0
L=4	0.56	1.15	0.295	0.018
L=6	0.56	1.29	0.190	0.030
L=8	0.56	1.10	0.130	0.040
L=10	0.56	1.18	0.099	0.054
L=12	0.56	1.37	0.085	0.070

Çizelge 5.4’de verilen P_0 ve M değerlerinden anlaşılacağı üzere P_0 değerleri örgü boyu arttıkça artar. M_0 değerleri ise örgü boyu arttıkça azalır. a değerleri tüm örgüler için sabit c değerleri ise örgü boyutuna göre değişmektedir.

Termodinamik limitte $P(M)$ fonksiyonlarının evrensel olması beklenmektedir. Bu nedenle $P(M)$ fonksiyonun analitik ifadesindeki a ve c sabitlerinin evrensel olması beklenmektedir[88]. Beş boyutlu Ising model için Creutz CA algoritması kullanılarak $T_c(L)$ ’lerde yapılan $P(M)$ hesaplamaları için $L \rightarrow \infty$ limitinde a ve c değerleri bir sabite yakınsamaktadır.

Bu bulgular beş boyutlu Ising modelinde düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı için Eşitlik 5.7’de verilen sonlu örgü ölçekleme bağıntısının geçerli olduğunu göstermektedir. $d = 5$ Ising modelinin düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı için elde edilen sonlu örgü ölçekleme bağıntısı Cellular Automaton simülasyonlarıyla sayısal olarak doğrulanmıştır. Böylece, düzen parametresi ihtimaliyet dağılımı için sonlu örgü ölçekleme bağıntısının $d=5$ ’te geçerli olduğu gösterilmiştir.

KAYNAKLAR

- [1] Yeomans, J. M., Statistical Mechanics of Phase Transitions, Clarendon Pres, Oxford 1-141, 1992.
- [2] Serway, A. R., Fen ve Mühendislik için Fizik Modern Fizik ilaveli, Çeviri Editörü, Kemal Çolakoğlu, Palme Yayıncılık, Ankara, 855-863, 1996.
- [3] Binney.J.J., Dowrick, N.J., Fisher, A.J., and Newman, M. E. J., The Theory of Critical Phenomena. Clarendon Press, Oxford, 1992.
- [4] Huang, K., Statistical Mechanics, John Wiley and Sons, Inc., 341-398, 1987.
- [5] Hahne, F.J.W., Lecture Notes in Physics, Critical Phenomena Springer-Verlag, Newyork, 1983.
- [6] Baxter, R.B., Exactly Solved Models in Statistical Mechanics, Academic pres, London, 1989.
- [7] Ising, E., Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus, Z.Physik, 31:253-258, 1925.
- [8] Onsager, L., Crystal Statistics I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition, Phys. Rev., 65:117, 1944.
- [9] Blume, M., Emery, V.J., Griffiths, R.B., Ising Model for the λ transition and phase separation in He3-He4 mixtures, Phys. Rev. A, 4: 1071-1077, 1971.
- [10] Rosengren, A., Häggkvist, R., Rigorous solution of a two-dimensional Blume-Emery-Griffiths model, Phys.Rev.Lett., 63: 660-663, 1989.

- [11] Lapinskas, S., Rosengren, A., Blume-Emery-Griffiths model on three dimensional lattices: Consequences for the antiferromagnetic Potts model, *Phys. Rev. B*, 49: 15190-15196, 1994.
- [12] Shick, M., Shih, W.H., Spin-1 model of a microemulsion, *Phys. Rev. B*, 34: 1797-1801, 1986.
- [13] Kutlu, B., The Simulation of 2D Spin-1 Ising Model with the bilinear and positive Biquadratic Interaction on a Cellular Automaton, *Int. J. of Mod. Phys. C*, 10:1305-1320, 2003.
- [14] Solak, A., Kutlu, B., The Critical Behavior of the 2D Ising Model with the Bilinear and Positive Biquadratic nearest neighbor interactions on a Cellular Automaton, *Int. J. Mod. Phys. C*, 15:1425-1438, 2004.
- [15] Kutlu, B., Özkan, A., Seferoğlu, N., Solak, A. and Binal, B., The Tricritical Behavior of the 3D Blume-Capel Model on a Cellular Automaton, *Int. J. Mod. Phys. C*, 16: 933-950, 2005.
- [16] Özkan, A., Seferoğlu, N. and Kutlu, B., Critical Exponents of the Three Dimensional Blume-Capel Model on a Cellular Automaton, *Physica A*, 362:327-337, 2006.
- [17] Seferoğlu, N. and Özkan, A. and Kutlu, B., Finite Size Effect for the First-Order Phase Transition of the Three Dimensional Blume-Capel Model on a Cellular Automaton, *Chinese Phys. Lett.*, 23: 2526-2529, 2006.
- [18] Seferoğlu, N., Kutlu, B., Reentrant Phase Transition of the Blume-Emery-Griffiths Model for a Simple Cubic Lattice on a Cellular Automaton, *Physica A*, 374: 165-172, 2007.

