

**İKİ VE ÜÇ BOYUTLU BLUME-CAPEL MODELİN
DİNAMİK DAVRANIŞI**

Banu Ebru BİNAL

**DOKTORA TEZİ
FİZİK**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**TEMMUZ 2008
ANKARA**

BANU EBRU BİNAL tarafından hazırlanan İKİ VE ÜÇ BOYUTLU BLUME CAPEL MODELİN DİNAMİK DAVRANIŞI adlı bu tezin Doktora tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.

Prof. Dr. Bülent KUTLU

.....

Tez Danışmanı, Fizik Anabilim Dalı

Bu çalışma, jürimiz tarafından oy birliği / oy çokluğu ile

Anabilim Dalında Yüksek Lisans / Doktora tezi olarak kabul edilmiştir.

Prof. Dr. Ziya B. GÜVENÇ

.....

Fizik, Çankaya Üniversitesi

Prof. Dr. Bülent KUTLU(Danışman)

.....

Fizik, Gazi Üniversitesi

Prof. Dr. Abdullah GÜNEN

.....

Fizik, Gazi Üniversitesi

Prof. Dr. Bora ALKAN

.....

Fizik Müh., Ankara Üniversitesi

Prof. Dr. Mehmet KASAP

.....

Fizik, Gazi Üniversitesi

Tarih: 11/07/2008

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

Prof. Dr. Nermin ERTAN

.....

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 orijinal olmayan her türlü kaynağa atıf yapıldığını bildiririm.

Banu Ebru BİNAL

**İKİ VE ÜÇ BOYUTLU BLUME CAPEL MODELİN DİNAMİK
DAVRANIŞI
(Doktora Tezi)**

Banu Ebru BİNAL

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
Temmuz 2008**

ÖZET

Bu çalışmada, iki ve üç boyutlu Blume Capel model, Creutz cellular automaton'dan (CCA) kare ve basit kübik örgüler için geliştirilen algoritmalar kullanılarak simüle edilmiştir. Modelin dinamik davranışı ($kT_c/J, D/J$) faz uzayının üçlükritik, birinci derece ve ikinci derece özel noktalarında incelenmiştir. Hesaplamalar, $L=20, 40, 60, 80$ ve 100 kenar uzunluklu $L \times L$ kare örgülerde ve $L=8, 10, 12, 16, 18$ ve 20 kenar uzunluklu $L \times L \times L$ basit kübik örgülerde periyodik sınır şartı kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Sonuçlara göre, model özel noktalarda farklı dinamik davranışlara sahiptir. Diğer taraftan iki ve üç boyutlu Spin-1/2 ve Spin-1 Ising modellerin düzen parametresi olasılık dağılımları kritik sıcaklıkta hesaplanmıştır. Düzen parametresi olasılık dağılımı için sonlu örgü ölçekleme ilişkisi CCA 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 her iki model için aynı a fakat farklı c değerleriyle evrensel bir biçime sahiptir.

Bilim Kodu : 202.1.147

Anahtar Kelimeler: Blume -Capel model(BCM), Creutz cellular automaton, dinamik kritik olay

Sayfa Adedi : 117

Tez Yöneticisi : Prof. Dr. Bülent KUTLU

DYNAMICAL BEHAVIOUR OF TWO AND THREE DIMENSIONAL BLUME-CAPEL MODEL

(Ph.D Thesis)

Banu Ebru BİNAL

**GAZI UNIVERSITY
INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY**

July 2008

ABSTRACT

In this study, two and three dimensional Blume Capel model are simulated using the algorithms which improved from the Creutz cellular automaton (CCA) for square and simple cubic lattices. The dynamical behaviour of the model has been investigated for tricritical, first order and second-order points of the $(kT_c/J, D/J)$ phase space. The calculations are carried out on square lattice $L \times L$ of linear dimension $L = 20, 40, 60, 80$ and 100 and simple cubic lattices $L \times L \times L$ of linear dimension $L = 8, 10, 12, 16, 18$ and 20 with periodic boundary conditions. Results show that the model has the different dynamical behaviour on the special points. On the other hand the order parameter probability distribution for 2D and 3D Spin-1/2 and Spin-1 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 CCA 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 with the same a and different c constants for both models.

Science Code : 202.1.147

**Keywords : Blume -Capel model(BCM), Creutz cellular automaton,
dynamic critical pheonema**

Page Number: 117

Adviser : Prof. Dr. Bülent KUTLU

TEŞEKKÜR

Bu tez çalışmasında akademik birikimi ve tecrübesiyle beni yönlendiren ve yardımlarını esirgemeyen değerli hocam Sayın Prof.Dr. Bülent KUTLU'ya,

Gösterdikleri anlayıştan dolayı Daire Başkanım Sayın Halit ONUR'a,

Özellikle iş hayatımdaki görevlerimi kolaylaştıran, bana destek olan tüm iş arkadaşlarıma,

Yaşamımın her aşamasında koşulsuz sevgi ve ilgilerini esirgemeyerek bana destek olan sevgili Anneme ve Babama,

Varlığı ile bana destek olan sevgili Ağabeyime,

Çalışmalarım için bana daima destek olan, ortak yaşamın sorumluluklarını fazlasıyla üstlenerek hayatımı kolaylaştıran değerli hayat arkadaşım Sevgili Eşime,

Ve hayatımın odağı olan, küçücük yaşına rağmen beni anlayışla karşılayan, bu tez ile birlikte büyüyen 5,5 yaşındaki canım Kızım Begüm'e,

İçtenlikle teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖZET.....	iv
ABSTRACT.....	v
TEŞEKKÜR.....	vi
İÇİNDEKİLER.....	vii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ.....	x
ŞEKİLLERİN LİSTESİ.....	xi
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	xv
1. GİRİŞ.....	1
2. FAZ GEÇİŞLERİ VE KRİTİK NOKTALAR	6
2.1. İkinci Derece Faz Geçiş.....	8
2.2. Birinci Derece Faz Geçiş.....	11
2.3. Spin Modelleri.....	12
2.3.1. Spin-1/2 Ising modeli.....	12
2.3.2. Spin-1 Ising model.....	14
2.4. Termodinamik Nicelikler ve Kritik Üsler.....	16
2.5. Sonlu Örgü Ölçekleme Teorisi.....	18
2.5.1. Termodinamik nicelikleri için sonlu örgü ölçekleme bağıntıları.....	19
2.6. Dinamik Olay ve Dinamik Kritik Üsler.....	21
2.6.1. Zamana bağlı korelasyon fonksiyonu ve durulma zamanı.....	24
2.6.2. Dinamik sonlu örgü ölçeklemesi ve kritik sıcaklık.....	26
2.7. Düzen Parametresi Olasılık Dağılımı Fonksiyonu.....	27
2.7.1. Düzen parametresi olasılık dağılımı sonlu örgü ölçeklemesi.....	29

Sayfa

3. MODEL	32
3.1. Cellular Automaton	32
3.2. Cellular Automaton Algoritmaları	35
3.2.1. Standart algoritma	35
3.2.2. Soğutma algoritması	40
3.2.3. Isıtma algoritması	42
4. BULGULAR ve TARTIŞMA	44
4.1. Basit kare örgüde $D/J=0$ parametre uzayındaki statik kritik üslerin soğutma oranına bağlı olarak hesaplanması.....	45
4.2. İkinci derece faz geçiş bölgesinde ($D/J=0$) dinamik kritik üs hesabı ve algoritma bağımlılığı.....	52
4.2.1. Basit kare örgüde dinamik kritik üs z hesabı	56
4.2.2. Basit kübik örgüde dinamik kritik üs z hesabı	61
4.3. Üçlü kritik noktada dinamik kritik üs hesabı ve algoritma bağımlılığı.....	66
4.3.1. 2 boyutta üçlü kritik nokta civarında algoritma bağımlılığı ve dinamik davranış	69
4.3.2. 3 boyutta üçlü kritik noktada algoritma bağımlılığı ve bu noktadaki dinamik davranış.....	74
4.4. Birinci derece faz geçiş bölgesinde dinamik kritik üs hesabı ve algoritma bağımlılığı.....	80
4.4.1. 2 boyutlu BCM'in standart ve soğutma algoritmaları için birinci derece faz geçiş bölgesinde dinamik davranışı.....	80
4.4.2. 3 boyutlu BCM'in standart ve soğutma algoritmaları için birinci derece faz geçiş bölgesinde dinamik davranışı	83
4.5. Düzen parametresi olasılık dağılım fonksiyonlarından kritik sıcaklık tayini ve analitik ifadesindeki parametrelerin bulunması.....	87

	Sayfa
4.6. Kritik noktada dinamik kritik üs hesabı.....	102
5. SONUÇLAR	105
KAYNAKLAR	107
ÖZGEÇMİŞ	116

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 2.1. Termodinamik nicelikler ile ilgili kritik üsler	18
Çizelge 4.1. $D/J=0$ parametre uzayında basit kare örgü için bulunan değerler.....	60
Çizelge 4.2. $D/J=0$ parametre uzayında basit kübik örgü (3d) için farklı yöntemlerle bulunan T_C literatür değerler	62
Çizelge 4.3. $D/J=0$ parametre uzayında basit kübik örgü için bulunan değerler.....	64
Çizelge 4.4. $D/J = 1,96, 1,97$ parametre uzayında bulunan dinamik kritik üsler.....	73
Çizelge 4.5. $D/J = 2,82$ parametre uzayında bulunan dinamik kritik üsler.....	77
Çizelge 4.6. $D/J = 1,98$ parametre uzayında bulunan dinamik kritik üsler.....	82
Çizelge 4.7. $D/J = 2,9$ parametre uzayında farklı soğutma hızları için bulunan dinamik kritik üsler.....	86
Çizelge 4.8. Sonsuz örgü kritik sıcaklık değerleri.....	96
Çizelge 4.9. Analitik sonlu örgü ölçekleme fonksiyonunun parametreleri için, bu fonksiyonun L örgü boylarına ait düzen parametresi olasılık dağılımlarının sonlu örgü ölçekleme çizimlerine uydurulmasıyla elde edilen değerler.....	98
Çizelge 4.10. Metropolis algoritması kullanılarak basit kübik Spin-1 Ising Model'in sonsuz örgü kritik sıcaklığında bulunmuş değerler.....	99
Çizelge 4.11. Swendsen-Wang cluster algoritması kullanılarak basit kübik Ising Model'in sonsuz örgü kritik sıcaklığında bulunmuş değerler.....	99
Çizelge 4.12. Analitik sonlu örgü ölçekleme fonksiyonunun c parametresi için, Eşitlik 2.52'ye göre yapılan doğrulama değerleri.....	101

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.1. Kendiliğinden manyetizasyonun ($ M $) sıcaklıkla değişimi.....	7
Şekil 2.2. $P(M)$, düzen parametresi, alınganlık ve iç enerjinin ikinci derece faz geçiş bölgesindeki davranışı	9
Şekil 2.3. İkinci derece faz geçişinde a) düzen parametresi olasılık dağılımı $P(M)$ ve b) serbest enerji $F(M)$ ' nin kritik sıcaklık civarındaki davranışı.....	10
Şekil 2.4. Birinci derece faz geçişinde a) düzen parametresi olasılık dağılımı $P(M)$ ve b) serbest enerji $F(M)$ ' nin kritik sıcaklık civarındaki davranışı.....	11
Şekil 2.5. Ferromanyetik bir sistemde “domain”lerin durumu (a) $T < T_C$ (b) $T \approx T_C$ (c) $T > T_C$	23
Şekil 2.6. İkinci derece faz geçiş bölgesinde $P(m)$ fonksiyonunun değişimi.....	28
Şekil 3.1. 3 - boyutlu Blume Capel modelin Creutz Cellular Automaton algoritmasından türetilen standart ve soğutma algoritmaları ile elde edilen $(kT_C/J, d)$ faz diyagramı	34
Şekil 3.2. $J=-1, K=D=L=0$ parametre seti için taban durum konfigürasyonunun tespiti ve iç enerjideki değişim, ΔH_1	37
Şekil 3.3. Standart algoritmanın akış çizelgesi	38
Şekil 3.4. Değişim algoritmasının akış çizelgesi	39
Şekil 3.5. Soğutma algoritmasının akış çizelgesi	41
Şekil 3.6. Isıtma algoritmasının akış çizelgesi	42
Şekil 4.1. $(kT/J, U_L)$ grafiklerinin kesim noktasından tespit edilen kritik sıcaklıklar.....	46
Şekil 4.2. $D/J=0$ parametre uzayında 0,01 Hk, 0,02 Hk, 0,03 Hk, 0,04 Hk soğutma oranları için Binder kümülanının ölçeklenmesi.....	47
Şekil 4.3. $D/J=0$ parametre uzayında 0,01 Hk, 0,02 Hk, 0,03 Hk, 0,04 Hk soğutma oranları için düzen parametresinin ölçeklenmesi.....	48

Şekil	Sayfa
Şekil 4.4. $D/J=0$ parametre uzayında 0,01 Hk, 0,02 Hk, 0,03 Hk, 0,04 Hk Soğutma oranları için manyetik alınganlığın ölçeklenmesi.....	49
Şekil 4.5. $D/J=0$ parametre uzayında $T>T_C$ de 0,01 Hk, 0,02 Hk, 0,03 Hk, 0,04 Hk soğutma oranları için özısının ölçeklenmesi.....	50
Şekil 4.6 $D/J=0$ parametre uzayında $T>T_C$ de 0,01 Hk, 0,02 Hk, 0,03 Hk, 0,04 Hk soğutma oranları için özısının ölçeklenmesi.....	51
Şekil 4.7. $T \geq T_C$ bölgesinde $\phi_M(t)$ nin t zamanına karşı değişimi	54
Şekil 4.8.(a). $\ln \phi_M(t)$ nin t zamanına karşı değişiminden en büyük τ' 'nin bulunması (b). Bulunan değerlerin yerine konularak ($\phi_M(t)$) ile uyumluluğu.....	55
Şekil 4.9. $L=20$ kenar uzunluğuna sahip basit kübik örgüde τ_M 'nin $\varepsilon=(T-T_C(L))/T_C(L)$ ye karşı değişimi.....	56
Şekil 4.10. z 'nin $1/L^{1/\nu}$ ye karşı değişimi	57
Şekil 4.11. $T=T_C(L)$ için $\log(\tau(L))$ ' nin $\log(L)$ ye karşı değişimi.....	58
Şekil 4.12. $\log(\tau L^{-z})$ ' nin $\log(\varepsilon L^{1/\nu})$ ye karşı değişimi.....	59
Şekil 4.13. $T_C(L)$ ' nin $1/L$ ye karşı değişimi(2d).....	60
Şekil 4.14. $T_C(L)$ ' nin $1/L$ ye karşı değişimi(3d).....	61
Şekil 4.15. $z(L)$ ' nin $1/L^{1/\nu}$ ye karşı değişimi.....	63
Şekil 4.16. $T=T_C(L)$ için $\log(\tau(L))$ ' nin $\log(L)$ ye karşı değişimi.....	64
Şekil 4.17. $\log(\tau L^{-z})$ ' nin $\log(\varepsilon L^{1/\nu})$ ye karşı değişimi.....	65
Şekil 4.18. Blume Capel modelin soğutma algoritması kullanılarak bulunan faz diyagramı	66
Şekil 4.19. 2 boyutlu BCM'in faz diyagramında yer alan $D/J=1.96, 1.97$ ve 1.98 in 0.01 HK soğutma oranı için yapılan simülasyonuna göre elde edilen (a).M,Q, (b). E grafiği	67

Şekil	Sayfa
Şekil 4.20. 3 boyutlu BCM'in faz diyagramında yer alan $D/J=0, 2, 2,82, 2$ ve $2,9$ un $0,01H_K$ soğutma oranı için yapılan simülasyonuna göre elde edilen M, Q grafiği.....	68
Şekil 4.21. 3 boyutlu BCM'in faz diyagramında yer alan $D/J=0, 2, 2,82$ ve $2,9$ un $0,01H_K$ soğutma oranı için yapılan simülasyonuna göre elde edilen E grafiği.....	69
Şekil 4.22. 2 boyutlu BCM'in faz diyagramında yer alan $d=1,96$ ve $1,97$ nin standart ve $0,01H_K$ soğutma oranı için yapılan simülasyonuna göre elde edilen M, Q grafiği.....	70
Şekil 4.23. 2 boyutlu BCM'in faz diyagramında yer alan (a) $d=1,96$ (b) $d=1,97$ nin $0,01H_K$ soğutma oranı için yapılan simülasyonuna göre düzen parametresinin ölçeklenmesi.....	71
Şekil 4.24. 2 boyutlu BCM'in faz diyagramında yer alan $D/J=1,96$ ve $1,97$ nin standart ve $0,01H_K$ soğutma oranı için elde edilen (a) $0,01$ SO için z , (b) standart için z , (c) $D/J=1,96$ ve (d) $D/J=1,97$ $T=T_C(L)$ için $\log(\tau(L))$ ' nin $\log(L)$ ye karşı değişimi grafiği	72
Şekil 4.25. 3 boyutlu BCM'in üçlü kritik noktasının standart, $0,005$ SO ve $0,01$ SO için a). M, Q b). Enerji grafikleri.....	75
Şekil 4.26. 3 boyutlu BCM'in üçlükritik noktasının (a) $0,01$ SO (b) $0,005$ SO için simülasyonuna göre düzen parametresinin ölçeklenmesi.....	76
Şekil 4.27. 3 boyutlu BCM'in üçlü kritik noktasının standart, $0,005$ SO ve $0,01$ SO için yapılan simülasyonuna göre elde edilen a) z_{eff} ve b) $T=T_C(L)$ için $\log(\tau(L))$ ' nin $\log(L)$ ye karşı değişimi grafiği.....	78
Şekil 4.28. 3 boyutlu BCM'in üçlükritik noktasında soğutma algoritması ile bulunan $\ln \tau - \ln \varepsilon$ grafiği.....	79
Şekil 4.29. 2 boyutlu BCM'in $d=1,98$ faz uzayında standart ve $0,01$ SO için yapılan simülasyonuna göre elde edilen a). M, Q b.) $P(M)$ grafiği.....	81
Şekil 4.30. 2 boyutlu BCM'in $d=1,98$ faz uzayında $0,01$ SO için çizilen $\ln(\chi_{mak})$ ın $\ln L$ ye karşı grafiği	82
Şekil 4.31. 2 boyutlu BCM'in $d=1,98$ faz uzayında standart ve $0,01$ SO için yapılan simülasyonuna göre z_{eff} ve $T=T_C(L)$ için $\log(\tau(L))$ ' nin $\log(L)$ ye karşı değişimi grafiği.....	83

Şekil	Sayfa
Şekil 4.32. 3 boyutlu BCM'in $d=2,9$ faz uzayında standart, 0,01 SO ve 0.05 SO için yapılan simülasyonuna göre elde edilen a). M,Q b.)P(M) grafiği...	84
Şekil 4.33. 3 boyutlu BCM'in $d=2,9$ faz uzayında 0,01 SO için çizilen $\ln(\chi_{\text{mak}}, C_{\text{mak}})$ ın $\ln L$ ye karşı grafiği.....	85
Şekil 4.34. 3 boyutlu BCM'in $d=2,9$ faz uzayında standart, 0,01 SO için yapılan simülasyonuna göre z_{eff} ve $T=T_C(L)$ için $\log(\tau(L))$ ' nin $\log(L)$ ye karşı değişimi grafiği.....	86
Şekil 4.35. 2 boyutlu a) Blume Capel modelin b) Ising modelin $T=T_C(L)$ için P(M)' nin M'ye karşı değişimi.....	89
Şekil 4.36. 3 boyutlu a) Blume Capel modelin b) Ising modelin $T=T_C(L)$ için P(M)' nin M'ye karşı değişimi	90
Şekil 4.37. Düzen parametresi olasılık dağılımının P(M), $T=T_C(L)$ için M'ye karşı sonlu örgü ölçeklemesine göre çizimi a) 2 boyutlu BCM, b) 2 boyutlu IM, c)3 boyutlu BCM ve d) 3 boyutlu IM.....	92
Şekil 4.38. P(M)'nin, $T=T_C(L)$ için M'ye karşı analitik ifadesine göre yapılan fit a)2d BCM, $L=128$, b) 2d IM, $L=512$, c) $L=128$ için P(M) ve fit'in farkı d) $L=512$ için P(M) ve fit'in farkı.....	94
Şekil 4.39. P(M)'nin, $T=T_C(L)$ için M'ye karşı analitik ifadesine göre yapılan fit a)3d BCM, $L=20$, b) 3d IM, $L=64$, c) $L=20$ için P(M) ve fit'in farkı d) $L=64$ için P(M) ve fit'in farkı.....	95
Şekil 4.40. $T_C(L)$ nin $1/L^{1/\nu}$ ye karşı değişimi. a). 2 boyutlu BCM ve IM b) 3 boyutlu BCM ve IM.....	97
Şekil 4.41. BCM için 3 boyutta a)sonsuz örgü kritik noktasından, b) her örgünün kendi örgü kritik sıcaklığından bulunan z değerleri.....	103
Şekil 4.42. 2 boyutta BCM'nin kendi örgü kritiklerinden bulunan z grafiği.....	103
Şekil 4.43. IM için a.) 2 boyutta c.) 3 boyutta kendi örgü kritiklerinden bulunan z grafikleri.....	104

SİMGELER VE KISALTMALAR

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

Simgeler	Açıklama
$\langle \rangle$	Beklenen Değer ve Ortalama
J	Bilineer Etkileşme Parametresi
U_L	Binder Kümülanı
k_B	Boltzmann Sabiti
z	Dinamik kritik üs
K	Dört kutuplu Etkileşme Parametresi
T_t	Geçiş Sıcaklığı
ε	İndirgenmiş Sıcaklık
ν	Korelasyon Uzunluğu Kritik Üssü
D	Kristal Alan Parametresi
T_C	Kritik Sıcaklık
M	Manyetizasyon
χ	Manyetik Alınganlık
γ, γ'	Manyetik Alınganlık Kritik Üssü
β, β'	Manyetizasyon Kritik Üssü
C	Özısı
α, α'	Özısı Kritik Üssü
T	Sıcaklık
∞	Sonsuz
d	Uzay Boyutu

Kısaltmalar	Açıklama
BEG	Blume Emery Griffiths
BC	Blume Capel
CA	Cellular Automaton
CCA	Creutz Cellular Automaton
BA	Bethe Yaklaşımı
MFA	Ortalama Alan Yaklaşımı
MC	Monte Carlo
RG	Renormalizasyon Grup Teorisi
MCRG	Monte Carlo Renormalizasyon Grup Teorisi
ÜKN	Üçlü Kritik Nokta

1. GİRİŞ

Bir malzemenin mekanik davranışları ve fiziksel özellikleri, o malzemenin mikroyapısına bağlı olarak değişir. Bir metal alaşımının mikroyapısı ise mevcut fazların sayısına, bu fazların oranlarına ve fazların dağılımına bağlı olarak tanımlanır ve alaşım elementlerinin kimyasal içeriğine, sıcaklığa ve soğutma hızına bağlı olarak değiştirilebilir. Dolayısıyla bir malzemenin mikroyapısını tanımlamak mühendislik açısından çok önemlidir. 20. yüzyılda fiziğin en önemli problemleri çok parçacıklı sistemlerin davranışlarının anlaşılması ile ilgilidir. Bilgisayar simülasyonları ve yaklaşım teknikleri kullanılarak yapılan teorik çalışmalar, deneysel çalışmalara yardımcı ve yol gösterici sonuçlar vermesi nedeniyle büyük önem taşımaktadır. Bu tarz çalışmalar elde edilen sonuçlar açısından, yapıların aydınlatılmasında ve yeni malzemelerin geliştirilmesinde, deneysel çalışmalarla paralel hatta onların önünde yürütülmektedir. Üretilmesi düşünülen yeni bir malzeme ile ilgili yapılan simülasyon hesaplamaları yani bilgisayar deneyleri, üretim şartlarının belirlenmesine yardımcı olarak, maliyeti çok yüksek olan deneysel üretim aşamasında teşebbüs sayısının azaltılmasına imkan vermektedir. Özellikle istatistik mekanik konusunda son yıllarda önemli başarılar sağlanmış ve fiziğin temel problemlerini çözmeye yönelik teknikler geliştirilmiştir. Manyetik sistemlerin anlaşılması, “Big-Bang” olayında enerjinin maddeye dönüşmesi, nötron yıldızlarının içindeki oluşumların incelenmesi gibi birbirinden çok farklı görünen olaylar istatistik mekanik açısından benzer özellik taşırlar ve aynı teknikleri kullanarak çözüm elde edilebilir. Örneğin, kritik nokta civarında termodinamik niceliklerin davranışları ve manyetik faz geçişleri istatistik mekanik çerçevesinde bir çok teorik ve sayısal model ile incelenmektedir. Faz geçişi, maddelerin belirli bir sıcaklıktaki durumlarında meydana gelen ani değişikliktir. Faz geçişi meydana gelen maddelere demir (Fe), kobalt (Co) ve nikel (Ni) gibi metaller örnek verilebilir. Bu maddeler kritik sıcaklık olarak adlandırılan faz geçiş sıcaklığının altında ferromanyetik bir davranış sergilerken bu sıcaklığın üzerinde paramanyetik davranış gösterirler. Yani kritik sıcaklığın altında bu metallerdeki atom spinleri bir manyetik alan oluşturacak şekilde aynı yöne kutuplanırken, kritik sıcaklığın üstünde ise spinler net bir manyetik alan oluşmayacak şekilde rasgele yönelirler.

Termodinamik, fazın ve faz geçişinin genel ifadesini verir. Bir sistemin fazları kararlı, yarı kararlı veya kararsız termodinamik durumlarıdır. Termodinamik yaklaşımla faz geçişi bir fazdan; sıcaklık (T), basınç (P), manyetik alan (H) gibi parametrelerdeki değişimle meydana gelen diğer bir faza geçiş olarak tanımlanabilir. Ferromanyetik sistemlerdeki faz geçişlerinin taklit edilebilmesi için önerilen spin-1/2 Ising modelin 1925 yılında Lenz' in öğrencisi E. Ising tarafından bir boyutlu uzayda ($d=1$), 1944' de Onsager tarafından dış manyetik alan olmadığı durumda iki boyutlu uzayda ($d=2$) analitik çözümü yapılmıştır[1]. Ising model, çok parçacıklı sistemleri tanımlayan en basit modeldir. Ising modelin en basit hali iki durum ve bir düzen parametresine sahip bir sistem olan en yakın komşu etkileşmeli iki boyutlu spin-1/2 Ising modelidir. Ising modelin çözümü, ikili alaşım ve örgü gaz modelleri ona eşdeğer olarak incelenebildiğinden oldukça önemlidir[2,3]. Ancak en yakın komşu etkileşmeli spin-1/2 Ising modelin dışındaki etkileşme Hamiltonyenleri için tam çözüm yapılamamaktadır. Bu yüzden, bu tür istatistik sistemlerin incelenmesinde seriye açılım[4], etkin alan teorisi[5], renormalizasyon grup teori[6-8], Monte Carlo[9,10], "cluster variation"[11], ortalama alan teorisi[12], cellular automaton[13] gibi çeşitli sayısal simülasyon metotları ve yaklaşık teknikler kullanılarak yapılan hesaplamalar önemli bir yer tutmaktadır. 1971 yılında Blume, Emery ve Griffiths tarafından ortalama alan yaklaşımı ile tamamlanmamış spin-1 Ising modeli tanımlanarak üç durumlu bir sistem olan $\text{He}^3\text{-He}^4$ karışımına uygulanmıştır[14]. Spin-1/2 Ising modelden daha zengin bir faz diyagramına ve çoklu kritik noktalara sahip olan spin-1 Ising model, gaz-sıvı-katı sistemlere[15]; hamiltonyenine çift kutup-dört kutup etkileşim terimi (L) eklenerek de çok bileşenli akışkanlar ve sıvı kristal karışımlara[15-17], yarıiletken alaşımlara[18] ve ferromanyetik ve antiferromanyetik ikili alaşımlara[19] uygulanmıştır.

Ising modelin Cellular automatonda simülasyonunu mümkün kılan algoritma ilk olarak Creutz tarafından 1986 yılında ortaya konulmuştur. Bu algoritma, kanonik Monte Carlo ve moleküler dinamik arasında yer alan mikrokronik bir algoritmadır. Creutz algoritmasında iç enerji ve kinetik enerji, toplam enerji korunacak şekilde değişmektedir. Rastgele bir sayı üreticisine ihtiyaç duymayan ve tam sayılar ile işlem yapan bu algoritma Monte Carlo gibi yöntemlerden on kat hızlı çalışmaktadır[24].

Cellular Automaton, doğal sistemler için matematiksel bir modeldir. Bu model için ilk temel teoriler Wolfram tarafından verilmiştir[20]. Bu model, kullanılan diğer modellerden daha farklıdır. "Cellular Automaton" (CA)'da uzay ve zaman kesikli değerlere sahiptir ve sonsuza kadar genişletilebilen düzenli bir hücre örgüsünden oluşur. Örgünün her bir hücresinde kesikli değerler alabilen değişkenler yer almaktadır. Bir "CA" hali bu hücre değişkenlerinin değerleri ile belirlenmektedir. En belirgin durumlarda CA örgüsü konum uzayındadır. Mikroskobik seviyede her bir konum kristal örgüdeki spin bileşeni gibi kesikli ölçülebilirler veya atom tiplerine karşılık gelen noktaları temsil edebilir. Bu yüzden Ising model ve diğer örgü spin sistemleri basit bir "cellular automaton" dır. Daha genel olarak makroskobik seviyede her hücre bir çok molekül ihtiva eden bir bölgeyi temsil edebilir, ve onun değeri birkaç mümkün farklı fazdan birine karşılık gelebilir, Ising modelin ve çeşitli fiziksel problemlerin "cellular automaton" olarak simülasyonu Vichniac tarafından önerilmiş ve iki boyutlu kare örgüler için komşuluktaki hücrelerin, sayısına ve konumuna bağlı olarak bir çok cellular automaton kuralı isimlendirilmiştir[21]. Vichniac'ın Ising Model için önerdiği kural Pomeau ve Herrmann tarafından Q2R cellular automaton olarak geliştirilmiştir[22,23]. Q2R algoritmasında sistemi tanımlayan hamiltonyen spin-spin etkileşme enerjisinden oluşmaktadır. Algoritmada iç enerji simülasyon süresince korunduğundan, özısı hesabını iç enerji dalgalanmalarını kullanarak hesaplamak mümkün olmamaktadır. Bu kısıtlama iç enerji ve spine eşlenik momentuma karşılık gelen kinetik enerjinin toplamının korunduğu Creutz algoritması ile ortadan kalkmaktadır. Bugüne kadar standart cellular automaton algoritması ile Ising model, BEG model ve Blume Capel modelin simülasyonu yapılarak statik üsleri belirlenmiş ve modeller incelenmiştir[13,39,74,109]. Ayrıca Ising modelin cellular automatonda dinamik davranışı standart algoritma kullanılarak 2 boyutta[37,74,79] ve 3 boyutta[37,74,107] incelenerek ortaya konmuştur. Son yıllarda yapılan çalışmalarda 3 boyutlu BC modelin faz yapısı incelenerek standart algoritmanın birinci derece faz geçişlerinde ortaya çıkan yarı kararlı durumların elde edilmesinde uygun olmadığı tespit edilmiş ve standart algoritmayı temel alan yeni algoritmalar (soğutma ve ısıtma) geliştirilmiştir[40,76]. Son yıllarda basit örgü modelleri için statik kritik olay ile ilgili yapılan araştırmalar yeterli derecede bilginin elde edilmesini sağlamıştır. Ancak

kritik sıcaklık (T_C) yakınlarında bu modellerin zamana bağlı davranışları hakkında çok fazla araştırma olmadığından yeterli bilgi de yoktur. İstatistik mekanik sistemlerin dinamik davranışı deneysel ve teorik fizik açısından oldukça önemlidir. Dinamik olay çok karmaşık bir problemdir ve statik olaydan daha geniş uygulamalara sahiptir. Örneğin difüzyon, dalga yayılımı, ışığın veya nötronların elastik olmayan saçılmaları gibi olaylar dinamik olarak çalışılabilmektedir. Literatürde dinamik kritik üs için daha önce 2 boyutta[27,30-36,86-97] ve 3 boyutta[33,36-39,] çeşitli modellerde farklı yöntemler kullanılarak değişik çalışmalar yapılmıştır. Bu çalışmalardan dinamik davranışın algoritmaya bağlı olarak değiştiği görülmektedir. Monte Carlo algoritmalarından Metropolis ve Heat-Bath gibi global algoritmalarındaki dinamik davranış ile Swendsen-Wang ve Uli-Wolff gibi local algoritmalarındaki dinamik davranış birbirinden farklıdır[110]. Bunun temel nedeni olarak, global algoritmalarda ortaya çıkan “kritik yavaşlama” probleminin cluster (lokal) algoritmalarında ortaya çıkmamasıdır. Bu düşünceden hareketle cellular automaton algoritmalarının dinamik davranışının incelenmesi amaçlanmıştır. Blume Capel modelin farklı cellular automaton ile simülasyonu yapılarak dinamik davranışının incelenmesi ilk kez bu çalışma kapsamında yapıldı. Bu bağlamda, dinamik davranış farklı cellular automaton algoritmaları(standart, soğutma ve ısıtma) için algoritmalarındaki dinamik davranış farkı ve soğutma oranının dinamik davranış üzerindeki etkisinin test edilmesi için incelendi.

Tez çalışmasında 2 ve 3 boyutlu Blume Capel Model’in dinamik davranışı; ikinci derece, birinci derece ve üçlü kritik noktada Cellular automaton algoritması kullanılarak ortaya konulmuştur. Tez kapsamında doğruluğu statik olay için test edilmiş olan soğutma ve ısıtma algoritmalarının dinamik davranışları incelenmiştir. Hesaplamalar $D/J = 0, 1.96, 1.97$ ve 1.98 parametre uzayında $L=20,40,60,80,100$ kenar uzunluklu basit kare ve $D/J = 0, 2.82$ ve 2.9 parametre uzayında $L=8,10,12,14,16,18,20$ kenar uzunluklu basit küp örgüler üzerinde periyodik sınır şartlarında, spin başına ve 1 000 000 CA zaman adımı üzerinden ortalama alınarak gerçekleştirilmiştir.

Düzen parametresi olasılık dağılımı, tam kritik sıcaklık noktasında eşit iki pik gösterir. Bu, örgünün kritik sıcaklığını tam olarak belirleyebilmek açısından önemlidir. Tez çalışması kapsamında 2 ve 3 boyutta Ising Model ve Blume-Capel Model için düzen parametresi olasılık dağılımı $P(M)$ fonksiyonu kullanılarak tam kritik noktada dinamik kritik üs hesabı yapılmıştır. Ayrıca, Ising Modelin düzen parametresinin olasılık dağılımı $P(M)$ için sonlu örgü ölçekleme fonksiyonunun bilinmesi düzen parametresinin bütün moment ve kümülanlarının hesaplanmasını mümkün kılar. Bundan dolayı bu ifadelerin analitik fonksiyonları önemlidir. Ancak d uzay boyutu olmak üzere, $d < 4$ için sonlu örgü ölçekleme fonksiyonlarının analitik ifadeleri yoktur. Sonsuz örgü kritik sıcaklığında basit analitik fonksiyonlara fit yapılarak fonksiyon parametrelerini (a ve c) bulmak için çalışmalar yapılmıştır[41]. Tez çalışması kapsamında daha önce Monte Carlo yöntemi kullanılarak hesaplanmış olan bu parametreler cellular automaton yöntemi kullanılarak hesaplanmıştır. Analitik fonksiyondaki a sabitinin evrensel olduğu, c sabitinin ise evrensel olmadığı gösterilmiştir. Hesaplamalar Spin $\frac{1}{2}$ Ising Model ve Blume Capel Model'in $D/J = 0$ parametre uzayında $L=64, 128, 160, 256$ ve 512 kenar uzunluklu basit kare ve $L=16, 20, 24, 32$ ve 64 kenar uzunluklu basit küp örgüler üzerinde periyodik sınır şartlarında, ortalama 50×10^6 CA zaman adımı üzerinden ortalama alınarak gerçekleştirilmiştir.

Bu çalışmada, 2 ve 3 boyutta Blume Capel modelin ikinci derece faz geçişi, birinci derece faz geçişi gösteren parametre uzaylarında ve özel noktalarda cellular automaton algoritmalarındaki davranışının incelenmesi ve kritikteki $P(M)$ fonksiyonları çizilerek analitik fonksiyon sabitlerinin tespit edilmesi hedeflenmektedir.

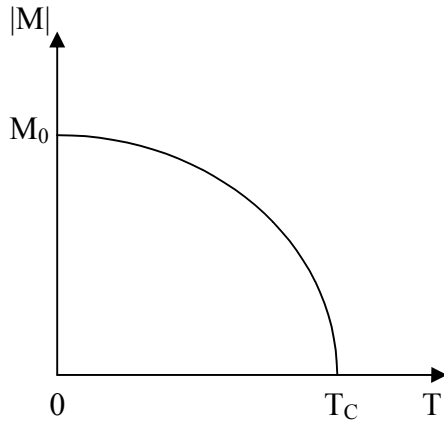
2. FAZ GEÇİŞLERİ VE KRİTİK OLAY

Doğadaki pek çok sistem faz geçişi gösterir. Faz geçişleri teorisinde başlıca araştırma problemlerinden biri, V hacmi içerisinde bulunan N parçacıklı makroskopik bir sistemin kritik nokta (örneğin, T kritik sıcaklığı, kritik basıncı, kritik yoğunluğu vb.) civarındaki davranışının incelenmesidir. Böyle bir sistemin, kritik noktanın altında, kritik nokta civarında, kritik noktanın üstünde farklı ya da karışık fazlarda bulunmasına (yani, sistemin bir fazdan başka bir faza geçişine) sebep olan en önemli unsur, parçacıklar arasındaki etkileşimlerdir. Kısa ya da uzun menzilli bu etkileşimlerin varlığı altında, sistemin termodinamik davranışını betimleyen termodinamik fonksiyonları, etkileşimlerin olmadığı durumun aksine, kritik nokta civarında analitik süreksizlikler ve tekillikler gösterirler.

Herhangi bir makroskopik sistemin kritik davranışı, parçacıkları arasında mevcut olan kısa ya da uzun menzilli etkileşimlerin varlığı altında, tüm parçacıkların ortaklaşa hareketinin bir sonucudur ve dolayısıyla bu tür fiziksel olayların incelenmesiyle ilişkili matematiksel problemler her yönüyle son derece güçtür. Yine de, bazı matematiksel güçlüklerle rağmen, sistemin parçacıklarının ortaklaşa hareketinden kaynaklanan karakteristik özelliklerini ortaya koyabilen, fakat hesapları kolaylaştırmak için parçacıklar arasındaki etkileşimlerin oldukça basitleştirildiği çeşitli modeller öne sürülebilir. Faz geçişlerinin nicel olarak incelenebildiği bu modellerden bazıları şunlardır: Ising model, Spin-1 Ising model, Heisenberg modeli, XY modeli, n -vektör modeli, örgü gazı, ikili alaşımlar, Potts modeli, Gauissien ve küresel modeller vb.

Kritik olayları nitel olarak betimlemek amacıyla kritik üsteller adı verilen nicelikler tanımlanabilir. Bu amaçla, verilen bir sisteme ait olan çeşitli fiziksel niceliklerin kritik noktada tekilliklere sahip olması nedeniyle sistemin kritik nokta civarındaki davranışının nitel yapısını belirleyen ve kritik üsteller ile karakterize edilen kuvvet yasaları kullanılabilir. Bu durum, sistemin termodinamik fonksiyonlarının kritik nokta civarında seri açılımı biçiminde ifade edilebilmesi ile mümkündür.

Sıcaklık ve dış manyetik alan gibi sürücü parametrelerinin değişmesi maddenin bulunabileceği fazlar arasında geçiş yapmasına neden olur. Bazı sistemlerde fazlar arasında kesin bir ayırım yapmak mümkün olmayabilir. Bazı sistemler için bir fazdan diğer faza geçişte belirgin bir değişim olmasına ve bu geçişin makroskopik görüntüsünün geçişi tanımlamaya yeterli olmasına rağmen, bilimsel anlamda faz geçişlerini tartışabilmek için sistemin bir düzen parametresiyle tanımlanması gerekmektedir. Düzen parametresi sistemin öyle bir özelliği olmalıdır ki, fazlar arasında keskin bir değişim göstermeli, bir fazda “sıfır” iken diğer fazda sıfırdan farklı bir değer almalıdır. Bu tarz düzen parametrelerine örnek sıvı-katı veya sıvı-gaz faz geçişi için yoğunluk farkı, manyetik sistemler için manyetizasyon (M) olarak tanımlanır. Düzen parametresinin en keskin değişimi gösterdiği yer faz geçiş noktasıdır. Örneğin, suyun kaynama sıcaklığı olan 100 C’nin üzerine çıkıldığında yoğunluk aniden değişir ve suyun bulunduğu durum sıvıdan gaza geçer. Sistemin sahip olduğu fazın bu örnekteki gibi bir fazdan diğer faza değişmesine “faz geçişi” adı verilir. Faz geçişleri ile ilgili yapılan araştırmalar yoğun madde fiziğinin önemli çalışma konularından birini oluşturmaktadır. Faz geçişi meydana gelen manyetik maddelere demir (Fe), nikel (Ni) ve kobalt (Co) gibi maddeler örnek verilebilir. Bu metaller manyetik alanın olmadığı durumlarda bile kendiliğinden oluşmuş manyetik momente sahiptirler. Bir dış manyetik alan yokken maddelerin mıknatıslanmaya sahip olma özelliğine kendiliğinden mıknatıslanma denir ve mıknatıslanmanın sıcaklığa bağlı değişim eğrisi aşağıdaki gibi verilir.



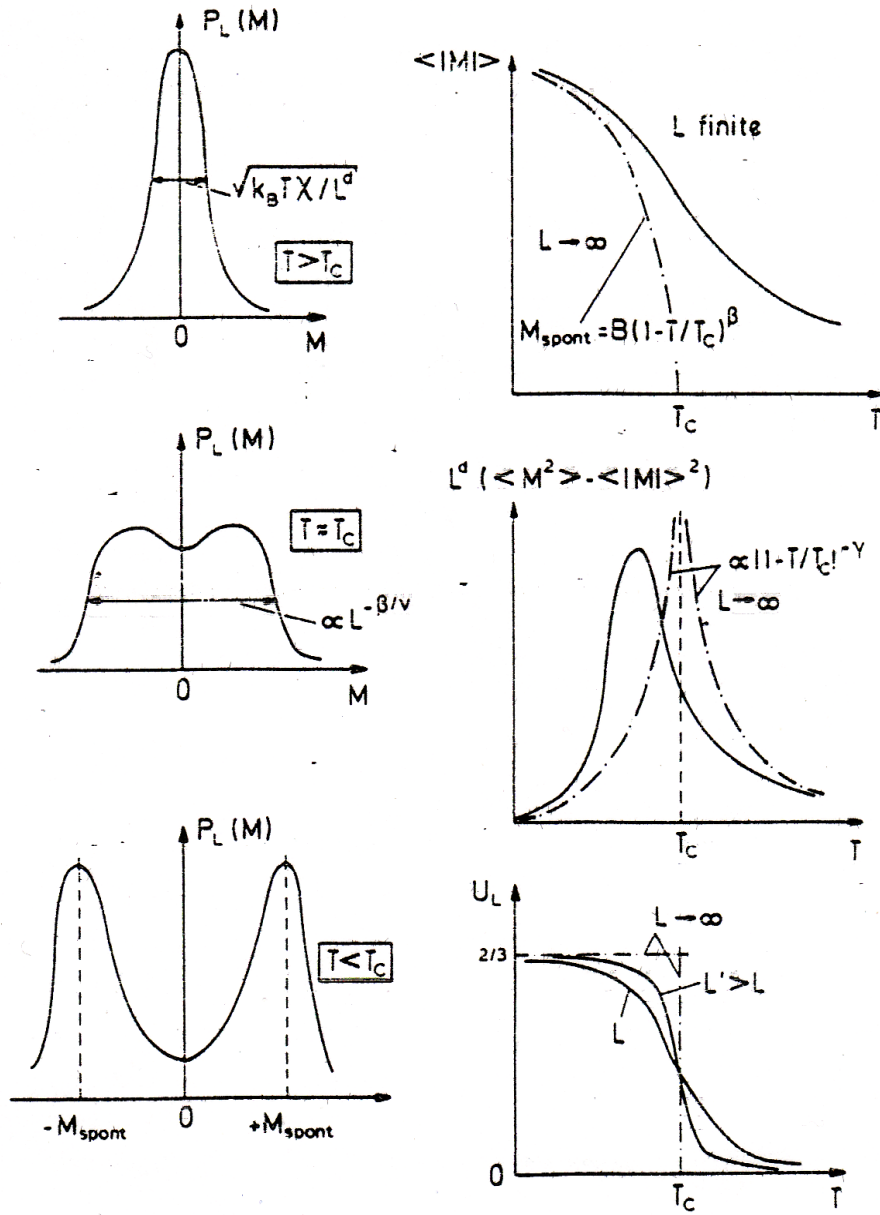
Şekil 2.1. Kendiliğinden manyetizasyonun ($|M|$) sıcaklıkla değişimi. (T_C :kritik sıcaklıktır)

Şekil 2.1.den de anlaşılacağı gibi kendiliğinden mıknatıslanma mutlak sıfırda en büyük değerini alırken, sıcaklık arttıkça sürekli bir şekilde azalarak kritik sıcaklıkta sıfır olur. Kritik sıcaklığın üzerinde ise spinler gelişigüzel yönelime sahiptir ve sistem belirli bir düzendedir. Dolayısıyla kritik sıcaklığın altında ferromanyetik özellik gösteren bir metal, kritik sıcaklığın üzerinde artık ferromanyetik özellik göstermez.

Fiziksel sistemlerin anlaşılmasında sistemdeki faz yapısının bilinmesi büyük önem taşımaktadır. Sistemdeki faz geçişinin derecesi, geçiş noktasındaki termodinamik potansiyel ve türevlerinin davranışı ile ilgilidir. Faz geçişi kaçınıcı dereceyse termodinamik potansiyelin o derecedeki türevi süreksizlik gösterir.

2.1. İkinci Derece Faz Geçişi

İkinci derece faz geçişleri, serbest enerjinin birinci türevinin sürekliliği, ikinci türevinin süreksizliği ile tanımlanır. Bu durumda, manyetik malzemelerde görülen ferromanyetizmadan paramanyetizmaya, ikili alaşımlarda görülen düzensiz düzensizliğe geçiş ikinci derece faz geçişidir. Bu tür sistemlerde (manyetik malzemelerde) 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 ıraksamalar kritik üslerle karakterize edilir. (Şekil 2.2)



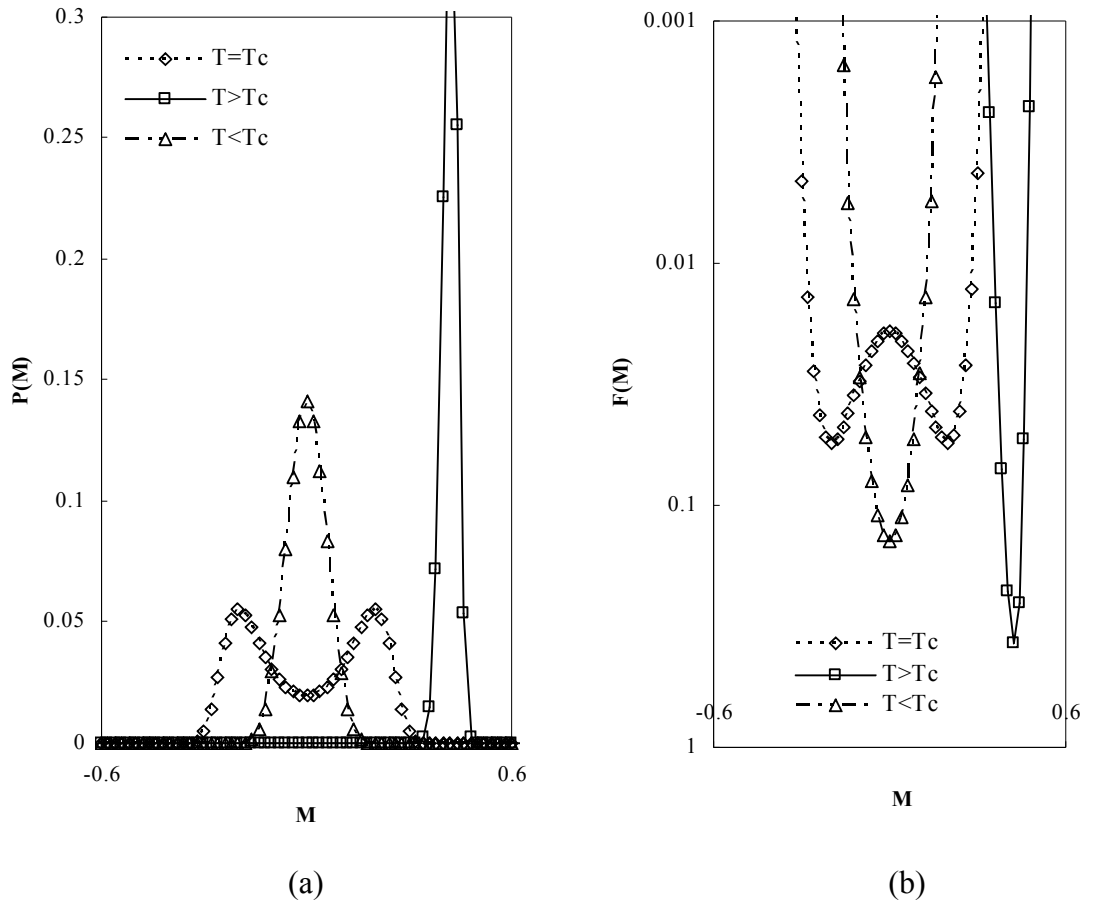
Şekil 2.2. $P(M)$, düzen parametresi, alınganlık ve iç enerjinin ikinci derece faz geçiş bölgesindeki davranışı[108].