- [19] Merdan, Z., Altı Boyutlu Ising Modelin Creutz "Cellular Automaton"ında İncelenmesi, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 1-102, 2003.
- [20] Frenkel, D., Smit, B., Understanding Molecular Simulation: from Algorithms to Applications, Academic Press, 204, 1996.
- [21] Hermann, D. W., Computer Simulation Methods in Theoretical Physics, Springer-Verlag, 1-148, 1989.
- [22] Binney, J. J., Dowrick, N. J., Fisher, A. J., and Newman, M. E. J., The Teory of Critical Phenomena An Introduction to the Renormalization Group, Oxford University Press, Oxford, 55, 1992.
- [23] Metropolis, N. , Rosenbluth, A. W. , Rosenbluth, M. N. , Teller, E. , Equation of State Calculations by Fast Computing Machines, J. Chem. Phys., 21, 1087, 1953.
- [24] Creutz, M., Microcanonical Monte Carlo Simulation, Phys. Rev. Lett., 50, 1411, 1983.
- [25] Creutz, M., Deterministic Ising Dynamics Ann. Phys.,167,62, 1986
- [26] Wolfram, S., Theory and Applications of Cellular Automaton, World Scientific, 1-50, 91-125, 343-357, 1986.
- [27] Wolfram, S., Universality and Complexity in celluar Automata, Physica D, 10.1, 1984.

- [28] Wolfram, S., Statistical Mechanics of Cellular Automaton, Rev. Mod. Phys., 55:601-651, 1983.
- [29] Vichniac, G.Y., Simulating physics with cellular automata, Physica D 10,96, 1984
- [30] Vichniac, G.Y., Simulating Physics with Cellular Automata, Physica D, 10: 96-116, 1984.
- [31] Pomeau, Y., Invariant in Cellular Automata, J. Phys.A: Math. Gen., 17:415-418, 1984.
- [32] Herrmann, H.J., Fast Algorithm for The Simulation of Ising Model, J. of Stat. 99 Phys., 45:145-151, 1986.
- [33] Aktekin, N., The simulation of the Ising Model on the Creutz Cellular Automaton, Annual Reviews of Computational Physics Vol. VII, edited by D. Stauffer, World Scientific, Singapor, 2000.
- [34] Aktekin, N., Simulation of the Two-Dimensional Ising Model on the Creutz Cellular Automaton, Physica A, 219, 436-446, 1995.
- [35] Kutlu, B., İki Boyutlu Ising Modelin Creutz Cellular Automaton'da İncelenmesi, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 1-99, 1996.
- [36] Kutlu, B., Critical Behavior of the Two-dimensional Ising Model with Next-Nearest Neighbor Antiferromagnetic Interaction on the Creutz Cellular Automaton, Physica A, 234:807-818, 1996.

- [37] Kutlu, B., Critical Exponents of the Two-Dimensional Ising Model with Next-Nearest-Neighbor and Four-Spin Interactions on the Creutz Cellular Automaton, *Physica A*, 243:199-212, 1997.
- [38] Kutlu B. , Aktekin N., Critical Slowing Down in Ising Model for Creutz Algoritm, *Physica A*, 208:423-430, 1994.
- [39] Özkan, A., İki-Boyutlu ising model için şekil Etkisinin Creutz Cellular Automaton ile incelenmesi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 1-52, 2001.
- [40] Aktekin N., Dinamical Critical exponent of the three-dimensional Ising model on the Creutz Cellular Automaton, 3rd Gen. Conf. Of the Balk. Phys. Un., Romania(Cluj-Napoca), 1997.
- [41] Aktekin, N., The finite-size scaling functions of the four-dimensional Ising model, *Journal Of Statistical Physics*, 104:1397-1406, 2001.
- [42] Aktekin N., Gunen A., Saglam Z., A finite-size scaling study of the fourdimensional Ising model on the Creutz cellular automation, *Int. J. Mod. Phys. C*, 10, 621-633, 1999.
- [43] Merdan, Z., Boyacıoğlu, B., Günen, A., and Sağlam, Z., The Simulation of the Four-Dimensional Ising Model on the Creutz Cellular Automaton, *Bulletin of Pure and Applied Sciences*, 22 (2):95-100, 2003.
- [44] Merdan Z, Gunen A, Mulazimoglu G., Effect of the number of energy levels of a demon for the simulation of the four-dimensional Ising model on the Creutz cellular automaton, *Int. J. Mod. Phys. C*, 16, 1269-1278, 2005