İkinci derece faz geçişini tanımlamanın bir başka yolu ise düzen parametresi olasılık dağılımı $P(M)$ ve iç enerji olasılık dağılımı $P(E)$ 'yi incelemektir [42-44]. $P(M)$, faz geçişi kritik sıcaklığının altında düzeni ifade eden bir pike sahiptir. Kritik sıcaklıkta ise iki eşit yükseklikte pik göze çarpar. Sıcaklık arttıkça yaklaşan pikler kritik

sıcaklığın üstünde düzensizliği işaret eden tek pike dönüşür. Düzen parametresi olasılık dağılımı ile serbest enerji arasında,

$$F(M) = -k_B T \ln P(M) \quad (2.1)$$

fonksiyonel ilişkisi vardır[44]. Şekil 2.3' de düzen parametresi olasılık dağılımı $P(M)$ ve serbest enerji $F(M)$ ' nin durumları görülmektedir.

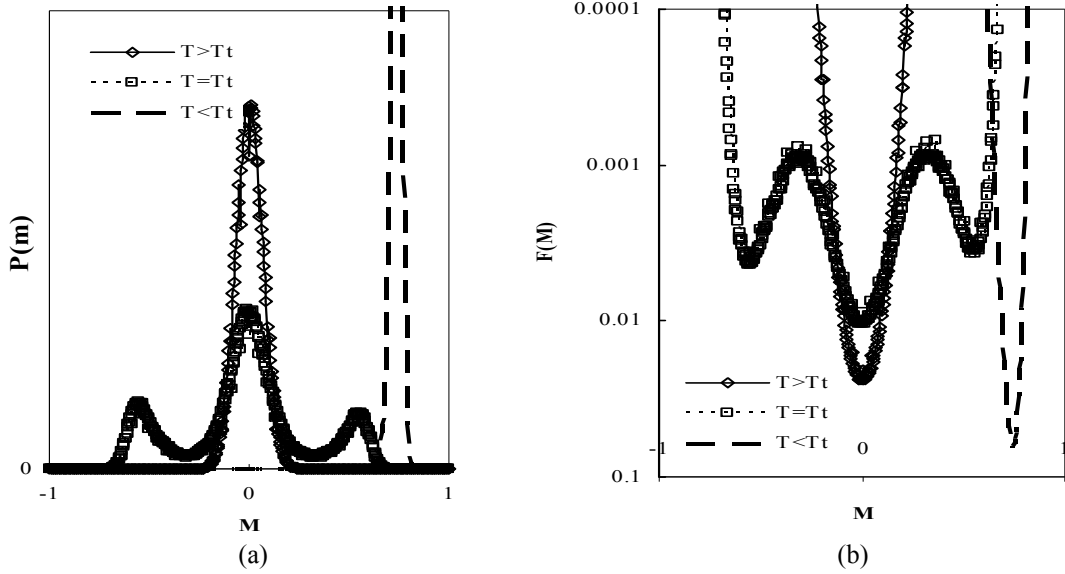


Şekil 2.3. a. İkinci derece faz geçişinde düzen parametresi olasılık dağılımı $P(M)$ ve b. Serbest enerji $F(M)$ ' nin kritik sıcaklık civarındaki davranışı

Yarı kararlı (metastable) durumların olmadığı ikinci derece faz geçişlerinde tek minimum ortaya çıkar.

2.2. Birinci Derece Faz Geçişi

Termodinamik potansiyelin birinci türevlerinden en az birinde görülen süreksiz davranış, birinci derece faz geçişini tanımlar. Dolayısıyla düzen parametresi ve iç enerjideki süreksizlik ile alınganlık ve özısıda görülen faz geçiş sıcaklığında δ -tekilliğine sahiptir. Ayrıca birinci derece faz geçişlerinde düzen parametresi ve iç enerjinin sıcaklıkla değişim eğrisi S-şeklinde bir davranış sergiler. Bu özelliğin, sistemdeki yarı kararlı durumların varlığı ile ortaya çıktığı bilinmektedir. Katı-sıvı-gaz geçişleri birinci derece faz geçişlerine örnektir. Birinci derece faz geçişi yapan sistemde olasılık dağılımı geçiş sıcaklığının altında iki pike sahiptir. Geçiş sıcaklığına yaklaşırken $P(M)$ düzenli ve düzensiz iki fazın birarada bulunduğunu işaret edecek şekilde eşit yükseklikte üç pik sergiler. Geçiş sıcaklığının üzerinde ise $P(M)$ tek piklidir (Şekil 2.4). Birinci derece faz geçişlerinde iç enerji olasılık dağılımından elde edilen serbest enerji geçiş sıcaklığının altında tek minimuma sahiptir. Geçiş sıcaklığı civarında ortaya çıkan iki minimum arasında gidip gelen sistemin hangi minimumdaki durumda olduğunun ayırt edilebilmesi yarı kararlı durumları meydana getirir. Geçiş sıcaklığının üstünde ise serbest enerjide tek minimum görülür.



Şekil 2.4. a. Birinci derece faz geçişinde düzen parametresi olasılık dağılımı ve b. Serbest enerjinin kritik sıcaklık civarındaki davranışı

Yapılan simülasyon çalışmalarının sonlu örgülerde çalışılması sonucu olarak birinci derece faz geçişinde geçiş noktasında beklenen sonsuz pikler yerine sonlu pikler meydana gelir. Bu, pik yüksekliğinin örgü boyuna bağlı olduğu sonucunu verir. Aralarındaki bariyer yeterince yüksek olmadığında sistem iki minimumu ayırt edemez. Bu nedenle faz geçişi ikinci derece gibi görülebilir. Birinci derece faz geçişlerinde alınganlık ve özısı, yüksekliği hacimle değişen, hacim büyüdükçe δ -tekilliğine sahip olan bir fonksiyon gibi davranır. Bu nedenle faz geçişi sırasında ortaya çıkan tekil davranış ikinci derece faz geçişinde olduğu gibi kritik üslerle karakterize edilemez. Bunun yerine termodinamik niceliklerdeki tekil davranışlar örgü hacmi ile ilişkilendirilir[42-51].

Faz geçişlerinin incelenmesi amacıyla çeşitli mikroskopik modeller ortaya konulmuştur. Teorik istatistik fizikte amaç, mikroskopik parçacıkların serbestlik dereceleri ve parçacıklar arasındaki etkileşimleri kullanarak istatistiksel yöntemlerle maddenin makroskopik özelliklerini belirlemeye çalışmaktır. Bu bağlamda Ising Model, Spin-1 (BEG) Ising Model, Heisenberg Model ve XY Model gibi pek çok spin modeli geliştirilmiştir. Tez çalışmasında ferromanyetik maddelerin faz yapılarının incelenmesinde en temel ve basit spin modeli olan Ising Model ve Ising modelden daha zengin bir faz yapısına sahip olan BCM kullanılarak hesaplamalar yapılmıştır.

2.3. Spin Modelleri

2.3.1. Spin-1/2 Ising Model

1925 yılında Ising tarafından önerilen ve manyetik sistemlerde spinin yalnızca iki değer alabileceği durumu inceleyen Ising modeli istatistik fiziğin yapıtaşlarından biridir. Ising model, çok parçacıklı sistemleri tanımlayan en basit modeldir. Modelin, 2 boyutta dış manyetik alanın olmadığı durumdaki analitik çözümü Onsager tarafından yapılmıştır[1]. Bunun dışında modelin tam çözümü yoktur.

Ferromanyetik metallerde (Fe, Ni gibi), dış manyetik alanın olmadığı durumda bile kritik sıcaklıktan (Curie sıcaklığı) daha düşük sıcaklıklarda kendiliğinden mıknatıslanma oluşmaktadır. Metalin sıcaklığı kritik sıcaklığa yaklaştığında kendiliğinden mıknatıslanma sıfıra gitmekte ve kritik sıcaklığın üstünde sıfır olmaktadır.

Bu modelde incelenen sistem örgü konumları adı verilen N tane sabit noktadan oluşan n-boyutlu periyodik bir örgüdür. Örgünün geometrik yapısı iki boyutta kare veya üçgen, üç boyutta ise kübik veya hekzagonal olabilir. Her örgü konumunda +1 veya -1 değerlerini alabilen S_i ($i=1,2,3..$) spinleri vardır. Eğer spin yukarı doğru ise $S_i = +1$, aşağı doğru ise $S_i = -1$ değeriyle ifade edilir. Bir Ising sisteminin enerjisi,

$$H = -\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j + h \sum_i S_i \quad (2.2)$$

şeklinde tanımlanmaktadır. Bu ifadede J_{ij} etkileşme enerjisini, h ise dış manyetik alanı göstermektedir. İzotropik etkileşmelerin olduğu durumda $J_{ij} = J$ alınmakta ve $J > 0$ durumu ferromanyetizmayı, $J < 0$ durumu ise antiferromanyetizmayı ifade etmektedir.

Eşitlik (2.2) ile verilen Ising Model hamiltoniyeni dış manyetik alanın olmadığı durum için global Z_2 simetrisine sahiptir. Yani hamiltoniyende tüm -1 değeri alan spinler +1 değerine, tüm +1 değeri alan spinler -1 değerine götürüldüğünde hamiltoniyenin değeri değişmez. Bu Z_2 simetrisi dış manyetik alanın hamiltoniyene katılmasıyla kırılır. Manyetik alanın yönü tercihli yöndür. Sistemin iki aşıkır sabit noktası, $T \rightarrow \infty$ ve $T \rightarrow 0$ noktalarıdır. Bu iki noktada sistem, renormalizasyon grubu dönüşümleri altında değişmez kalır.

+ + - -
+ + - -

Ferromanyetik taban durumu

+ - + -
- + - +

Antiferromanyetik taban durumu

2.3.2. Spin-1 Ising Model (BEG)

Blume-Emery-Griffiths (BEG) model spin-1 Ising modelin genişletilmiş bir şeklidir, ve iki düzen parametresine (M, Q) ve üç spin durumuna sahiptir. Model ilk olarak F. Rys tarafından 1969 yılında sunulmuş ve hesaplamalar 1971 yılında Blume, Emery ve Griffiths tarafından yapılmıştır[55,56]. Anti-ferromanyetik sistemler için BEG model Hamiltoniyeni aşağıdaki şekilde verilmektedir.

$$H = K \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 S_j^2 + \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j + D \sum_i S_i^2 \quad (2.3)$$

Bu ifadede K bikuadratik ve J bilineer etkileşme sabitleridir. D ise kristal alan veya "single ion anisotropy" parametresidir. S_i spin değişkeni, -1, 0, +1 olmak üzere üç duruma sahiptir. BEG model Hamiltoniyenindeki $\langle ij \rangle$ üzerinden toplamaların en yakın komşular veya ikinci derece en yakın komşular üzerinden alınması ve (K, J, D) parametre setinin değerine bağlı olarak farklı faz yapısına bağlı yeni sistemler tanımlamak mümkündür. Genel olarak, sistem $J < 0$, $K < 0$ ise ferromanyetik ve $J > 0$, $K > 0$ ise antiferromanyetik bir durum sergiler.

+	+	-	-	0	0	+	-	0	-	0	-	0	+
+	+	-	-	0	0	-	+	+	0	-	0	+	0
Ferromanyetik taban durumu						Antiferromanyetik taban durumu							

Model ilk olarak He3-He4 karışımlarındaki faz ayrılması ve süper akışkanların faz yapılarının incelenmesi amacıyla ortaya konmuştur. Bundan sonra da katı-sıvı-gaz karışımları, yarıiletken alaşımlar gibi karışık faz yapılarına sahip olan fiziksel sistemlerin faz yapılarının araştırılmasında geniş bir uygulama alanı bulmuştur.

Blume-Capel (BC) model

Spin-1 Ising model hamiltonyeni; $K=0$ değeri için Blume Capel (BC) model hamiltonyenine indirgenmektedir.

$$H = J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + D \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 + h \sum_i S_i \quad (2.4)$$

Üç durumlu ve iki düzen parametrelili(M,Q) bir spin-1 Ising model olan BC model, magnetik faz geçişleri, yapısal geçişler gibi çeşitli fiziksel durumlara uygulanmaktadır. İki ve üç boyutta tam çözümü bulunmayan BC model bugüne kadar sıkça farklı simülasyon ve yaklaşım metodları ile çalışılmıştır. Modelin ayrıntılı analizleri; ortalama-alan yaklaşımı (MFA), etkin alan teorisi[55,69], Bethe-Peierls yaklaşımı[70,71], seri açılımı metodu[4,72], kendinden oluşumlu Ornstein-Zernike yaklaşımı[73] (SCOZA) gibi yaklaşım metodlarının yanı sıra monte carlo metodu (MC) [45-47] ve cellular automaton (CA) [48,49] gibi simülasyon teknikleri ile de yapılmıştır.

BC model (kT_C/J , D/J) faz diyagramı üzerinde, ikinci derece faz geçişinin birinci derece faz geçişine dönüştüğü, üçlü kritik noktaya sahiptir. BC modelin üç boyutta sahip olduğu üçlü kritik nokta seri açılım metodu ile $D/J = 2,82$ [4,72], CVM ile $D/J = 2,817$ [81,82], EFT ile $D/J = 2,82$ [55,69], Bethe-Peierls yaklaşımı ile $D/J = 2,818$ [70,71] ve Creutz algoritmasından türetilen soğutma algoritması kullanılarak Cellular Automaton hesaplaması ile $D/J=2,82$ olarak tahmin edilmiştir[40]. Modelin iki boyutta sahip olduğu üçlü kritik nokta değeri Monte Carlo yöntemi ile $D/J=1,98$ [83], daha sonra Monte Carlo renormalizasyon grubu hesabı ile yapılan başka bir çalışmada $D/J = 1,9655$ [84], cellular automaton ile $1.5 \leq D/J \leq 2$ aralığında[13], tez çalışması kapsamında soğutma algoritması kullanılarak yapılan hesaplamalar sonucunda $1.96 \leq D/J \leq 1.97$ olarak tahmin edilmiştir. İki boyutlu spin-1 Ising model için yapılan hesaplamalar standart algoritmanın ikinci derece faz geçişlerini, soğutma algoritmasının ise hem ikinci

derece hem de yarıkararlı durumların ortaya çıktığı birinci derece faz geçişlerini Taklit etmekteki başarısını bir kez daha ortaya koymuştur.

2.4. Termodinamik Nicelikler ve Kritik Üsler

Bir sistemin kritik davranışı, indirgenmiş sıcaklık olarak adlandırılan sistemin bulunduğu sıcaklığın kritik sıcaklıktan uzaklığının bir fonksiyonu olan $\varepsilon = \left(\frac{T - T_c}{T_c} \right)$

ile ölçülür. Termodinamik nicelikler indirgenmiş sıcaklık parametresinin üstel fonksiyonu olarak tanımlanabilir. Bu bağlamda, herhangi bir termodinamik nicelik,

$$A \sim \varepsilon^x \quad (2.5)$$

genel formunda verilebilir. Burada x , A termodinamik niceliğinin kritik nokta civarında davranışını tanımlayan “kritik üs”tür.

Termodinamik nicelikler parçacık başına serbest enerjiden elde edilmektedir. Termodinamik niceliklerin istatistik mekaniksel tanımını yapabilmek için serbest enerji sistemin üleşim fonksiyonu ($Z(H, T)$) cinsinden serbest enerji

$$f(H, T) = -kT \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-1} \ln Z(H, T) \quad (2.6)$$

şeklinde ifade edilir. Burada $N \rightarrow \infty$ termodinamik limitte işlem yapıldığını göstermektedir. Sistemin iki farklı fazı arasındaki geçiş, o sistemin düzen parametresindeki analitik olmayan bir davranış ile verilir. Teorik olarak analitik olmayan bu davranış sadece parçacık sayısı ve hacim sonsuz olduğunda gerçekleşir. Bu limit “termodinamik limit” olarak adlandırılmaktadır.

Termodinamik limitte ($N \rightarrow \infty$) manyetizasyon ve iç enerji serbest enerjinin dış alan ve sıcaklığa göre birinci türevinden

$$M(H, T) = -\partial(f(H, T) / kT) / \partial H \quad (2.7)$$

$$H_I(H, T) = -kT^2 \frac{\partial}{\partial T} [f(H, T) / kT] \quad (2.8)$$

şeklinde tanımlanır. Manyetik alınganlık χ ve özısı da manyetizasyonun ve iç enerjinin türevinden, diğer bir ifadeyle serbest enerjinin dış alan ve sıcaklığa göre ikinci türevinden

$$\chi(H, T) = \partial M(H, T) / \partial H \quad (2.9)$$

$$C(H, T) = \frac{\partial}{\partial T} H_I(H, T) \quad (2.10)$$

ifadesi ile elde edilebilir.

Manyetizasyon cinsinden ifade edilebilen bir nicelik olan Binder kümülanı aşağıdaki ifade ile tanımlanır[55] .

$$U_L = 1 - \langle M^4 \rangle / (3 \langle M^2 \rangle^2) \quad (2.11)$$

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.

Çizelge.2.1 Termodinamik nicelikler ile ilgili kritik üsler[56,57]

Kritik üs	İlişki	2d Ising Model	3d Ising Model	Manyetiksistem (deneysel)
β (Düzen Parametresi)	$M \sim (-\varepsilon)^\beta \quad \varepsilon \rightarrow 0^-$ $M \sim (\varepsilon)^{\beta'} \quad \varepsilon \rightarrow 0^+$	0.125	0.31	0.33
ν (Korelasyon Uzunluğu)	$\xi \sim (\varepsilon)^{-\nu} \quad \varepsilon \rightarrow 0^+$ $\xi \sim (-\varepsilon)^{-\nu'} \quad \varepsilon \rightarrow 0^-$	1	0.63	0.63~0.65
γ (Alınganlık)	$kT\chi \sim (-\varepsilon)^{-\gamma'} \quad \varepsilon \rightarrow 0^-$ $kT\chi \sim (\varepsilon)^{-\gamma} \quad \varepsilon \rightarrow 0^+$	1.75	1.25	1.30~1.37
α (Özısı)	$C \sim (-\varepsilon)^{-\alpha'} + b^- \quad \varepsilon \rightarrow 0^-$	0	~0.125	0
	$C \sim \varepsilon^{-\alpha} + b^+ \quad \varepsilon \rightarrow 0^+$	0	~0.125	≈ 0.1

Çizelge 2.1’ de özısı (C), düzen parametresi (M), alınganlık (χ) ve korelasyon uzunluğu (ξ) termodinamik niceliklerinin ilişkileri ve bu nicelikler için; iki, üç boyutta ve deneysel olarak elde edilen değerleri ($\alpha, \beta, \gamma, \nu$) görülmektedir.

Buraya kadar anlatılan kritik davranışlar ikinci derece faz geçişlerinde gözlenmektedir. Birinci derece faz geçişlerinde ise korelasyon uzunluğu kritik nokta civarında ıraksamadığı yani sonlu bir değer aldığı için termodinamik niceliklerin kritik davranışları kritik üsler ile tarif edilememektedir. Bununla beraber Monte Carlo [58-61], transfer-matris metodu [62] ve renormalizasyon grup teorisi [63] gibi yöntemlerle elde edilen sonuçlar birinci derece faz geçişlerinde sonlu örgü etkisinin sistem hacmine bağlı olduğunu göstermiştir. Bu nedenle manyetik alınganlık ve özısı termodinamik niceliklerinin faz geçiş noktasındaki pik yükseklikleri sistem hacmi ile, L^d , artmaktadır. Çalışma kapsamında, üç boyutta birinci derece faz geçişi gösteren parametre uzayı için faz geçiş noktasındaki pik değerleri kullanılarak sonlu örgü etkisinin sistem hacmine bağımlılığı gösterilmiştir.

2.5. Sonlu Örgü Ölçekleme Teorisi

Simülasyon çalışmaları zorunlu olarak sonlu sistemlerde yapılır. Fakat sonlu sistemlerdeki faz geçişi ve termodinamik büyüklükler sonsuz sistemlerden önemli farklılıklar gösterir. Bu nedenle sonlu örgülerdeki hesaplamalardan sonsuz örgü davranışını tahmin edebilmek için sonlu örgü ölçekleme teorisi geliştirilmiştir. Sonlu örgü ölçekleme bağıntıları; sistemin kritik nokta yakınlarında olması ve tüm uzunlukların sisteme ait karakteristik uzunluk olan, ξ korelasyon uzunluğu cinsinden ifade edilmesi gibi kabullerden elde edilmektedir. Tüm termodinamik niceliklerin örgü uzunluğuna bağlı ifadesi bulunabilir ki, bu yaklaşım sonlu örgü ölçekleme teorisinin temelini oluşturmaktadır.

2.5.1. Termodinamik nicelikler için sonlu örgü ölçekleme bağıntıları

Korelasyon uzunluğu deneysel olarak kritik noktada ($\varepsilon = 0$) ıraksar. Ölçekleme teorisi $\varepsilon = 0$ komşuluğundaki bir sistem için tek karakteristik uzunluk olarak korelasyon uzunluğunu kabul etmektedir. Bu sonuç, sistemin kritik sıcaklıkta karakteristik bir uzunluğa sahip olmadığını ve korelasyon uzunluğunun ölçekleme dönüşümü altında değişmez olduğunu gösterir. Sistemin bir kısmı sistem kadar büyütüldüğünde bir fark görülüyorsa, bu durumda sistem ölçek dönüşümü altında değişmezdir. Kritik noktada korelasyon fonksiyonu aşağıdaki ifadedeki gibi davranır.

$$g(x) \approx x^{-p} \quad (2.12)$$

Birim uzunluk b çarpanı kadar arttığında $x \rightarrow x' = x/b$ şeklinde koordinat dönüşümü gerçekleşir. Termodinamik niceliklerin ölçekleme fonksiyonları çerçevesinde incelenerek kritik üsler arasındaki ilişkilerin ortaya çıkarılmasındaki matematiksel temel homojen fonksiyon kuramıdır. Bu durumda korelasyon fonksiyonu homojenlik kuralına göre

$$g(x/b) = b^p g(x) \quad (2.13)$$

şeklinde yazılabilir. Kritik noktada termodinamik fonksiyonlar korelasyon fonksiyonu gibi homojen fonksiyonlarla ifade edilebilir. Hacim başına serbest enerji ($f = F / kTV$) ,

$$f(h', \varepsilon') = b^d f(h, \varepsilon) \quad (2.14)$$

$$f(h, \varepsilon) = b^{-d} f(b^{Dh} h, b^{D\varepsilon} \varepsilon)$$

homojen fonksiyonu ile ifade edilir. Korelasyon uzunluğunun sonlu örgülerde örgünün boyu ile sınırlı kaldığı ($\xi \rightarrow L$) ve kritik sıcaklık civarında $\xi \approx \varepsilon^{-\nu}$ şeklinde davrandığı dikkate alınarak

$$\varepsilon' = b^{1/\nu} \varepsilon \quad (2.15)$$

ifadesi elde edilir. Manyetizasyon kritik civarındaki davranışı için verilen $m \approx h^{1/\delta}$ ve

$m \approx \varepsilon^\beta$ ifadeleri kullanılarak,

$$h' = b^{\delta\beta/\nu} h \quad (2.16)$$

elde edilir [47]. Bu durumda $b \rightarrow L$ için serbest enerji ifadesi aşağıdaki gibidir.

$$f(h, \varepsilon) = L^{-d} f(L^{\delta\beta/\nu} h, L^{1/\nu} \varepsilon) \quad (2.17)$$

ε , indirgenmiş sıcaklık olmak üzere sonsuz ve sonlu örgü kritik sıcaklıkları arasındaki fark,

$$\Delta\varepsilon = \frac{T_c(\infty) - T_c(L)}{T_c(\infty)} \propto aL^{-1/\nu} \quad L \rightarrow \infty \quad (2.18)$$

şeklinde tanımlanır. Ölçekleme bağıntısındaki L örgünün kenar uzunluğu, kritik üsler ise “ sonsuz örgü kritik üsleri ” dir. Tüm termodinamik nicelikler için sonlu örgü

ölçekleme bağıntıları, serbest enerji için verilen sonlu örgü ölçekleme bağıntısından elde edilir. Kendiliğinden manyetizasyon için sonlu örgü ölçekleme bağıntısı

$$\begin{aligned} M(h, \varepsilon) &= \partial f / \partial h \\ &= L^{-\beta/\nu} X^o(L^{\delta\beta/\nu} h, L^{1/\nu} \varepsilon) \end{aligned} \quad (2.19)$$

halini alır. Manyetik alınganlık ve Özısı için sonlu örgü ölçekleme bağıntıları, benzer biçimde,

$$kT\chi = L^{\gamma/\nu} Y^o(L^{\delta\beta/\nu} h, L^{1/\nu} \varepsilon) \quad (2.20)$$

$$C = L^{\alpha/\nu} Z^o(L^{\delta\beta/\nu} h, L^{1/\nu} \varepsilon) \quad (2.21)$$

bağıntıları ile verilir.

U_L oranlarının sonlu örgü ölçekleme teorisine göre ölçeklenmiş formu aşağıdaki şekildedir .

$$U_L = \mathcal{G}(\varepsilon L^{1/\nu}) \quad (2.22)$$

U_L ' nin bu şekilde ölçeklenmesi sonucunda ν kritik üssünün değeri elde edilebilir.

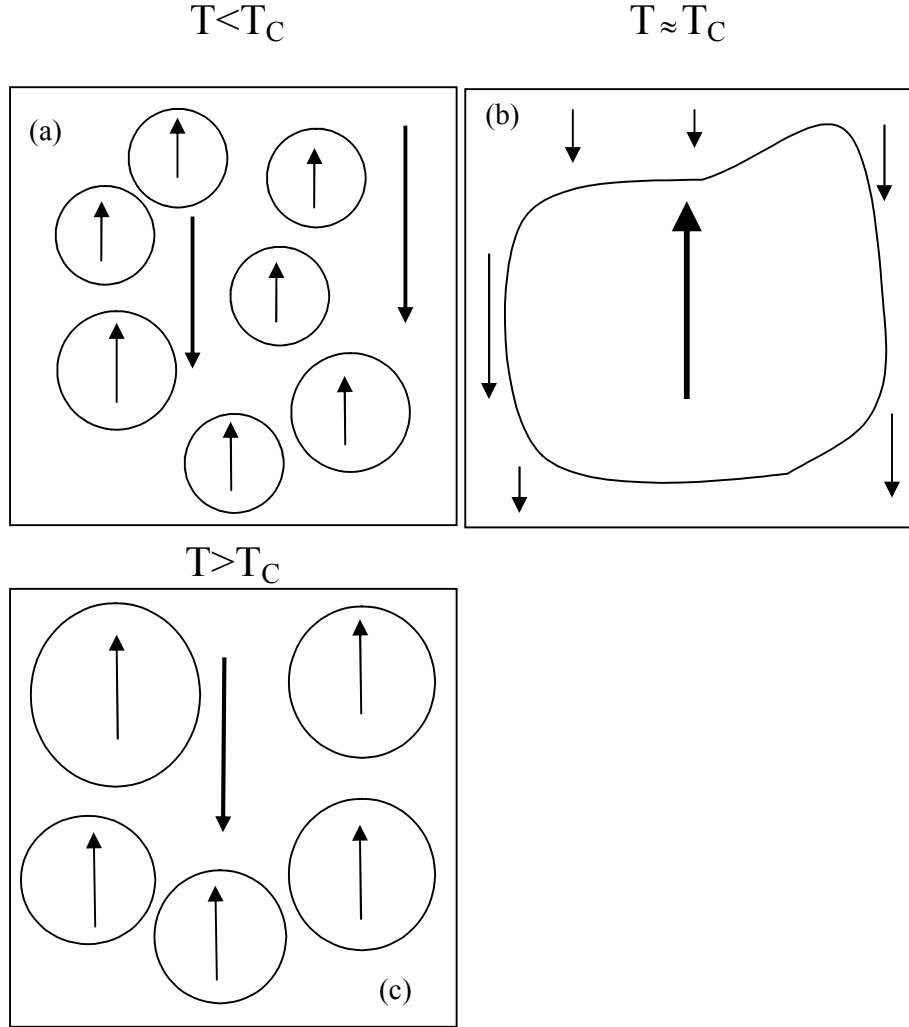
2.6. Dinamik Olay ve Dinamik Kritik Üsler

Fiziksel sistemlerin istatistik mekaniksel incelemesinde termodinamik dengedeki sistemler için teknikler geliştirilmiş ve dengedeki sistemler bu çerçevede detaylı olarak incelenmiştir. Diğer bir deyişle, statik olay ile ilgili çalışmalarda spin veya diğer niceliklerin oluşturduğu konfigürasyonların temel dengedeki olasılık dağılımları göz önüne alınmaktadır. Dinamik olayda ise fiziksel niceliklerin zamana bağlı olarak nasıl değiştiklerinin bilinmesi gerekmektedir. Son yıllarda ise faz geçişi

gösteren sistemlerin ısı dengeye ulaşmadan önceki davranışlarının incelenmesine başlanmıştır.

Dinamik olay sistemin dengede ve dengeden uzak olmasına bağlı olarak iki kısımda incelenmektedir. Eğer sistem dengede ise sistemin durulma zamanı doğrusal durulma zamanı ve dinamik kritik üssü (z^d) doğrusal dinamik kritik üs, eğer sistem dengeden uzak ise sistemin durulma zamanı doğrusal olmayan durulma zamanı ve dinamik kritik üssü (z^{do}) doğrusal olmayan dinamik kritik üs olarak adlandırılmaktadır[28,29]. Dengede olmayan sistemlere örnek olarak, “molecular beam epitaxy” nin deneysel düzeneği verilebilir. Dengedeki istatistik mekanik için bilinen en iyi örnek 2 boyutlu Ising Model’de düzen-düzensizlik faz geçişidir. Burada kritik sıcaklığa (T_c) yaklaşıldığında düzen alanlarının tipik boyu sonsuza ıraksar. Kritik dinamik çalışmalarda temel olarak kritik nokta civarında düzen parametresinin veya diğer yavaş değişen fiziksel niceliklerin büyük ölçekli dalgalanmalarının değişimleri incelenmektedir.

Bir spin sistemi göz önüne alındığında, kritik sıcaklıktan daha düşük sıcaklıklarda spin bölgeleri(domain) küçüktür(Şekil 2.5.a). Kritik sıcaklık civarında spinleri aynı yönelime sahip, büyük spin bölgelerinden oluşan konfigürasyonlarla karşılaşmaktadır(Şekil 2.5.b). Bu bölgelerin her birinde spinlerin büyük bir kısmı aynı doğrultuya yönelmiştir. Spinler termal uyarmalar sonucunda rasgele yön değiştirdiklerinden, büyük ebatlara sahip bölgelerde, termal uyarmalar ile bütün spinlerin yön değiştirme şansına sahip olmaları uzun zaman almaktadır. Bu durum genellikle “kritik yavaşlama” (critical slowing down) olarak adlandırılmaktadır[25,26]. Kritik yavaşlama olayı durulma zamanının kritik sıcaklık civarında uyduğu kuvvet kanunundaki dinamik kritik üs z ile karakterize edilmektedir. Dinamik kritik olayın analizi; z dinamik kritik üssün dinamik kritik davranışın ana karakteristiği olduğunu göstermektedir[27]. Kritik sıcaklıktan büyük sıcaklıklarda ise Şekil 2.5.c’de görüldüğü gibi spin bölgeleri tekrar küçülerek kararlı hale gelmektedir.



Şekil 2.5.a. Ferromanyetik bir sistemde, $T < T_C$ 'de "domain"lerin durumu
 b. Ferromanyetik bir sistemde, $T \approx T_C$ 'de "domain"lerin durumu
 c. Ferromanyetik bir sistemde, $T > T_C$ 'de "domain"lerin durumu

Sayısal hesaplama teknikleri fiziksel problemlerin incelenmesinde son yıllarda yaygın olarak kullanılmaya başlamıştır. Bu durumun sonucunda ise dinamik davranış yeni bir problem olarak ortaya çıkmıştır. Dinamik kritik üs z , boyuta, düzen parametresinin serbestlik derecesine bağlı olmadığı gibi karakteristik enerjinin korunmasına da bağlı değildir[27]. Doğada dengede-olmayan faz geçişinin çok fazla çeşidi vardır. Diğer bir yandan dengede olmayan faz geçişlerinin yaygınlığı için deneysel kanıtlar henüz çok azdır. Bu konuda yoğunlaştırılmış deneysel çalışmalar

gereklidir. Modern nanoteknolojinin gelişmesiyle yakın gelecekte dengede-olmayan istatistik fiziğe deneysel olarak katkı sağlanacağı belirlenmektedir. Sayısal hesaplamalar, sistemin dengede olduğu durumda yapıldığı için hesaplamaların yeterliliği algoritmanın dinamik davranışına bağlı olmaktadır. Dinamik davranış algoritmaya göre farklılık gösterebilir. Mesela, Heat-Bath, Glauber, Metropolis gibi yerel algoritmaların dinamik süreci ile Swendsen-Wang ya da Wolff algoritmaları gibi global olanların dinamik süreci birbirinden oldukça farklıdır[110]. Yerel algoritmalarda “kritik yavaşlama” olayı belirgin şekilde ortaya çıkmakta, buna rağmen global olanlarda “kritik yavaşlama” görülmemektedir[110]. Bu durum dinamik süreci tamamen etkilememektedir. Önceki yıllarda yapılan çalışmalarda cellular automaton standart algoritması kullanılarak 2 boyutta Ising modelin dinamik davranış ortaya konmuştur[79]. Soğutma ve ısıtma algoritmalarının dinamik süreci ilk olarak tez çalışması kapsamında belirlendi. Buradaki bir diğer amaç, Monte Carlo algoritmalarında olduğu gibi dinamik sürecin algoritmaya bağlı olduğu göz önüne alınarak cellular automaton algoritmalarının dinamik davranışı araştırılmıştır. Dinamik süreç farklı algoritmalarda incelendiği gibi, soğutma algoritmasının farklı soğutma oranları altında da incelendi. İncelemeler, iki ve üç boyutlu Blume Capel modelin ikinci derece faz geçişi, birinci derece faz geçişi gösteren parametre uzayında ve üçlü kritik noktada yapılmıştır.

2.6.1. Zamana bağlı korelasyon fonksiyonu $\phi(t)$ ve durulma zamanı (τ^d)

Genel olarak dengedeki bir sistem için zamana bağlı korelasyon fonksiyonu,

$$\phi(t) = \frac{1}{tmak - t} \sum_{t'=0}^{t_{mak}-t} \frac{Q(t+t')Q(t') - \langle Q \rangle^2}{\langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2} \quad (2.23)$$

ifadesi ile tanımlanmaktadır[64]. Burada Q niceliği hücre başına ortalama değerdir. Bu ifadedeki $\langle Q \rangle$ değeri de aşağıdaki şekilde hesaplanmaktadır.

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{t_{mak}} \sum_{t=0}^{t_{mak}} \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Q_i(t) \right) \quad (2.24)$$

Bu ifadedeki $N = V$ (basit kare için $L \times L$, basit küp için $L \times L \times L$) örgüdeki hücre sayısıdır. Denklem (2.23) de verilen ifadedeki Q niceliği eğer düzen parametresi ise düzen parametresi için, eğer iç enerji ise iç enerji için zamana bağlı korelasyon fonksiyonu elde edilmektedir. Korelasyon fonksiyonu ayrıca üstel fonksiyonların doğrusal bileşimi olarak da ifade edilebilir[64].

$$\phi(t) = \sum_i A_i e^{-t/\tau_i} \quad (2.25)$$

Bu ifadedeki τ_i , i . üstel fonksiyon için durulma zamanıdır. Sistemin karakteristik durulma zamanı olarak en büyük τ değeri alınmaktadır. $\phi(t)$ korelasyon fonksiyonunun zamana bağlı korelasyon fonksiyonu olmasına bağlı olarak elde edilen karakteristik durulma zamanı, doğrusal durulma zamanı olarak adlandırılmaktadır[32].

Zamana bağlı korelasyon fonksiyonu $\phi(t)$, kritik sıcaklık civarında karakteristik durulma zamanına bağlı olarak bozunmaktadır. Kritik sıcaklık civarında durulma zamanı,

$$\tau \sim \xi^z \quad (2.26)$$

şeklindeki kuvvet kanununa uygun bir davranış sergiler[26]. Burada ξ korelasyon uzunluğudur.

Korelasyon uzunluğu ε 'a bağlı olarak,

$$\xi \sim \varepsilon^{-\nu} \quad (2.27)$$

şeklindedir. Bu durumda kritik sıcaklık civarında karakteristik durulma zamanı için,

$$\tau = c \left| \frac{T - T_C}{T_C} \right|^{-\Delta} \quad (2.28)$$

eşitliği yazılır. Burada c bir orantı sabiti, $\Delta = z \nu$ ise dinamik kritik üstür. Bu kritik üs, doğrusal durulma zamanı için doğrusal dinamik kritik üs adını alır.

2.6.2. Dinamik sonlu örgü ölçeklemesi ve kritik sıcaklık

Sonsuz örgü için termodinamik niceliklerin davranışı sonlu örgülerde yapılan hesaplamalar kullanılarak sonlu örgü ölçekleme teorisi yardımıyla belirlenmektedir. Bu teoriye göre dinamik ölçekleme bağıntısı[100],

$$m(h, \varepsilon, L, t) = L^{-\beta/\nu} f(\varepsilon^{-\beta\delta} h, L^{1/\nu} \varepsilon, tL^{-z}) \quad (2.34)$$

ifadesi ile verilir[66]. Burada $\varepsilon = \frac{T - T_C(\infty)}{T_C(\infty)}$ dir. $T_C(\infty)$ sonsuz örgü kritik

sıcaklığıdır. Sonlu örgü ölçekleme teorisine göre sonsuz örgü kritik sıcaklığı($T_C(\infty, D/J)$),

$$T_C(\infty, D/J) = T_C(L, D/J) + aL^{-1/\nu} \quad (2.35)$$

ifadesiyle verilmektedir. Burada ν , sonsuz örgüdeki korelasyon uzunluğu kritik üssüdür .

Dış manyetik alanın olmadığı ($h=0$) durumda $m(h,\varepsilon)$ bağıntısı yardımıyla durulma zamanı (τ) için aşağıdaki sonlu örgü ölçekleme teorisi kullanılır.

$$\tau^d = L^z f(L^{1/\nu} \varepsilon) \quad (2.36)$$

Çok büyük $x = \varepsilon L^{1/\nu}$ için $f(x)$ fonksiyonunun asimtotik olarak yazılmış şekli aşağıdaki gibidir.

$$f(x) \sim x^{-zv} \quad (2.37)$$

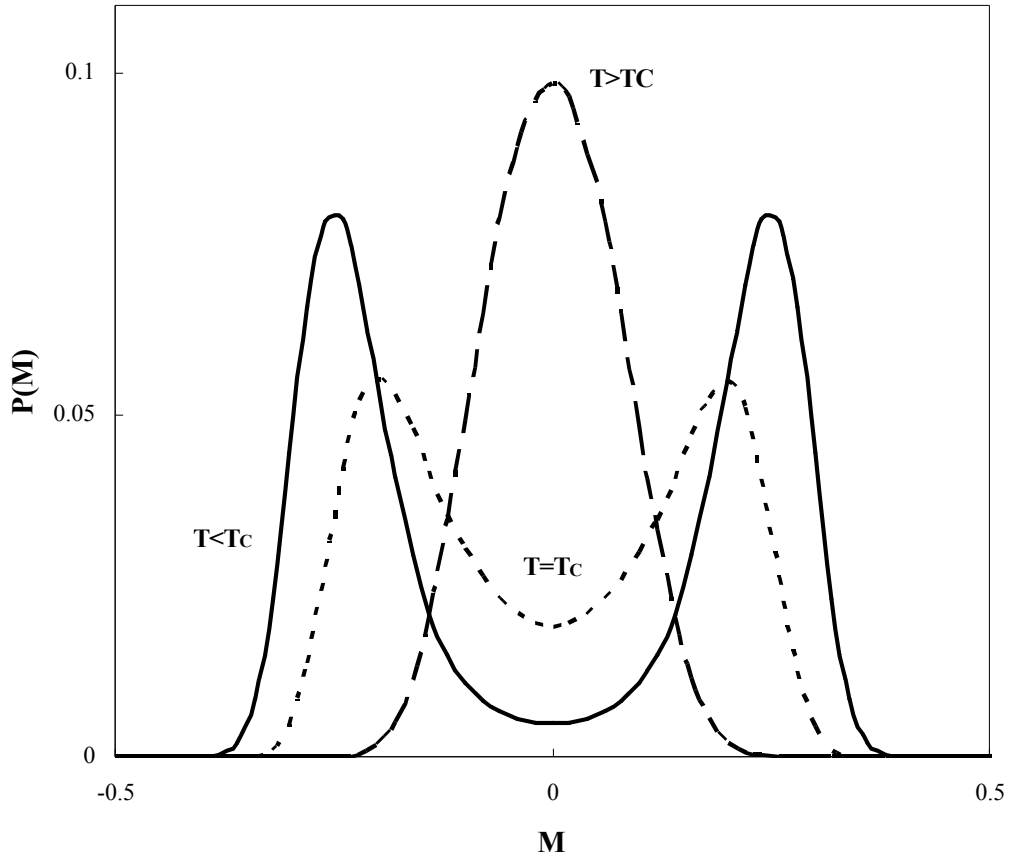
Bunu durulma zamanına uygularsak, doğrusal kritik üs için,

$$\tau^d \sim \varepsilon^{-vz} \quad \Delta_d = vz \quad (2.38)$$

yazılır.

2.7. Düzen Parametresi Olasılık Dağılımı 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 2.6) ve T_C kritik sıcaklığın altında $P(m)$ dağılımı $+m$ ve $-m$ bölgelerinde kendiliğinden oluşmuş olan çift pikli bir yapıya sahiptir. T_C kritik sıcaklığın üstünde ise, $P(m)$ dağılımı “0” manyetizasyonunda tek pikli durum gösterir. Bu durum düzensiz yapıyı temsil eder. Kritik sıcaklıkta ise birbirine eşit iki pik gözlenir[106].



Şekil 2.6. İkinci derece faz geçiş bölgesinde $P(m)$ fonksiyonunun değişimi.

Ising Modelin düzen parametresinin olasılık dağılımı $P(m)$ için sonlu örgü ölçekleme fonksiyonunun bilinmesi düzen parametresinin bütün moment ve kümülanlarının hesaplanmasını mümkün kılar. Bundan dolayı bu ifadelerin analitik fonksiyonları önemlidir. Düzen parametresi olasılık dağılımı;

$$P_L(M) = \frac{N_M}{N_{CCAS}} \quad (2.39)$$

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

2.7.1. Düzen parametresi olasılık dağılımı sonlu örgü ölçeklemesi

Düzen parametresi olasılık dağılımı için sonlu örgü ölçekleme teorisinin genel ifadesi, dış manyetik alan yokken,

$$P_L(M, t) = a(L)p(Ma(L), tb(L)) \quad t \rightarrow 0, L \rightarrow \infty \quad (2.40)$$

şeklindedir. Bu ifadede, M düzen parametresi, t ise T_C sonsuz örgü kritik sıcaklığı olmak üzere indirgenmiş sıcaklıktır. $a(L)$ ve $b(L)$ 'nin L 'ye bağımlılığı $|M_L(t)|$ için sonlu örgü ölçekleme bağıntısı ve

$$|M_L(t)| = \int_{-\infty}^{\infty} P_L(M, t) |M| dM \quad (2.41)$$

tanımı kullanılarak hesaplanabilmektedir[67].

d uzaysal boyut olmak üzere $d=2$ ve $d=3$ için doğrusal boyutu L olan küp şeklinde ve periyodik sınır şartlı bir örgünün serbest enerjisinin ıraksayan kısmı için önerilen sonlu örgü ölçekleme bağıntısı,

$$f_L^{(S)}(t, h) = L^{-d} Y(C_1 t L^{1/\nu}, C_2 h L^{\Delta/\nu}) \quad t \rightarrow 0, h \rightarrow 0, L \rightarrow \infty \quad (2.42)$$

şeklindedir. Bu ifadede Δ 'gap' üssü, ν sonsuz örgü korelasyon uzunluğu için kritik üs, h da indirgenmiş dış manyetik alandır. Bu ifadede evrensel olmayan ve örgü sistemine bağlı parametreler sadece C_1 ve C_2 ölçek çarpanlarıdır. Yani, sonlu örgü ölçekleme fonksiyonu evrenseldir ve evrensel olmayan hiçbir çarpanı yoktur. Düzen parametresi için sonlu örgü ölçekleme bağıntısı $f_L^{(S)}(t, h)$ den,

$$M_L(t, h) = -\frac{\partial f_L^{(S)}}{\partial h} \text{ eşitliği kullanılarak bulunabilir. Böylece,}$$

$$M_L(t, h) = L^{-\beta/\nu} C_2 U(C_1 t L^{1/\nu}, C_2 h L^{\Delta/\nu}) \quad (2.43)$$

ifadesi elde edilir. Burada β sonsuz örgünün düzen parametresi için kritik üs, U ise sonlu örgü ölçekleme fonksiyonudur. Bu eşitlik $h=0$ 'da aşağıdaki basit hali alır.

$$M_L(t) = L^{-\beta/\nu} C_2 U(C_1 t L^{1/\nu}) \quad (2.44)$$

(2.40) eşitliği, (2.41) da kullanılırsa sırasıyla aşağıdaki eşitlikler elde edilir.

$$|M_L(t)| = \int_{-\infty}^{\infty} a(L) p(Ma(L), tb(L)) |M| dM \quad (2.45)$$

$$|M_L(t)| = a(L)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} p(z, tb(L)) |z| dz \quad (2.46)$$

$$|M_L(t)| = a(L)^{-1} p(tb(L)) \quad (2.47)$$

(2.44) ve (2.47) eşitlikleri kıyaslandığında,

$$a(L) = C_2^{-1} L^{-\beta/\nu} \quad \text{ve} \quad b(L) = C_1 L^{-1/\nu} \quad (2.48)$$

elde edilir. Böylece düzen parametresi olasılık dağılımının sonlu örgü ölçekleme bağıntısı için,

$$P_L(M, t) = C_2^{-1} L^{\beta/\nu} p(M C_2^{-1} L^{\beta/\nu}, t C_1 L^{1/\nu}) \quad t \rightarrow 0, L \rightarrow \infty \quad (2.49)$$

bulunmuş olur. Bu ifade $d=2$ ve $d=3$ için yapılan çalışmalarda kullanılmakta olan ifadedir.

Sonlu örgü ölçekleme fonksiyonunun kritik noktadaki analitik ifadesi,

$$p(m, 0) = p_0 \exp(-(A m^2 + B m^4 + C L^{-2} m^6)) \quad (2.50)$$

şeklinde verilmektedir[67]. Bu ifadedeki A, B ve C birer sabit olup analitik fonksiyon karşılığı olan sayısal fonksiyona uydurularak değerleri belirlenebilir. Analitik fonksiyonun bu hali yerine daha fazla bilgi verecek parametreleri içeren aşağıdaki yeniden düzenlenmiş hali,

$$p(m,0) = p(m_0,0) \exp(-((m^2 / m_0^2) - 1)^2 (a(m^2 / m_0^2) + c)) \quad (2.51)$$

sayısal fonksiyonuna uydurulmaktadır[68]. m_0 , $p(m,0)$ in en büyük değer olan $p(m_0,0)$ a eşit olduğu m değeridir; yani m_0 , m nin en büyük ihtimal ile alacağı değerdir. Bu fonksiyondaki a ve c değerleri birer sabit olup $P(M)$ eğrisine yapılan fit fonksiyonları ile belirlenebilmektedir. Örgü boyu büyüdükçe m_0 , a ve c değerleri azalırken $p(m_0,0)$ ise artar. Eşitlik 2.51'deki analitik fonksiyonu kullanılarak elde edilen c sabiti, analitik fonksiyonda $M=0$ değeri için,

$$p(0,0) = p(m_0,0) \exp(-c) \quad (2.52)$$

$$e^c = p(0,0) / p(m_0,0) \quad (2.53)$$

eşitliği türetilir. Bu eşitlik yardımıyla c sabiti değeri test edilir[68].