- [45] Mülazımoğlu, G., Duran, A., Merdan Z. and Günen A., The effect of the increase of linear dimensions on exponents obtained by finite-size scaling relations for the four-dimensional Ising model on the creutz cellular automaton, *Modern Physics Letters B*, 22:1329-1341, 2008.
- [46] Aktekin, N., Simulation of the Four Dimensional Ising Model on the Cellular Automaton, *Physica A*, 232: 397-407, 1996.
- [47] Aktekin, N., The finite-size scaling functions of the four-dimensional Ising model, *G.Ü. Fen Bil. Der.*, 17(3):59-70, 2004.
- [48] Merdan, Z., Gunen A., Cavdar S., Dynamical finite-size scaling function of the four dimensional Ising model for Creutz algorithm, *Physica A-Statistical Mechanics And Its Applications*, 359:415-422, 2006.
- [49] Kalay, M., Beş Boyutlu Ising Modelin Creutz Cellular Automaton'ında İncelenmesi, Doktora tezi, Gazi Üniv. Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 1-93, 2001
- [50] Aktekin, N., Erkoc S, Kalay M The test of the finite-size scaling relations for the five-dimensional Ising model on the Creutz cellular automaton, *International Journal Of Modern Physics C*, 10:1237-1245, 1999
- [51] Merdan, Z., Bayirli M., The effect of the increase of linear dimensions on exponents obtained by finite-size scaling relations for the six- dimensional Ising model on the Creutz cellular automaton, *Appied Mathematics And Computaion*, 167: 212-224, 2005.

- [52] Aktekin, N., Effect of the number of energy levels of a demon on the simulation of the Ising models in five to seven dimensions on the Creutz cellular automaton, *International Journal Of Modern Physics C*, 10:621-633, 1999.
- [53] Merdan, Z., Atille, D., The effect of the number of simulations on the exponents obtained by finite-size scaling relations for the seven-dimensional Ising model on the Creutz cellular automaton, *Physica A-Statistical Mechanics And Its Applications*, 376:327-336, 2007.
- [54] Merdan Z, Duran A, Atille D, Mülazimoglu G. and Günen A., The test of the finite-size scaling relations of the Ising models in seven and eight dimensions on the Creutz cellular automaton, *Physica A-Statistical Mechanics And Its Applications*, 366:265-272, 2006.
- [55] Aktekin N., Simulation of the eight-dimensional Ising model on the Creutz cellular automaton, *International Journal Of Modern Physics C*, 8:287-292, 1997.
- [56] Aktekin, N., Erkoc S., The test of the finite-size scaling relations for the sixdimensional Ising model on the Creutz cellular automaton, *Physica A*, 284:206- 214, 2000.
- [57] Privman, V. (Ed.), *Finite-Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems*, World Scientific, Singapore, 1-98, 1990.
- [58] Privman, V. and Fisher, M. E., *Phys. Rev. B* 30:322 (1984); Privman, V., in *Finite-Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems*, World Scientific, Singapore, 1-98, 1990.

- [59] Binder, K., Nauenberg, M., Privman, V., and Young, A. P., Finite-Size Tests Of Hyperscaling, *Phys. Rev. B*, 31:1498, 1985.
- [60] Rickwardt, Ch., Nielaba, P., and Binder, K., A Finite-Size-Scaling Study Of The 5-Dimensional Ising-Model, *Ann. Phys., (Leipzig)* 3:483, 1994.
- [61] Mon, K. K., Finite-size scaling of the 5D Ising model, *Europhys. Lett.*, 34:399, 1996.
- [62] Blöte, H. W. J., and Luijten, E., Universality And The Five-Dimensional Ising Model, *Europhys. Lett.*, 38:565, 1997.
- [63] Cheon, M., Chang, I., and Stauffer, D., Monte Carlo investigation of threeexponent scaling in the 5D Ising model, *Int. J. Mod. Phys. C.*, 10:131, 1999.
- [64] Singh, S., and Pathria, R. K., Finite-Size Scaling Of $O(N)$ Models In Higher Dimensions, *Phys. Rev. B*, 38:2740, 1988.
- [65] Kenna, R., and Lang, C. B., Renormalization-Group Analysis Of Finite-Size Scaling In The Φ_4^4 Model, *Nucl. Phys. B*, 393:461, 1993.
- [66] Brezin, E., Finite Size Effects In Phase-Transitions, *J. Phys., Paris*, 43:15, 1982.
- [67] Singh, S., and Pathria, R. K., Exact Results For A Finite-Sized Spherical Model Of Ferromagnetism At The Borderline Dimensionality-4, *Phys. Rev. B*, 45:9759, 1992.
- [68] Luijten, E., and H. Blöte, W. J., Classical critical behavior of spin models with long-rangeinteractions, *Phys. Rev. B*, 56:8945, 1997.