Bu fonksiyonlar literatürde Monte-Carlo algoritması kullanılarak 3 boyutlu Blume Capel model ve Ising model için sonsuz örgü kritik sıcaklığında hesaplanmıştır[68,104].

3 . MODEL

3.1. Cellular Automaton

Cellular Automaton ilk olarak 1950’li yıllarda ortaya konmuştur. Model daha sonra biyolojik sistemlerin simülasyonu için “cellular space” adıyla çalışılmıştır. Fizikteki uygulaması ise 1980’lerin başında kullanılmaya başlanmıştır. Model, fizikte daha önce kullanılan ve alışlagelmiş olan modellerden farklı bir yapıdadır. Çünkü, Cellular Automaton (CA)’ da uzay ve zaman kesikli değerlere sahiptir ve sonsuza kadar genişletilebilen düzenli bir hücre örgüsünden meydana gelir. Bölgesel iç etkileşmeye sahip çok sayıda farklı eleman içeren fiziksel sistemler “ CA “ olarak modellenmiştir. Genellikle CA örgüsü konum uzayındadır. Mikroskobik düzeyde her bir konum kristal örgüdeki kuantize ölçülebilirler (spin bileşeni gibi) ya da atom tiplerine karşılık gelen noktalardır. Makroskobik düzeyde bir “ CA “ da her hücre birçok molekül ihtiva eden bir bölgeyi temsil edebilir ve hücrenin değeri birkaç mümkün farklı faza karşılık gelebilir. Ising model ve diğer fiziksel modellerin CA olarak simülasyonu Vichniac tarafından önerilmiş, iki-boyutlu kare örgüler için birçok CA kuralı komşuluktaki hücre sayısına ve konuma bağlı olarak isimlendirilmiştir[21].

Fiziksel bir sistem için “ CA ” ile bir model oluşturulurken aşağıdaki şartlar yerine getirilmelidir.

- i) Sistemin yapısına uygun düzenli bir örgü (iki boyutta; kare, üçgen, bal peteği vb..., üç boyutta; kübik, vb...) seçilir.
- ii) Örgüyü oluştururken hücrelerin sahip olabileceği hallere karşılık gelen değişken(yoğunluk, manyetik moment vb.) ya da değişkenler belirlenir.
- iii) Hücrelerin birbirleriyle etkileşme şeklini ve gelişimini sağlayan bölgesel bir kural tanımlanır.

Bir “ CA ” hali hücre değişkenlerinin değerleri ile belirlenmektedir. “ CA ” kesikli zaman adımlarında gelişir ve gelişim esnasında bir hücre değişkeninin değeri

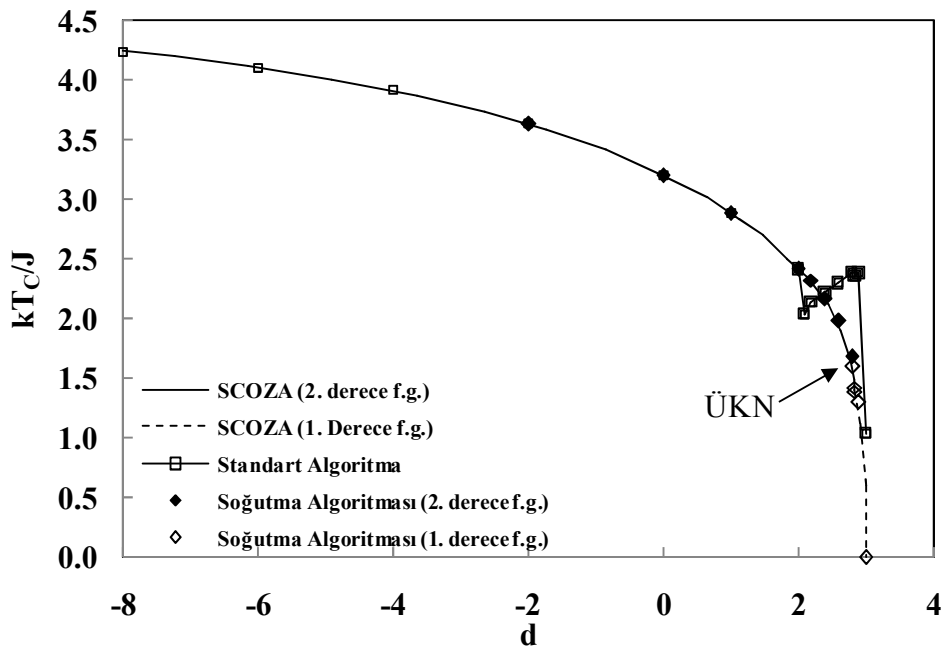
bölgesel bir kural yardımıyla bir önceki zaman adımında ona komşu hücrelerdeki değişkenlerin değerlerine bağlı olarak oluşmaktadır. Bu bölgesel kural tüm hücrelere eş zamanlı olarak uygulanmaktadır.

Vichniac' ın Ising model için önerdiği kural Pomeau ve Hermann tarafından Q2R Cellular automaton olarak geliştirilmiştir[22,23]. Q2R algoritmasında hamiltonyen sadece spin-spin etkileşim enerjisinden oluşmaktadır. İç enerji simülasyon boyunca korunduğu için iç enerji dalgalanmalarından elde edilen özısıyı hesap etmek mümkün olmamaktaydı. Bu kısıtlama Creutz Cellular automaton (CCA) ile ortadan kaldırılabildi[24]. Creutz Ising modelde iç enerji ile spine eşlik eden momentuma karşılık gelen kinetik enerjinin toplamı korunur. Böylece Creutz algoritması kullanılarak üretilen konfigürasyonlardan iç enerjiye bağlı termodinamik nicelikleri hesaplamak mümkün olmaktadır. Üstelik bu algoritma yaygın MC metodlarından on kat daha hızlı çalışmakta ve yüksek kalitede rastgele sayı üreticine gereksinim duymamaktadır.

CCA algoritması kullanılarak dış manyetik alan yokluğunda iki ve üç boyutlu Ising modelde yapılan hesaplamalar algoritmanın Ising modelin simülasyonunda oldukça başarılı olduğunu göstermiştir[74,85,113-115]. Bu algoritmadan türetilen çeşitli algoritmalar dış alan, ikinci derece en yakın komşu etkileşme ve dört spin etkileşim terimleri içeren Ising model problemlerine uygulanmış ve literatürle uyumlu sonuçlar elde edilmiştir[37,38]. İki boyutlu Blume-Capel (BC) model için Creutz algoritmasından geliştirilen bir Cellular automaton algoritması ile modelin davranışı test edilmiş ve evrensel Ising model sınıfına dahil olduğu görülmüştür. 2-boyutlu spin-1 Ising model için yapılan hesaplamalar, algoritmanın ikinci derece faz geçişlerini taklit etmekteki başarısını tekrarlamıştır. 3-boyutlu BC model için yapılan hesaplamalar algoritmanın, modelin sahip olduğu birinci derece faz geçişlerini, dolayısıyla da üçlü kritik noktayı tespit edemediğini göstermiştir. Bu nedenle CCA' ı temel alan yeni bir algoritma olan “soğutma algoritması” türetilmiştir[39,51,74]. 3-boyutlu Blume Emery Griffiths (BEG) model için yapılan hesaplamalarda modelin sergilediği çift tekrarlayan faz geçişlerinin düşük sıcaklık bölgesindeki kısmını kolayca elde etmek için soğutma algoritması ile aynı mantık çerçevesinde “ısıtma

algoritması” geliştirilmiştir[75]. Standart algoritma ile yapılan hesaplamalarda BC modelin $d=D/J=3$ parametresine kadar ikinci derece faz geçişi görülmüş, dolayısıyla üçlü kritik nokta $d=3$ olarak tespit edilmiştir. Yarı kararlı durumları üretemeyen standart algoritma ile birinci derece ve ikinci derece faz geçişleri ayırt edilememektedir. Soğutma algoritması ile yapılan hesaplamalarda üç boyutlu BC modelin, literatürle uyumlu olarak[53,55,69-72], $d=2.82$ ’ de üçlü kritiktaya sahip olduğu ve $2.82 \leq d \leq 3$ aralığında birinci derece faz geçişi sergilediği görülmüştür. Bu sonuç soğutma algoritmasının birinci derece faz geçişlerini taklit etmekte başarılı olduğunu göstermiştir.

Şekil 3.1.de üç-boyutlu Blume Capel modelin standart ve soğutma algoritmaları ile elde edilen sıcaklık değerleri ile elde edilen $(kT_C/J, D/J=d)$ faz diyagramı, kendinden oluşumlu Ornstein-Zernike yaklaşımı (SCOZA) sonuçları[54,73] ile karşılaştırılarak verilmiştir. Soğutma algoritması ile tespit edilen ikinci derece faz geçişinin birinci derece faz geçişine değiştiği üçlü kritik nokta (ÜKN) Şekil 3.1 üzerinde gösterilmiştir.



Şekil 3.1. 3 - boyutlu Blume Capel modelin Creutz Cellular Automaton algoritmasından türetilen standart ve soğutma algoritmaları ile elde edilen $(kT_C/J, d)$ faz diyagramı. ÜKN: Üçlü kritik nokta

3.2. Cellular Automaton Algoritmaları

3.2.1. Standart algoritma

Bu modelde örgünün her bir hücresinde üç değişken bulunmaktadır. Her bir hücredeki değişkenlerin değerleri onun kendi değişkenleri, birinci derece ve ikinci derece en yakın komşulardaki değişkenlerin değerlerinden deterministik bir cellular automaton kuralı ile tanımlanmaktadır. Her bir hücredeki üç değişkenden ilki Ising spin B_i dir ve “0”, “1” veya “2” değerini alabilmektedir. Modelin Ising spin enerji aşağıdaki ifade ile verilmektedir.

$$H = J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + K \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 S_j^2 + D \sum_i S_i^2 \quad (3.1)$$

Bu ifadedeki $S_i = B_i - 1$ dir. $\langle ij \rangle$ üzerinden toplam en-yakın komşu etkileşme çiftleri ve i üzerinden toplam ise örgüdeki spinler üzerinden alınmaktadır. Modelde, ikinci değişken spin eşlenik momentum değişkenine karşılık gelmektedir. Momentuma karşılık gelen kinetik enerji H_k , (0,m) aralığında herhangi bir spin değişimi için Ising enerjideki değişime eşit olan tamsayı değerleri almaktadır. Toplam enerji,

$$H = H_I + H_K \quad (3.2)$$

bütün zaman adımlarında korunmaktadır. Algoritmanın ilk adımı en düşük iç enerjili (Ising enerji) durumun taban durumu olarak tanımlanması ve başlangıç konfigürasyonu olarak alınmasıdır. İkinci adımda algoritma spin değişimine karar vermektedir. Bu aşamada spin konfigürasyonunun t zamanındaki H_I^t Ising enerjisi hesaplanır. Değeri değiştirilecek hücrenin spini $\frac{1}{2}$ olasılıkla diğer iki halden birine çevrilir ve t+1 zamanında H_I^{t+1} Ising enerjisi elde edilir. Daha sonra Ising enerjisindeki değişim, dH_I , hesaplanır. Ising enerjisindeki değişim bu hücrelerin momentum değişkenine aktarılabilir veya momentum değişkeninden alınabilecek bir değer ise ve toplam enerji korunuyorsa spin ters çevrilir ve yeni konfigürasyon kabul edilmiş olur. Buna uygun olarak momentum değiştirilir. Aksi halde spin ve

momentum değiştirilmez. Bu işlem örgüdeki bütün siyah hücrelere aynı zaman adımıyla uygulanmaktadır. Aşağıdaki eşitliklerde Ising enerji değişiminin, dH_I , hesaplanması görülmektedir.

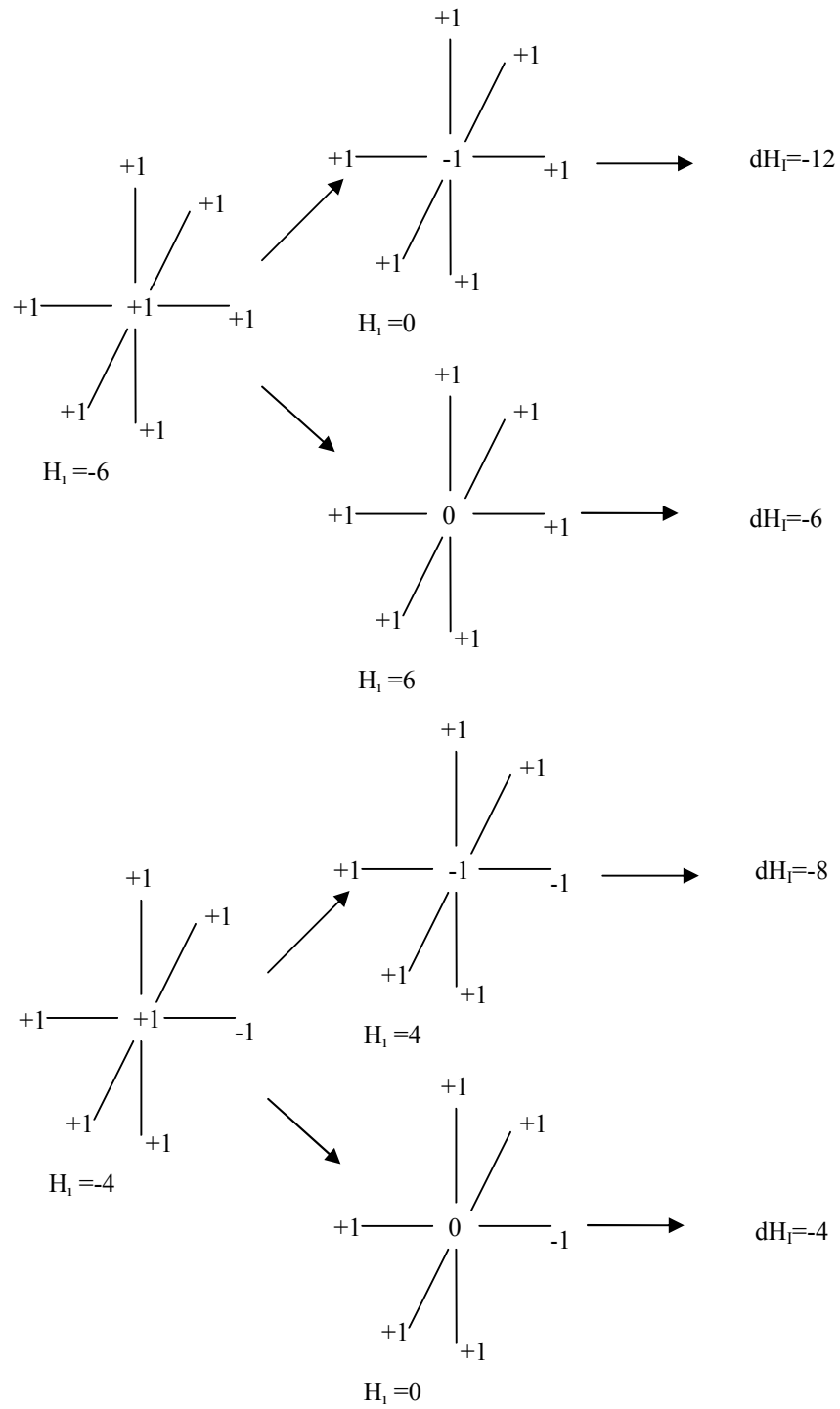
$$H_T^t = H_T^{t+1} \quad (3.3)$$

$$H_I^t + H_K^t = H_I^{t+1} + H_K^{t+1} \quad (3.4)$$

$$H_K^{t+1} = H_I^t - H_I^{t+1} + H_K^t \quad (3.5)$$

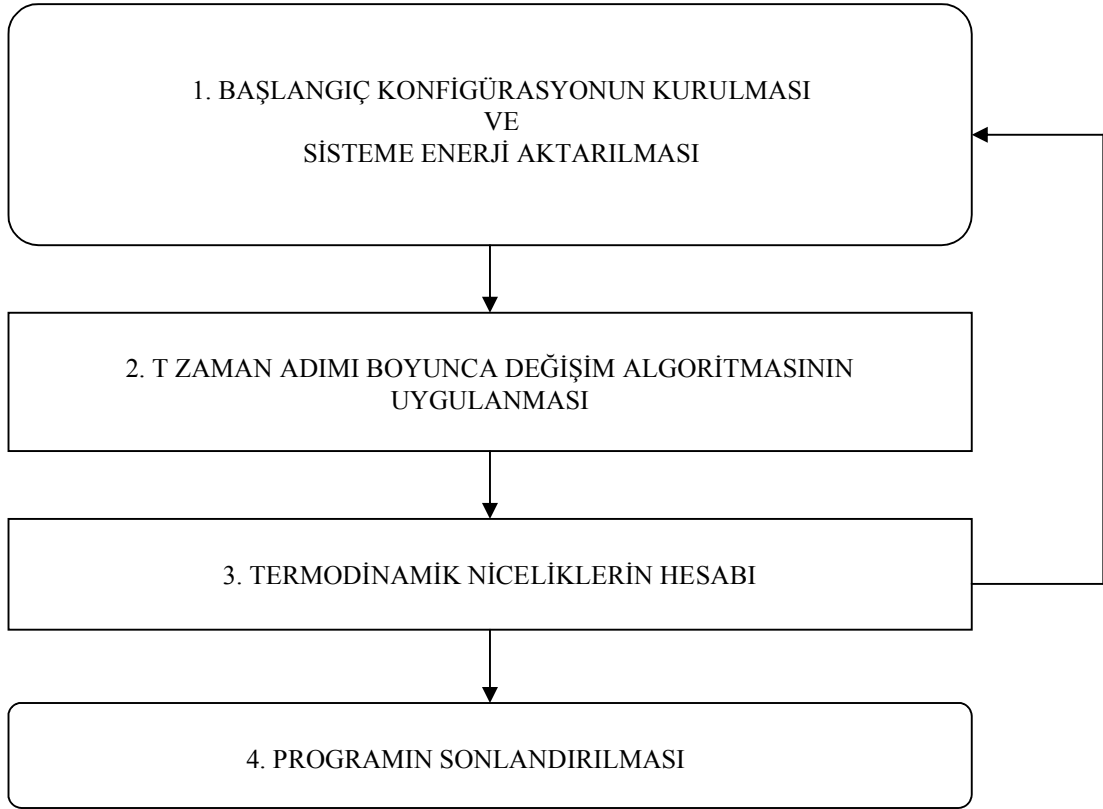
$$H_K^{t+1} = H_K^t + dH_I \quad (3.6)$$

Şekil.3.2' de Ising enerjisindeki değişime göre kabul görmüş yeni konfigürasyonlar görülmektedir. Spinlerin tümünün +1 olduğu ferromanyetik taban durumunda merkez spinin -1' e dönebilmesi için 6 birim, 0' a dönebilmesi için 12 birim enerji alması gerektiği görülmektedir ($dH_I < 0$) (Şekil 3.2.a). Şekil 3.2.b' de ise spin sisteminin, merkez spinin -1' e dönebilmesi için 8 birim, 0' a dönebilmesi için 4 birim enerjiyi dışarı vermesi gerekmektedir ($dH_I > 0$). Üçüncü bit parite bittir. CA' nın zamanla dama tahtası üzerinde gelişimini sağlamakta, böylece Ising modelin “ CA ” ile simülasyonunu mümkün kılmaktadır.



Şekil 3.2. $J=-1, K=D=L=0$ parametre seti için taban durum konfigürasyonunun tespiti ve iç enerjideki değişim, ΔH_I

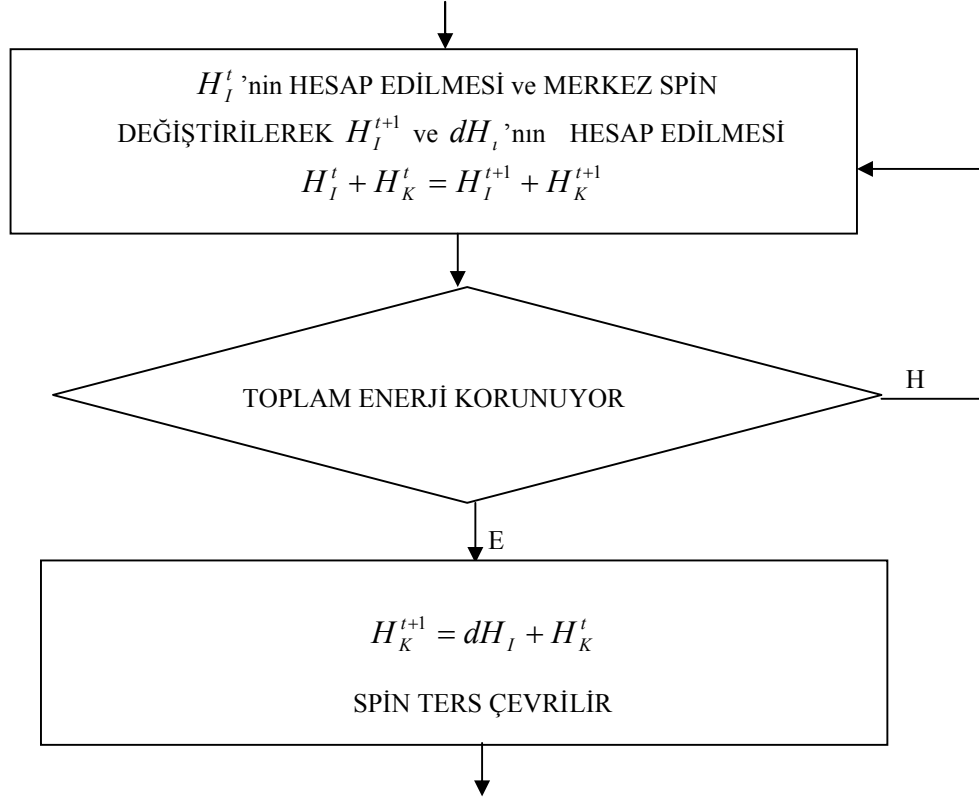
Şekil.3.3 de tüm algoritma bir akış çizelgesi ile özetlenmiştir. Kutucuklar algorithmanda takip edilen adımlarla etiketlenmiştir. Buraya kadarki değişim algoritması T zaman adımı boyunca uygulanmaktadır (Şekil 3.4).



Şekil 3.3. Standart algoritmanın akış çizelgesi

Üçüncü adımda verilen bir toplam enerji değeri için sistemin sıcaklığı aşağıdaki şekilde tanımlanan kinetik enerji ortalama değerlerinden elde edilir.

$$\langle E_i \rangle = \frac{\sum_{n=0}^3 n e^{-4n\beta}}{\sum_{n=0}^3 e^{-4n\beta}} \quad (3.7)$$



Şekil 3.4. Değişim algoritmasının akış çizelgesi

Termodinamik niceliklerin spin başına ve zaman adımı başına ortalama değerleri

$$M = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i \quad (3.8)$$

$$H = K \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 S_j^2 + J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + D \sum_i S_i^2 + L \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^2 S_j + S_i S_j^2) \quad (3.9)$$

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial h} = (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) / kT \quad (3.10)$$

$$C = \partial H_I / \partial T = N(\langle H_I^2 \rangle - \langle H_I \rangle^2) / (kT)^2 \quad (3.11)$$

$$U_L = 1 - \langle M^4 \rangle / (3 \langle M^2 \rangle^2) \quad (3.12)$$

şeklinde elde edilir. Alınganlık ve öz ısı ise manyetizasyon ve iç enerjideki dalgalanmalardan elde edilmektedir. Termodinamik niceliklerin zaman ortalamaları ise

$$\langle a \rangle = \frac{1}{t} \sum_{i=1}^t a(t) \quad (3.13)$$

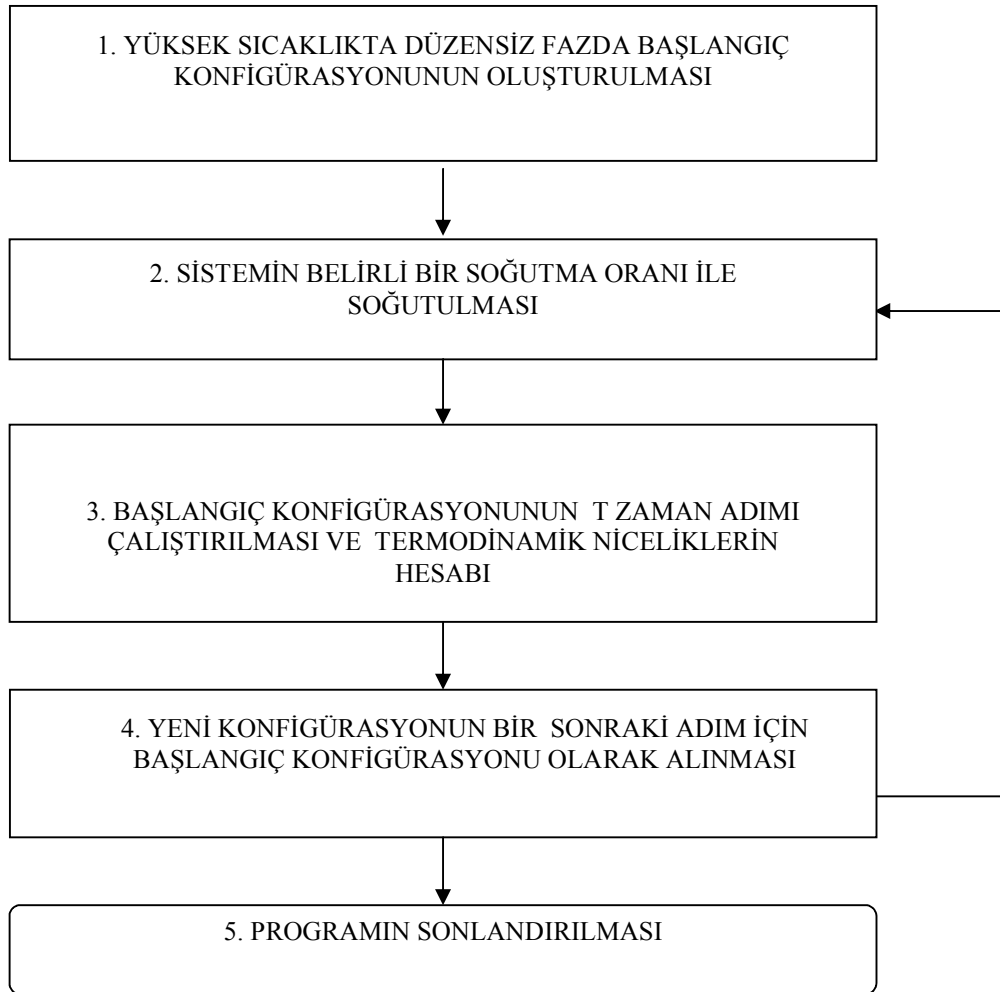
ile hesap edilir.

İki boyutlu Blume Capel (BC) modelin cellular automaton ile incelenebilmesi için Creutz Cellular Automaton algoritmasından standart algoritma türetilmiştir. Standart algoritma $0 \leq D/J \leq 1.5$ aralığında ikinci derece faz geçişi gösterirken $D/J=2$ ' de birinci derece faz geçişi sergilemiş, modeli sahip olduğu üçlü kritik nokta $1.5 < D/J < 2$ aralığında tahmin edilmiştir[13,76]. Tez çalışmasında ise soğutma algoritması kullanılarak hesaplamalar tekrarlanmış ve üçlü kritik nokta 1.96 ve 1.97 aralığında olduğu belirlenmiştir. Bu tahmin üçlü kritik noktayı $D/J=1.9655$ olarak tahmin eden MC hesaplamaları ile uyumludur[84,111]. 2-boyutlu spin-1 Ising model için yapılan hesaplamalar algoritmanın ikinci derece faz geçişlerini taklit etmekteki başarısını bir kez daha ortaya koymuştur. Üç boyutlu Blume Capel için cellular automaton ile yapılan hesaplamalar ise standart algoritmanın yarı kararlı durumları üretememesinden dolayı modelin $D/J=3$ ' e kadar birinci derece faz geçişlerini ikinci derece faz geçişlerinden ayırt edemediği görülmüştür. Bu nedenle standart algoritmayı temel alan soğutma algoritması türetilmiştir.

3.2.2. Soğutma algoritması

Soğutma algoritması, başlangıç prosedürü ve ölçümlerin alınması olmak üzere iki temel bölümden oluşmaktadır. Başlangıç prosedüründe, ilk olarak örgü üzerindeki spinler modelin mutlak sıfırda sahip olduğu taban durumda alınır. İkinci adımda göz

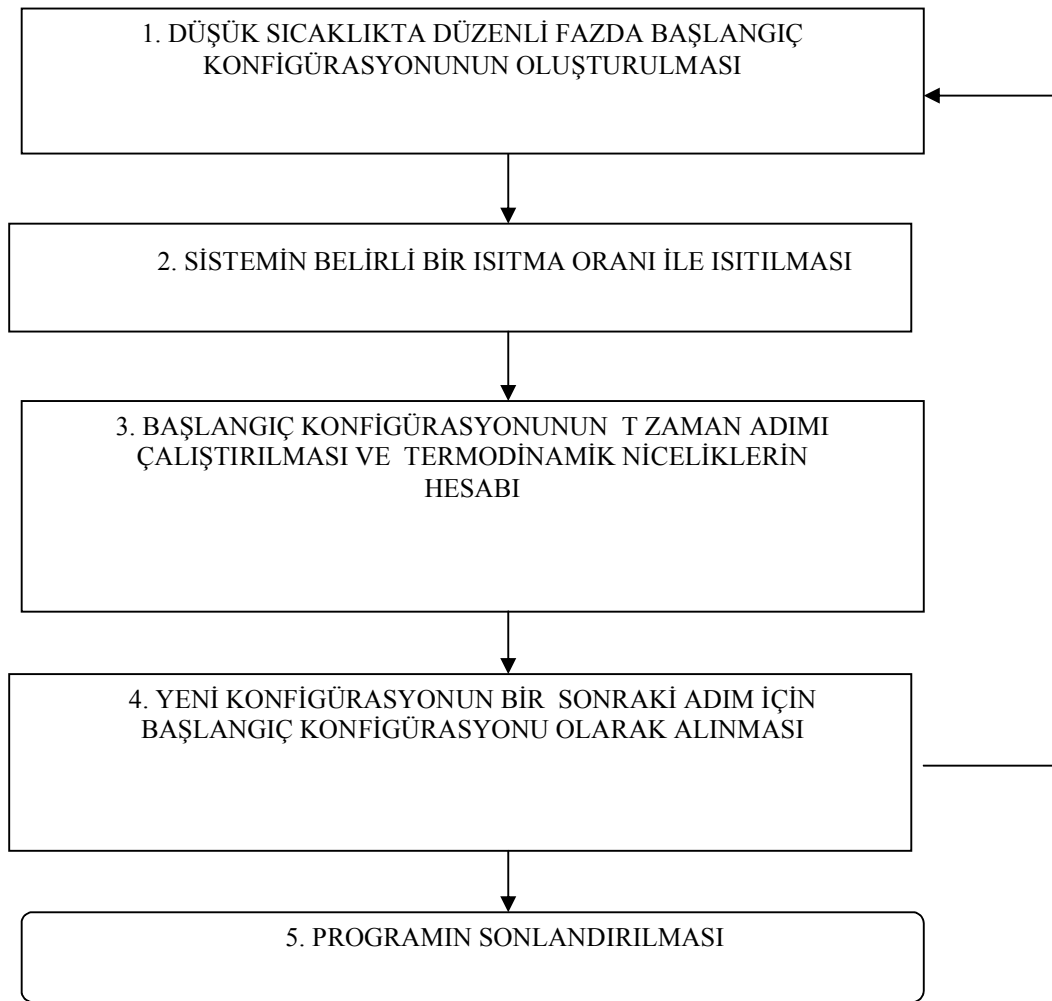
başına düşen kinetik enerji, her spin dönmesi için gerekli Ising spin enerjisindeki maksimum değişime eşit alınarak, ikinci değişken yoluyla, sisteme verilir. Bu konfigürasyon 20000 CA (Cellular Automaton) adımı için çalıştırılır. Böylece başlangıç prosedürü tamamlanır. Soğutma işleminin ilk adımında, düzensiz yapıdaki son konfigürasyon soğutma işlemi için başlangıç konfigürasyonu olarak alınır. Soğutma işlemi boyunca enerji spin sisteminden ikinci değişken (demon) yardımıyla alınır ve T zaman adımı boyunca çalıştırılır. Demon tarafından H_k kinetik enerjili hücreden alınan enerji miktarı (soğutma hızı $\times H_k$) kadardır. Her toplam enerjiye karşılık gelen sonuç konfigürasyon bir sonraki için başlangıç teşkil eder. Şekil 3.5’ te tüm algoritma bir akış çizelgesi ile özetlenmiştir. “4” ile etiketlenen kutucukta Şekil.3.4’de görülen değişim algoritması uygulanmaktadır.



Şekil 3.5. Soğutma algoritmasının akış çizelgesi

3.2.3. Isıtma algoritması

Çift tekrarlayan faz geçişlerinde düşük sıcaklık bölgesinde görülen faz geçişlerini kolayca elde edebilmek için soğutma algoritmasından türetilen ısıtma algoritması, başlangıç prosedürü ve ölçümlerin alınması olmak üzere iki temel bölümden oluşmaktadır. Şekil 3.6’da ısıtma algoritmasının akış şeması verilmektedir.



Şekil 3.6. Isıtma algoritmasının akış çizelgesi

Başlangıç prosedüründe, ilk olarak örgü üzerindeki spinler modelin mutlak sıfırda sahip olduğu taban durumda alınır. İkinci adımda göz başına düşen kinetik enerji, örgü noktalarının bir kısmına ikinci değişken yoluyla rasgele dağıtılır. Bu konfigürasyon 20000 CA (cellular automaton) adımı için çalıştırılır ve düzenli

yapıda bir konfigürasyon elde edilir. Üçüncü adımda, düzenli yapıdaki son konfigürasyon ısıtma işlemi için başlangıç konfigürasyonu olarak alınır ve Isıtma işlemi boyunca enerji spin sistemine ikinci değişken (demon) yardımıyla verilir. Demon tarafından H_k kinetik enerjili hücreye verilen enerji miktarı (ısıtma oranı $\times H_k$) kadardır. t zaman adımı boyunca uygulanan ısıtma işleminin sonunda termodinamik nicelikler hesaplanır. Üçüncü değişkenden dolayı iki Cellular Automaton adımı bir Monte Carlo adımına karşılık gelir. Soğutma algoritmasında olduğu gibi her sonuç konfigürasyon bir sonraki için başlangıç konfigürasyonu teşkil eder.

4. BULGULAR VE TARTIŞMA

Bu tez çalışması kapsamında; ferromanyetik bilineer etkileşimli, Blume Capel model Cellular Automaton algoritmaları ile incelendi. Simülasyon çalışmalarında, Creutz Cellular Automaton algoritmasını temel alan standart, soğutma ve ısıtma algoritmaları kullanıldı. Soğutma algoritması ile çok yüksek sıcaklıklarda oluşturulan bir konfigürasyondan başlayarak sistemin belirli bir oranda soğutulması ile düşük sıcaklıktaki yapıya erişilir. Isıtma algoritmasında ise çok düşük sıcaklıklarda oluşturulan bir konfigürasyondan başlayarak sistem belli bir oranda ısıtılır ve yüksek sıcaklıkta bir yapı elde edilir. Her iki algoritma da özellikle ikinci derece faz geçiş bölgesinden birinci derece faz geçiş bölgesine doğru giderken ortaya çıkan yarı kararlı durumları tam olarak sergilemektedir. Çalışma kapsamındaki esas amaç, farklı algoritmaların dinamik davranış üzerine etkisinin araştırılmasıdır. Bunun için farklı Creutz cellular automaton algoritmaları kullanılarak cellular automaton algoritmalarının dinamik davranışı test edilmiştir.

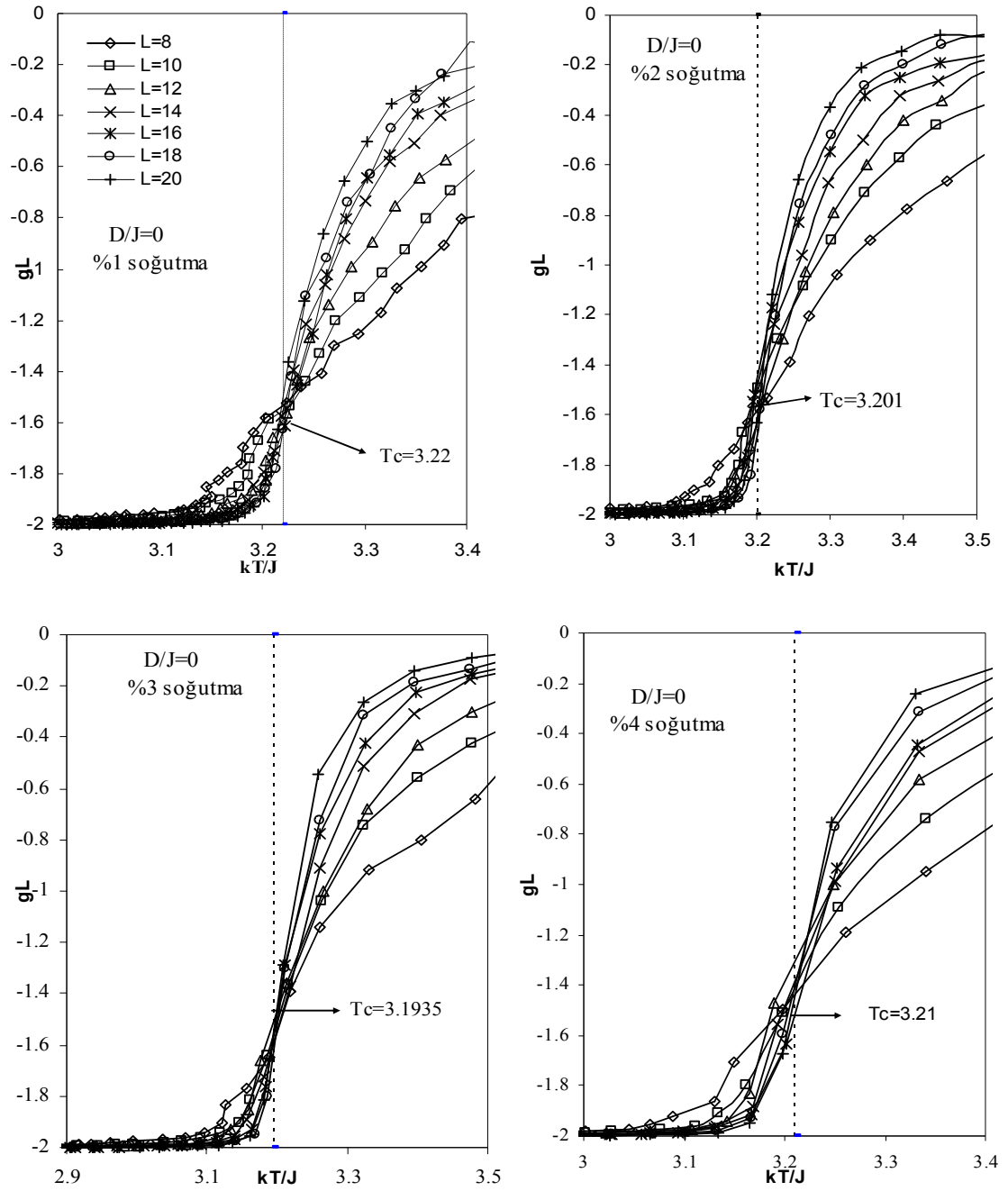
Hesaplamalar, $D/J = 0, 1.96, 1.97$ ve 1.98 parametre uzayında $L=20,40,60,80,100$ kenar uzunluklu basit kare ve $D/J = 0, 2.82$ ve 2.9 parametre uzayında $L=8,10,12,14,16,18,20$ kenar uzunluklu basit kübik örgüler üzerinde yapıldı. Tüm hesaplamalarda, periyodik sınır şartları kullanılarak spin başına ve 1 000 000 cellular automaton zaman adımı üzerinden ortalamalar alınmıştır.

İlk olarak Blume-Capel modelin faz diyagramına göre ikinci derece faz geçişi gösteren $D/J=0$ parametre uzayında modelin dinamik davranışının algoritmaya bağımlılığının test edilmesi amacıyla; basit kare örgüde soğutma oranı hücre başına $0.01 H_k$ ve $0.04 H_k$, ısıtma oranı hücre başına $0.04 H_k$; basit kübik örgüde soğutma oranı, hücre başına $0.005 H_k, 0.01 H_k, 0.02 H_k, 0.03 H_k, 0.04 H_k, 0.05 H_k$, ısıtma oranı ise hücre başına $0.04 H_k$ alınmıştır. Tüm algoritmalar ve farklı soğutma oranları için dinamik kritik z 3 farklı yöntemle hesaplanarak değerlendirilmiştir.

4.1. Basit Kare Örgüde $D/J=0$ Parametre Uzayındaki Statik Kritik Üslerin Soğutma Oranına Bağlı Olarak Hesaplanması

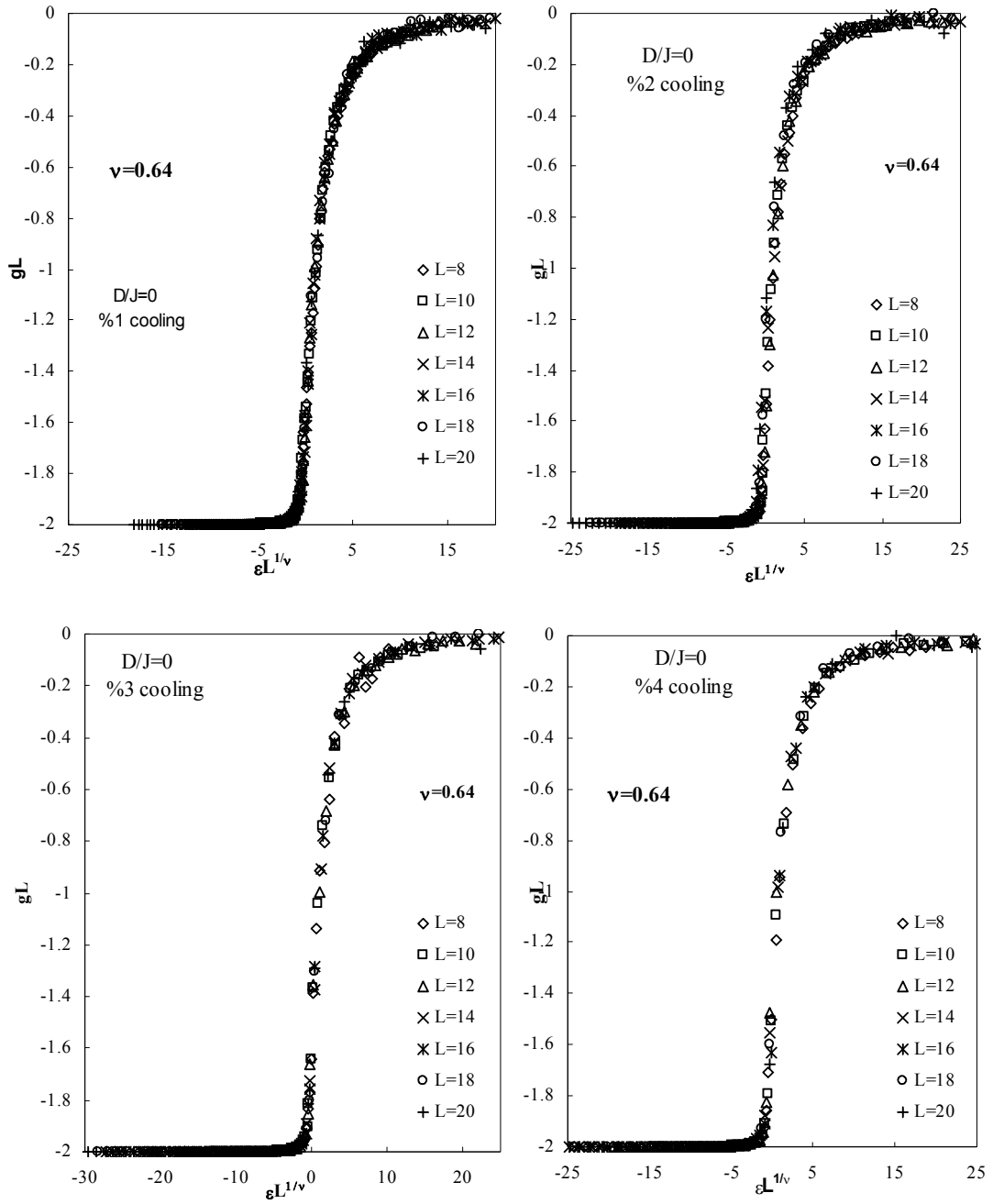
İlk olarak, basit kübik örgüde, ikinci derece faz geçiş bölgesinde yer alan $D/J=0$ parametre uzayında $L=8, 10, 12, 14, 16, 18$ ve 20 kenar uzunlukları için soğutma algoritması kullanılarak hücre başına $0,01 H_k, 0,02 H_k, 0,03 H_k, 0,04 H_k$ soğutma oranı için modelin statik üsleri sonlu örgü ölçeklemesi ile test edilmiştir. Sonlu örgü ölçeklemesinde örgü kritik sıcaklık değerleri, $L=8, 10, 12, 14, 16, 18$ ve 20 kenar uzunluklu örgüler için elde edilen $(kT/J, g_L)$ grafikleri Şekil 4.1 de verilmektedir. Belirli bir noktada kesişen g_L-kT/J eğrileri, o noktadan sonra birbirinden uzaklaşmaktadır. Tüm örgülerin g_L eğrilerinin birbirleri ile kesiştikleri bu nokta, sonsuz örgü kritik sıcaklık değerini vermektedir[103]. Şekil 4.1'deki Binder oranlarının kesim noktasından sonsuz örgü kritik sıcaklığı tespit edildi. Bu tespitteki hata, kesim noktasına en yakın iki nokta aralığının yarısı kadardır.

Binder oranının sonlu örgü ölçekleme ifadesi olan 2.22 eşitliği kullanılarak basit kübik örgüde $\nu=0,64$ ve kritik sıcaklık için de sonsuz örgü kritik sıcaklık değerleri kullanıldığında, sonlu örgüler için hesaplanan g_L binder oranlarının $\varepsilon L^{1/\nu}$ ye karşı değişim grafiği çizildiğinde tüm noktaların tek bir doğru üzerinde toplandığı görülür. Şekil 4.2'deki grafiklerde farklı soğutma oranları için g_L 'nin ölçekleme grafikleri görülmektedir. Burada, $\varepsilon = \frac{T - T_c(\infty)}{T_c(\infty)}$ olarak alınmıştır. Bu davranış şekli tüm soğutma oranları için $\nu=0,64$ olduğu sonucunu verir.