- [69] Shapiro, J., and Rudnick, J., The Fully Finite Spherical Model, *J. Stat. Phys.*, 43:51, 1986.
- [70] Binder, K., Critical properties from Monte Carlo coarse graining and renormalization, *Phys. Rev. Lett.*, 47:696, 1981.
- [71] Luijten, E., Binder, K. and Blöte H.W.J., Finite-size scaling above the upper critical dimension revisited: The case of the five-dimensional Ising model, *Eur. Phys. J B*, 9: 289-297, 1999.
- [72] Parisi, G. and Ruiz-Lorenzo, J.J., Scaling above the upper critical dimension in Ising models, *Phys. Rev. B*, 54:3698-3701, 1996.
- [73] Lai, P.-Y. and Mon, K.K., Finite-size scaling of the Ising model in four dimensions, *Phys. Rev. B*, 41:9257-9263, 1990.
- [74] Mülazımođlu Kızılırmak G., Dört boyutlu ising modelin $(18,20,22)_3^4$ ve $(18,20,22)_4^4$ örgülerinde Creutz Cellular Automaton ile incelenmesi, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 2009.
- [75] Erdem. İ., Spin-1/2 Ising modelinin “Creutz Cellular” Automaton programının incelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Pamukkale Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Denizli, 2006.
- [76] Swendsen, R. H., Wang, J-S., Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations, *Phys. Rev. Lett.*, 58:86-88, 1987.
- [77] Binder, K., Landau, D.P., Finite-size scaling at first order phase transitions, *Phys. Rev. B*, 30: 1477-1485, 1984.

- [78] Mouritsen, O., G., Computer Studies of Phase Transitions and Critical Phenomena, Springer, Berlin, 22-26, 1984.
- [79] Challa, M.s.s., Landau, D.P., Binder, K., Finite Size effects at temperature driven first order transitions, Phys. Rev. B, 34: 1841-1852, 1984.
- [80] Bruce, A.D., Probability density functions for collective coordinates in Ising-like systems, J. Phys. C, 14:3688, 1981.
- [81] Martins, P.H.L., Plascak J.A., Probability distribution of the order parameter, Brazilian Journal of Physics, 34:433-437, 2004.
- [82] Wolff, U., Collective Monte Carlo Updating for spin systems, Phys. Rev. Lett. 62, 361, 1989.
- [83] Zabolitzky, J.G., Herrmann, H.J., Multitasking case study on the Cray-2:The Q2R cellular automaton J. Comput. Phys., 76, 426, 1988.
- [84] Privman, V., Fisher, M.E., Universal critical amplitudes in finite-size scaling, Phys. Rev. B, 30, 322, 1984.
- [85] Binder K., Finite-size scaling analysis of Ising model block distribution functions, Z. Phys. B, 43:119-140, 1981.
- [86] Bruce, A.D., Probability density functions for collective coordinates in Ising-like systems , J. Phys. Rev. B. 31:1498-1502, 1985.
- [87] Binder, K., Some recent progress in the phenomenological theory of finite-size scaling and application to Monte Carlo studies of critical phenomena, in Finite-size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems, edited by V. Privman, World Scientific, Singapore, 173-221, 1990.

- [88] Aktekin N., The Finite-size scaling relation for the order-parameter probability distribution of the four-dimensional Ising model, *G.U. Journal of Science* 17:59-70, 2004.
- [89] Privman, V. And Fisher, M. E., Universal critical amplitudes in finite-size scaling, *Phys. Rev. B*, 30: 322-327, 1984
- [90] Privman, V., Finite-size scaling theory, in *Finite-Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems*, edited by V. Privman, World Scientific, Singapore, 1-98, 1990.