Şekil 4.1. (kT/J , U_L) grafiklerinin kesim noktasından tespit edilen kritik sıcaklıklar

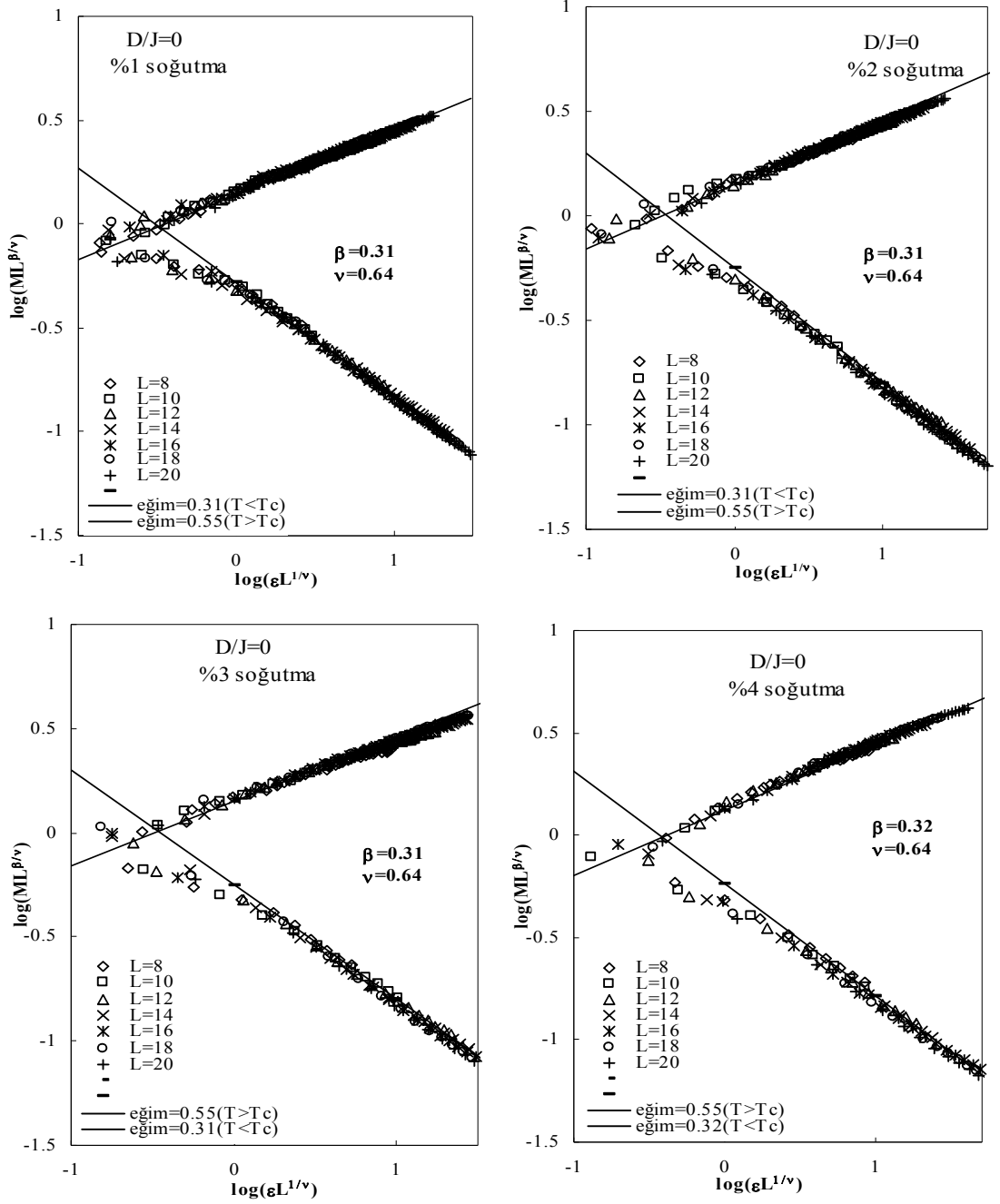
Binder kümülantının kesim noktasından elde edilen T_C kritik sıcaklıkları kullanılarak yapılan analizlerde farklı örgüler için elde edilen kümülant verilerinin beklendiği şekilde $v=0,64$ için tek bir eğriye uyduğu görüldü (Şekil 4.2).



Şekil 4.2. $D/J=0$ parametre uzayında $0,01 H_k$, $0,02 H_k$, $0,03 H_k$, $0,04 H_k$ soğutma oranları için binder kümülantının ölçeklenmesi.

Düzen parametresi için 2.19 ile verilen sonlu örgü ölçeklemesi için bağıntıda görünen kritik üsler yerine sonsuz örgü için verilen değerler alınarak $ML^{\beta/\nu}$ 'nin $L^{1/\nu}\epsilon$ 'ye karşı log-log grafikleri çizildiğinde büyük $x = L^{1/\nu}\epsilon$ değerlerinde farklı örgüler için çizilen grafiklerin tek bir doğruya uyması ve o doğrunun eğiminin kritik üssü vermesi gerekmektedir. Düzen parametresi için $\nu=0,64$ ve $\beta=0,31$ değerlerinde

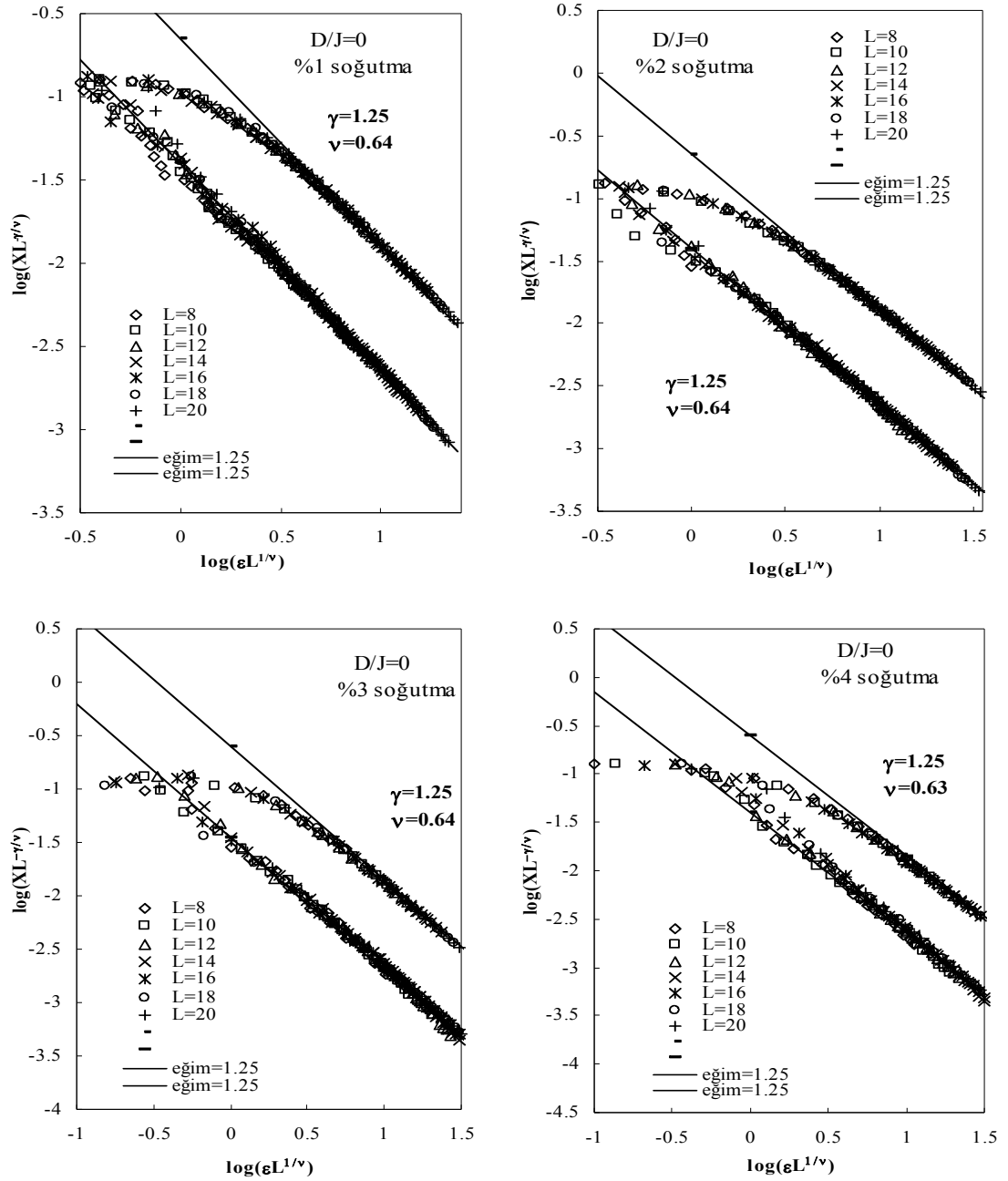
yapılan ölçeklemede verilerin $T < T_C$ ve $T > T_C$ bölgesinde 0,31, $T > T_C$ ve $T > T_C$ bölgesinde ise 0,55 eğimli birer doğruya uyduğu görüldü (Şekil 4.3.).



Şekil 4.3. $D/J=0$ parametre uzayında 0,01 H_k , 0,02 H_k , 0,03 H_k , 0,04 H_k soğutma oranları için düzen parametresinin ölçeklenmesi.

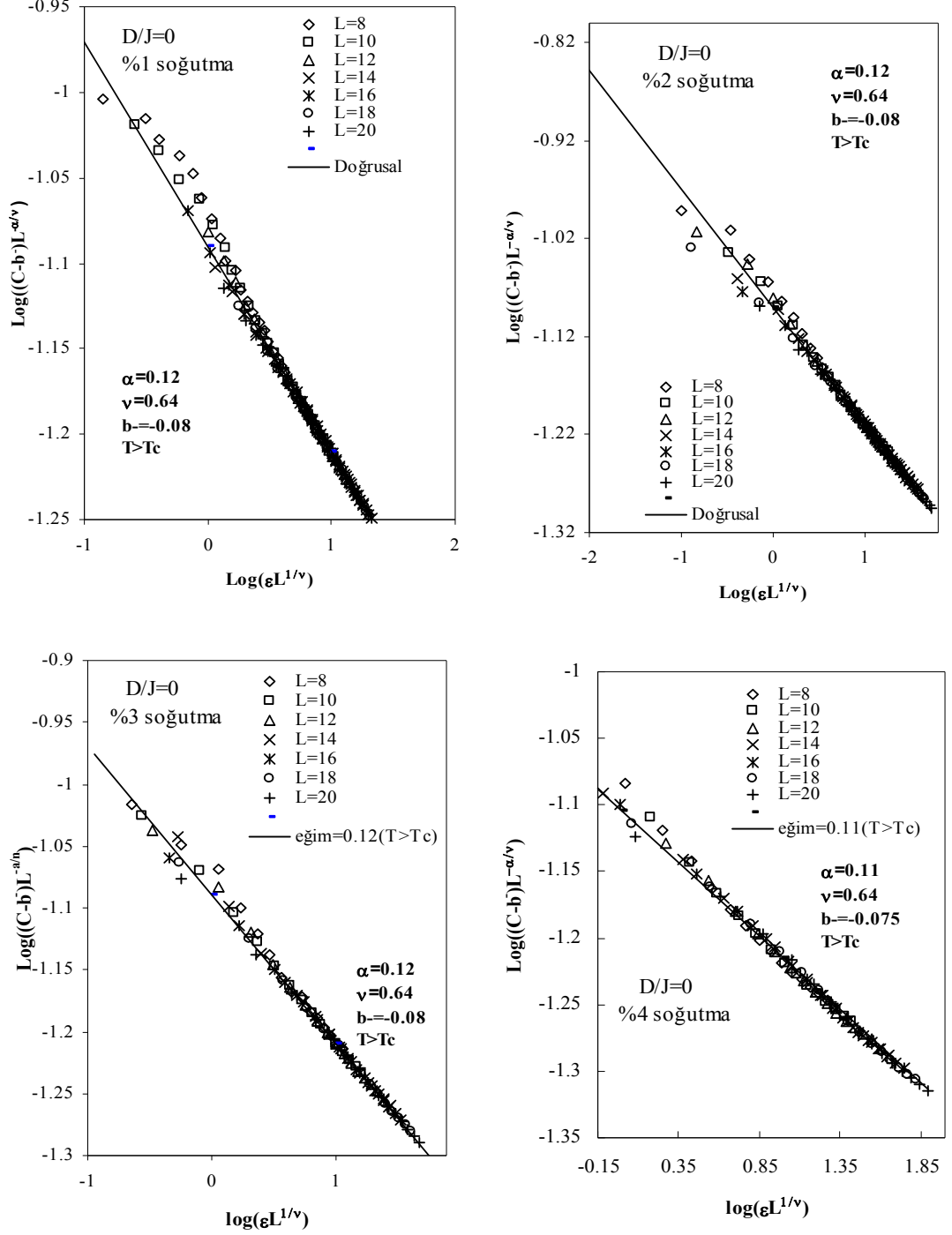
Düzen parametresi için yapılan ölçeklemeye benzer olarak manyetik alınganlık için kendi ölçekleme ifadesi kullanılarak $\nu=0,64$ ve $\gamma=1,25$ değeri ile yapılan ölçeklemede verilerin $T < T_C$ ve $T > T_C$ bölgelerinde 1,25 eğimli birer doğruya uyduğu

görüldü (Şekil 4.4). İndirgenmiş sıcaklık $T < T_C$ 'de $\varepsilon = (T - T_C)/T_C$, $T > T_C$ 'de ise $\varepsilon = (T - T_C)/T$ alınmıştır.

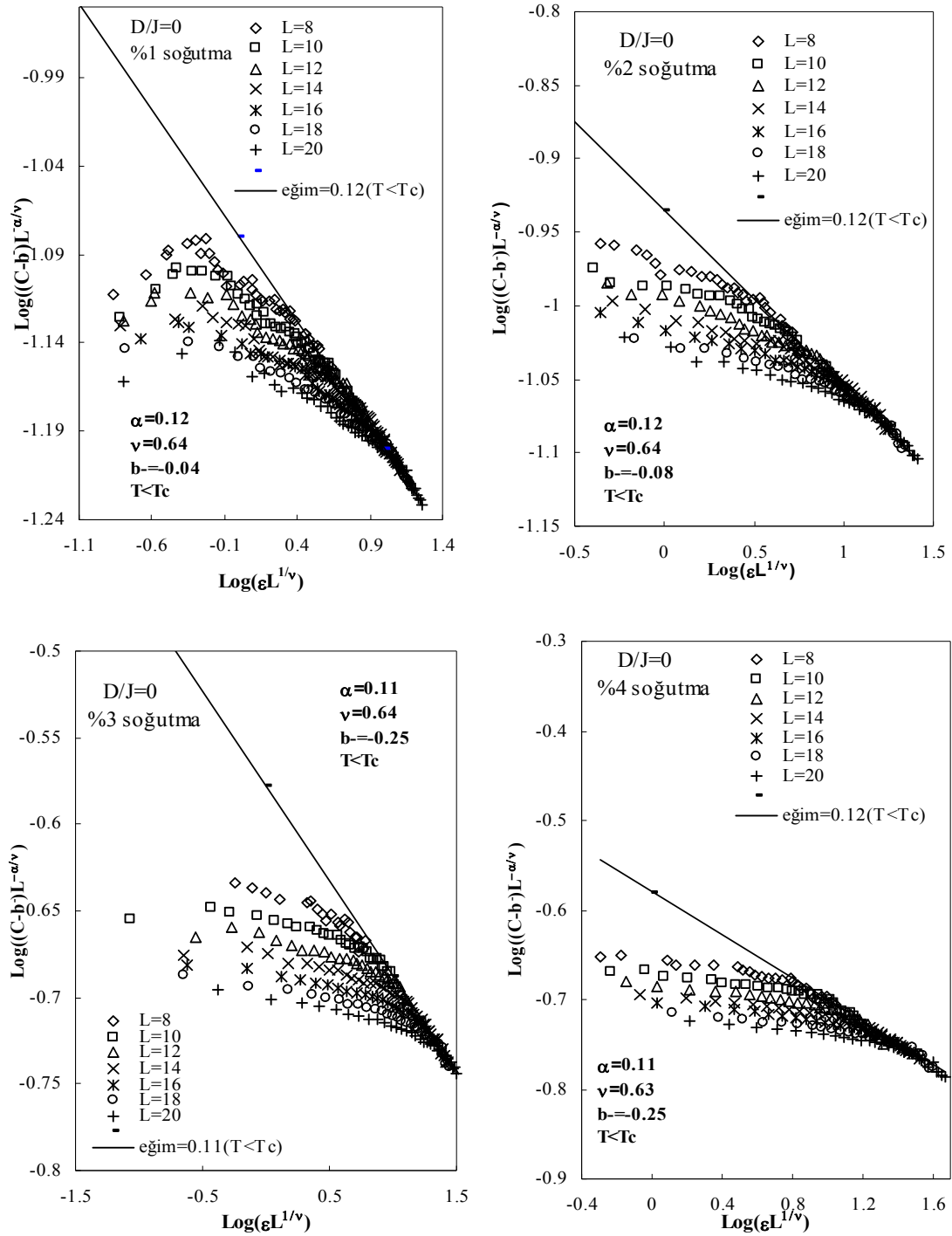


Şekil 4.4. $D/J=0$ parametre uzayında 0,01 Hk, 0,02 Hk, 0,03 Hk, 0,04 Hk soğutma oranları için manyetik alınganlığın ölçeklenmesi.

Özısı niceliği de 2.21 de verilen ölçekleme ifadesinde $\nu=0,64$ ve $\alpha=0,12$ kritik üsleri için ölçeklendiğinde verilerin $T>T_c$ (Şekil 4.5), $T<T_c$ (Şekil 4.6) bölgelerinde eğimi 0,12 olan birer doğruya uyduğu tespit edildi.



Şekil 4.5. $D/J=0$ parametre uzayında $T>T_c$ de 0,01 H_k , 0,02 H_k , 0,03 H_k , 0,04 H_k soğutma oranları için özısının ölçeklenmesi.



Şekil 4.6. $D/J=0$ parametre uzayında $T < T_c$ de $0,01 H_k$, $0,02 H_k$, $0,03 H_k$, $0,04 H_k$ soğutma oranları için özısının ölçeklenmesi.

Üç boyutlu Blume Capel model için daha önce yine soğutma algoritması kullanılarak yapılmış olan çalışmada soğutma algoritmasının üçlü kritik noktaya yaklaşıldığı

bölgede kritik üsleri belirlemede standart algoritmadan farklı özellikler ortaya koyduğu söylenmiştir[39,51]. Standart algortima ile model $D/J=3$ ' kadar ikinci derece faz geçişi gösterirken soğutma algoritması ile $D/J=2,82$ den sonra birinci derece faz geçişi göstermektedir. Bu bilgidен hareketle bu kez basit kübik örgüde soğutma oranının ikinci derece faz geçiş bölgesindeki $D/J=0$ parametre uzayında statik üslere bir etkisinin olup olmadığı ilk kez araştırıldı. Yapılan ölçekleme analizleri sonucunda kritik üs değerlerinin 3-boyutlu Ising model kritik üsleri ile uyumlu olduğu görüldü ($\alpha=\alpha'=0,12$; $\beta=\beta'=0,31$; $\gamma=\gamma'=1,25$, $v=v'=0,64$). Bu parametre uzayında farklı soğutma oranının statik üsler üzerinde bir etkisinin olmadığı tespit edilmiştir. Takip eden alt bölümde aynı parametre bölgesi için soğutma oranının etkisi, bu kez dinamik davranış için incelenmiştir.

4.2. İkinci Derece Faz Geçiş Bölgesinde ($D/J=0$) Dinamik Kritik Üs Hesabı ve Algoritma Bağımlılığı

Monte Carlo algoritmaları ile daha önce yapılmış olan birtakım çalışmalarda dinamik davranışın algoritmaya bağlı olduğu, global ve lokal algoritmalarda farklı davranışlar sergilediği ortaya konmuştur. Diğer bir söyleyişle, sistemin dinamik davranışı tam olarak algoritmaya bağlıdır. Önceki yıllarda, standart cellular automaton algoritmasının dinamik davranışı test edilmiş[79] ancak soğutma ve ısıtma algoritmalarının dinamik davranışı ilk olarak bu çalışma kapsamında incelenmiştir. Böylece, farklı cellular automaton algoritmaları kullanılarak, cellular automaton algoritmalarının dinamik davranışı incelendi.

İkinci derece faz geçiş bölgesi, birinci derece faz geçiş bölgesi ve üçlü kritik noktada, iki ve üç boyutlu Blume Capel model için hesaplamalar yapılmıştır. Takip eden bölümlerde bu sonuçlar sırasıyla verilmektedir.

$D/J=0$ parametre uzayı Blume Capel modelin ikinci derece faz geçişi sergilediği bölgede yer almaktadır. Bu bölgede iki ve üç boyutlu örgülerde standart, farklı soğutma oranları kullanılarak soğutma ve ısıtma algoritmalarının dinamik davranışı test edilmiştir.

Zamana bağı korelasyon fonksiyonu, durulma zamanı ve dinamik kritik üs hesabı

Bu çalışmada, (2.23) nolu ifadede verilen zamana bağı korelasyon fonksiyonu, herbiri N tane elemana sahip $\{a_i\}$ ve $\{b_i\}$ veri kümeleri arasında tanımlı standart korelasyon ifadesi kullanılarak hesaplanmaktadır.

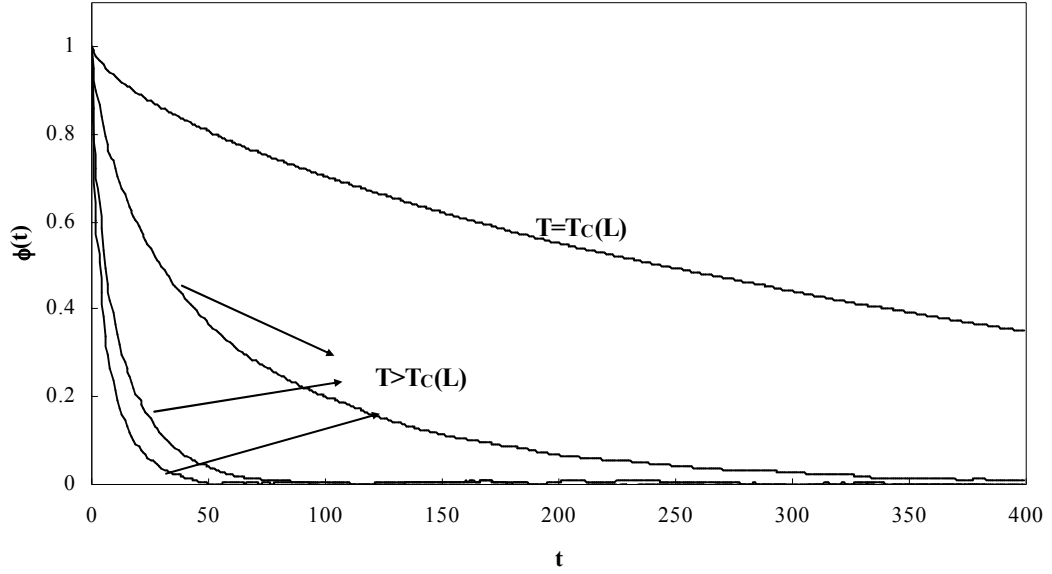
$$\phi(n) = \frac{N \sum_{i=1}^N a_i b_i - (\sum_{i=1}^N a_i)(\sum_{i=1}^N b_i)}{(N \sum_{i=1}^N a_i^2 - (\sum_{i=1}^N a_i)^2)^{1/2} (N \sum_{i=1}^N b_i^2 - (\sum_{i=1}^N b_i)^2)^{1/2}} \quad (4.1)$$

Burada $\{b_i\}$ veri kümesi, $\{a_i\}$ veri kümesi n eleman kadar kaydırılarak oluşturulmaktadır. $\{a_i\}$ kümesinin eleman sayısı “cellular automaton” ın gelişimini sağlayan zaman adımı sayısına eşittir.

Durulma zamanı hesabı

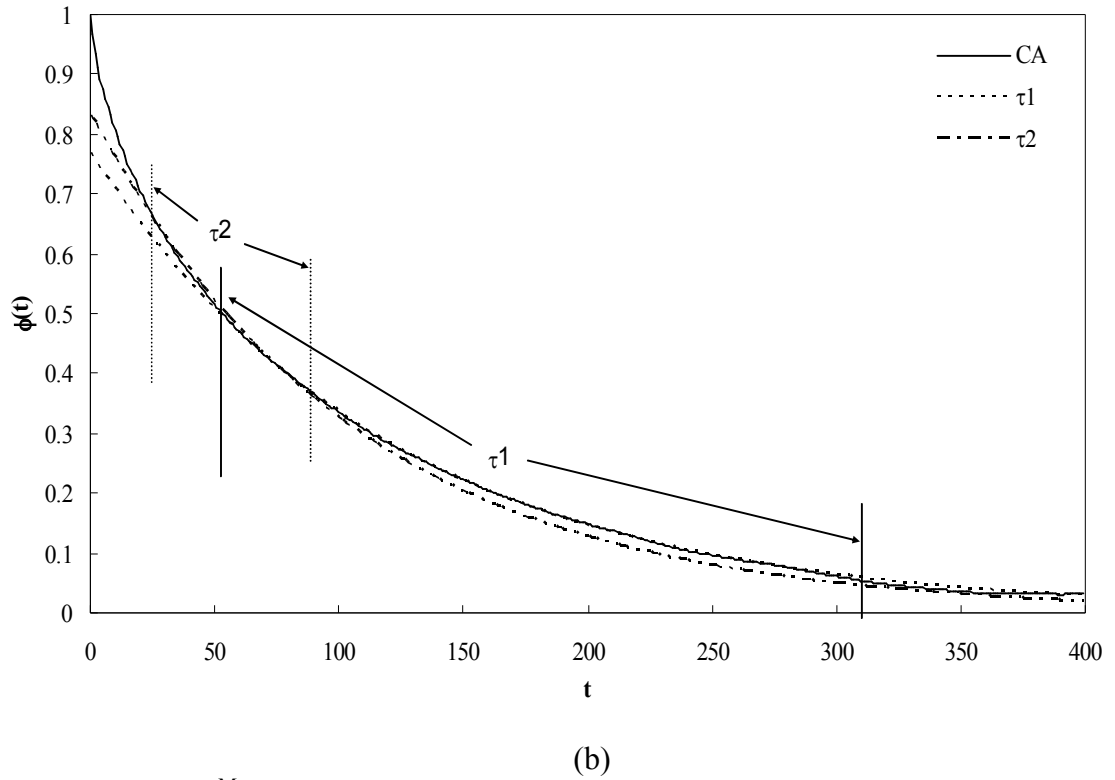
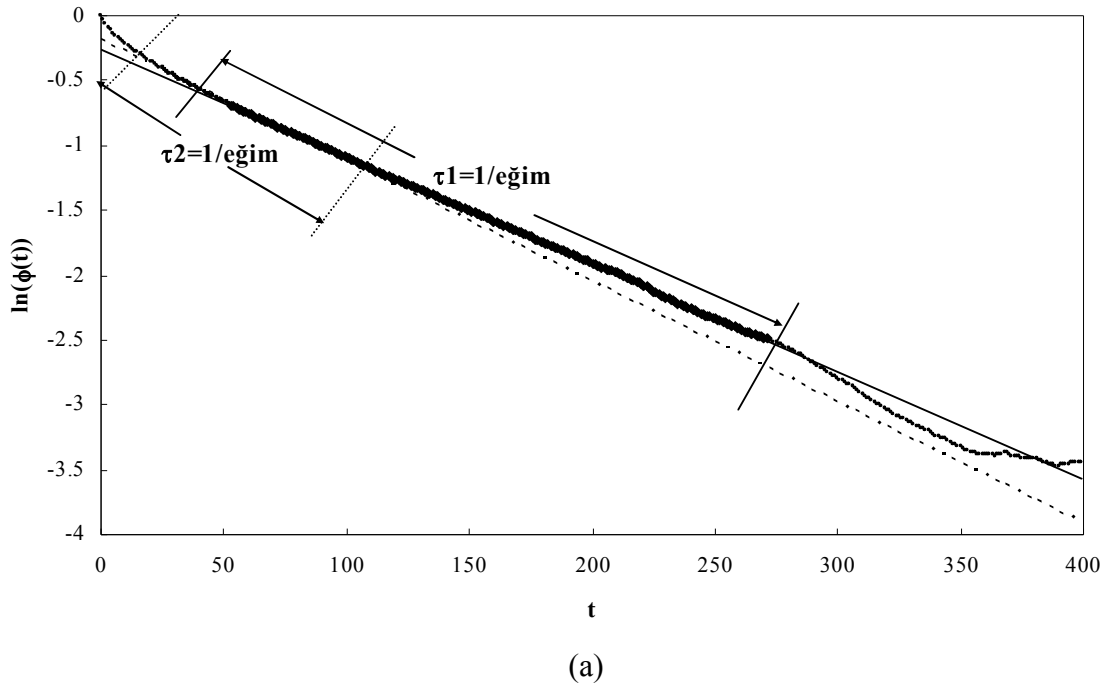
Zamana bağı korelasyon fonksiyonunun zaman aralığı t 'ye karşı değişimde (2.26) bağıntısına uygun olarak en büyük τ 'yu veren bölge $e^{-t/\tau}$ üstel fonksiyonuna fit edilerek ilgili korelasyon fonksiyonu için doğrusal durulma zamanları hesaplandı.

Şekil.4.7 de soğutma algoritması 0,01 H_K için yapılan simülasyondan elde edilen $\phi^M(t)$ nin t zamanına karşı değişimi görülmektedir. Sıcaklık arttıkça $\phi^M(t)$ nin t zaman aralığına karşı değişimi daha hızlı bir şekilde üstel olarak sıfıra gider. Kritik sıcaklık civarında ise $\phi^M(t)$ daha üstel olarak daha yavaş şekilde sıfıra gitmektedir. Bu davranış 2 ve 3 boyuttaki tüm örgüler ve tüm algoritmalar için benzer bir yapıya sahiptir.



Şekil 4.7. $T \geq T_C$ bölgesinde $\phi^M(t)$ nin t zamanına karşı değişimi.

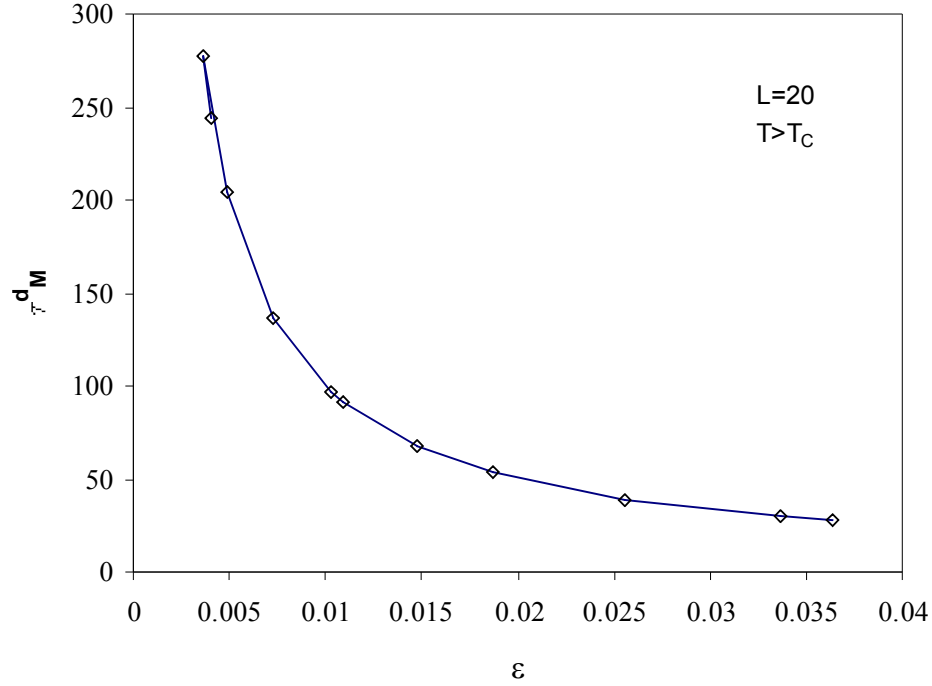
Her örgü için değişik sıcaklıklarda oluşturulan zamana bağlı korelasyon fonksiyonlarından (2.26)'da verilen tanıma göre belirlenen bölgelerdeki veriler, $e^{-t/\tau}$ üstel fonksiyonuna fit edilerek, $\ln(\phi^M(t))$ nin t 'ye karşı değişiminden karakteristik τ 'yu bulmak için eğim Şekil.4.8.a'da verildiği gibi bulunmuştur. Bulunan bu eğimler kullanılarak üstel fonksiyon Şekil 4.8.b'de gösterildiği gibi tekrar çizilmiş ve çizilen üstel fonksiyonun hamdata fonksiyonuna ne kadar uyduğu test edilmiştir. Karakteristik τ , sistemi karakterize eden en büyük τ yani en küçük eğim anlamına gelir. Şekil 4.8.a'da farklı 2 tane τ bulunmuştur. τ_2 ile τ_1 değeri birbirinden farklıdır. Şekil 4.8.b'de ise bulunan bu τ değerleri için fonksiyon tekrar çizilerek CA datası ile uyumluluğu gösterilmiştir. Buradan da anlaşılacağı gibi τ_2 ile çizilen fonksiyon, datanın az bir kısmına uyum gösterirken τ_1 ile çizilen neredeyse CA datasının tamamına yakın bir kısmına uymaktadır. Bu nedenle τ_1 sistemi karakterize eden “karakteristik τ ” olarak alınır.



Şekil 4.8.a. $\ln(\phi^M(t))$ nin t zamanına karşı değişiminden en büyük τ 'nın bulunması

b. Bulunan değerlerin yerine konularak $(\phi^M(t))$ ham datası ile uyumluluğu.

Daha sonra elde edilen eğimler kullanılarak her örgü için doğrusal durulma zamanının sıcaklıkla değişim grafikleri çizilmiştir. Şekil.4.9'da $L=20$ için çizilen bir örnek verilmektedir.



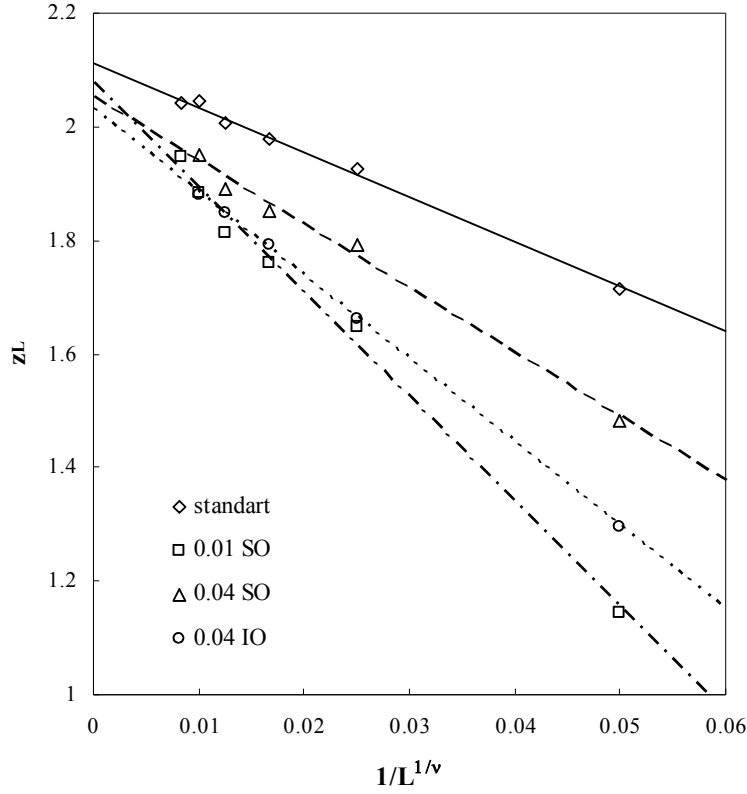
Şekil 4.9. $L=20$ kenar uzunluğuna sahip basit kübik örgüde τ_M^d 'nin $\varepsilon=(T-T_C(L))/T_C(L)$ ye karşı değişimi

Şekil 4.9. görüldüğü gibi doğrusal durulma zamanının sıcaklığa karşı değişimi, denklem 2.26 ile verilen kuvvet kanununa uygun bir davranış sergileyerek, $T \rightarrow T_C$ için ıraksamakta ve büyük T değerlerinde sıfıra gitmektedir.

4.2.1. Basit kare örgüde(2 boyutta) dinamik kritik üs z hesabı

Dinamik kritik üs z 'yi belirlemek için her örgü için kritik sıcaklıktan daha büyük sıcaklık bölgesine doğru sistemi karakterize eden τ değerleri tespit edildikten sonra, $\log(\tau_M^d)$ 'in $\log((T-T_C(L))/T_C(L))$ 'ye karşı değişiminin eğiminden yine her örgü için doğrusal dinamik kritik üs $z_M^d(L)$ değerleri elde edilir. Elde edilen $z_M^d(L)$ değerlerinin $1/L^{1/\nu}$ ye karşı değişiminden(sonsuz ekstrapolasyonundan) ise sonsuz örgü için doğrusal dinamik kritik üssün değeri bulundu (Şekil 4.10). Burada eğrinin

kesim noktası $\Delta=z\nu$ değerini vermektedir [27,79]. 2 boyutta, $D/J=0$ parametre uzayında $\nu = 1$ olduğu için $z(L)$ değerlerinden geçen doğrunun y eksenini kesim noktası $\Delta=z$ olacaktır.

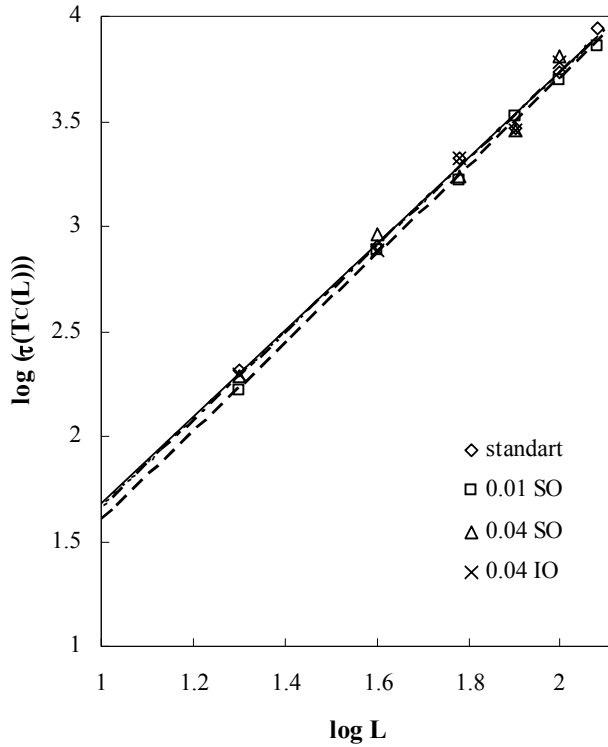


Şekil 4.10. $z_M^d(L)$ 'nin $1/L^{1/\nu}$ ye karşı değişimi

Şekil 4.10. da $D/J=0$ parametre uzayındaki basit kare örgüde yapılan simülasyonlar sonucunda bulunan z değerleri görülmektedir. Şekilden anlaşılacağı üzere basit kare örgüde kullanılan tüm algoritmalar için tespit edilen $z_M^d(\infty)$ değerleri 0,02 farkla birbirine uymaktadır.

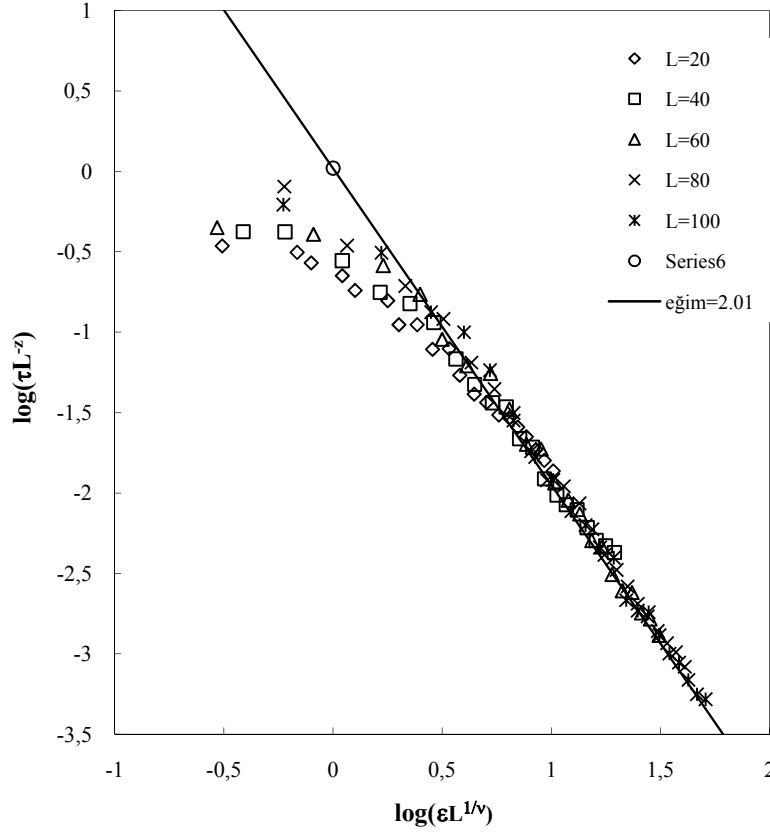
z_M^d 'nin hesaplandığı ikinci yöntem ise kritik sıcaklık $T=T_C(L)$ 'de doğrusal durulma zamanını örgü uzunluğu L 'ye bağlayan ve denklem 2.27 ile verilen dinamik sonlu örgü ölçekleme bağıntısı kullanılarak hesaplanabilmektedir. Bunun için manyetik alınganlık maksimumlarından belirlenen her örgünün kendi kritik sıcaklığında düzen parametresi için zamana bağlı korelasyon fonksiyonları oluşturulup $\exp(-t/\tau)$ üstel

fonksiyonuna fit edilerek $\log(\phi^M(t))$ 'nin t 'ye karşı değişiminin eğiminden her örgünün kendi kritik sıcaklığındaki doğrusal durulma zamanları tespit edilmiştir. $\log(\tau_M^d(L)) - \log L$ grafiğinin eğimi Şekil.4.11'de görüldüğü gibi doğrusal dinamik kritik üs z değerini vermektedir.



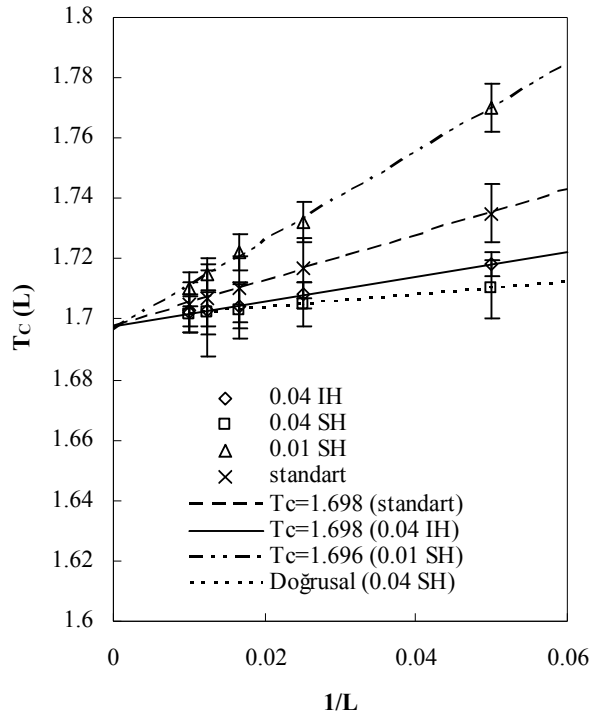
Şekil 4.11. $T=T_C(L)$ için $\log(\tau_M^d(L))$ 'nin $\log(L)$ ye karşı değişimi.

Doğrusal durulma zamanı için 2.29 nolu eşitlikte verilen dinamik sonlu örgü ölçekleme bağıntısı, sonlu örgülerde yapılmış olan hesaplamalardan dinamik sonlu örgü ölçekleme teorisini kullanarak sonsuz örgü dinamik kritik üs z 'nin değerini belirleme imkanı verir. Ölçekleme bağıntılarında sonsuz örgü kritik üs değerleri kullanılarak işlem yapılmaktadır. Ancak dinamik kritik üslerin sonsuz örgü değerleri için teorilerin ve diğer simülasyon tekniklerinin birleştiği tek bir değer yoktur. Bu yüzden $\log(\tau L^{-z})$ 'nin $\log(L^{-1/\nu} \varepsilon)$ 'a karşı değişim grafiği çizilerek $(L^{-1/\nu} \varepsilon)$ 'nin en büyük değerleri için sonlu örgülerde çizilen eğrilerin tek bir doğruya uyduğu z değeri belirlenmiştir (Şekil 4.12). Bu doğrunun eğiminin, sonsuz örgü için kullanılan z değerini doğruladığı tespit edilmiştir.



Şekil 4.12. $T=T_C(L)$ için $\log(\tau_M^d(L))$ 'nin $\log(L\epsilon)$ ye karşı değişimi.

Hesaplamalarda kullanılan kritik sıcaklıklar iki yöntemle bulunmuştur. İlki Şekil 4.1 de verildiği gibi örgü kritik sıcaklık değerleri her bir örgü için elde edilen $(kT/J, U_L)$ grafiklerinin kesim noktasından tespit edildi. Bu tespitteki hata, kesim noktasına en yakın iki nokta aralığının yarısı kadardır. Diğeri ise manyetik alınganlık piklerinin sıcaklık değerlerinin sonsuza ekstrapolasyonundan $(1/L \rightarrow 0)$ elde edildi (Şekil 4.13.). Sıcaklık tespitinde hata, pik genişliklerinin yarısı alınarak belirlendi.



Şekil 4.13. $T_c^z(L)$ nin $1/L$ 'ye karşı değişimi. Doğrusal eğimlerin y eksenini kestiği noktalar $T_c^z(\infty)$ değerini verir.

Buraya kadar anlatılan dinamik kritik üs z hesaplamaları soğutma oranı hücre başına 0,01 H_k ve 0,04 H_k , ısıtma oranı hücre başına 0,04 H_k değerleri için farklı algoritmalar ile test edilmiştir. Sonuçlar çizelge 4.1 'de verilmektedir.

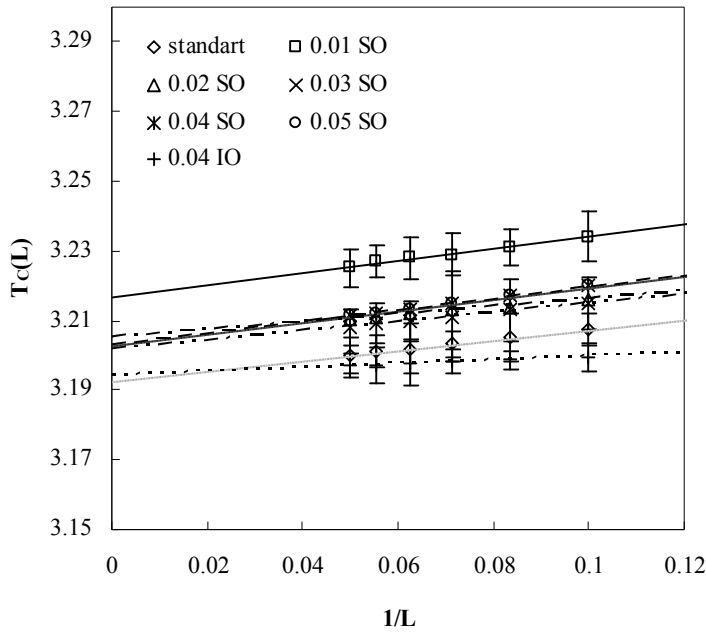
Çizelge 4.1. $D/J=0$ parametre uzayında basit kare örgü(2d) için bulunan değerler

2D BCM	$T_c(g_L)$	$T_c(eks.)$	$z(eks)$	$z(T(L)=T_c(L))$	$z(ölç.)$
standart	1.697	1.698	2.06	2.11	2.11
0.01 SO	1.693	1.696	2.11	2.01	2.11
0.04 SO	1.698	1.699	2.05	2.07	2.01
0.04 IO	1.699	1.698	2.03	2.07	2.03

$D/J = 0$ parametre uzayında iki boyutlu kare örgünün dinamik davranışı farklı algoritmalar kullanılarak incelenmiş ve bulunan sonuçların algoritmaya bağlı olmadığı tespit edilmiştir. Dinamik kritik üs $z \approx 2$ bulunmuştur. Bu sonuç literatürde daha önce farklı yöntem ve algoritmalar ile bulunan sonuçlarla uyumaktadır[33-36,86-97].

4.2.2. Basit kübik örgüde(3 boyutta) dinamik kritik üs z hesabı

$D/J = 0$ parametre uzayında iki boyutlu kare örgünün dinamik davranışını incelemek için yapılmış olan çalışmaların tamamı 3 boyutlu basit kübik örgü için de yapılmıştır. Basit kübik örgüde $L=8, 10, 12, 14, 16, 18$ ve 20 kenar uzunlukları için standart algoritma, soğutma algoritması ve ısıtma algoritması kullanıldı. Soğutma algoritması için hücre başına $0,005 H_k, 0,01 H_k, 0,02 H_k, 0,03 H_k, 0,04 H_k, 0,05 H_k$ soğutma oranı, ısıtma oranı ise hücre başına $0,04 H_k$ değerleri kullanılarak modelin dinamik davranışının algoritmaya bağlılığı incelendi. Şekil 4.14’de bu algoritmalar için bulunmuş olan $T_C^Z(L)$ değerlerinin $1/L$ ’ye karşı değişiminden $T_C^Z(\infty)$ değerleri elde edilir. Bu değerlerin tamamı Çizelge 4.3 ‘de verilmektedir.



Şekil 4.14. $T_C^Z(L)$ nin $1/L$ ’ye karşı değişimi. Doğrusal eğimlerin y eksenini kestiği noktalar $T_C^Z(\infty)$ değerini verir.

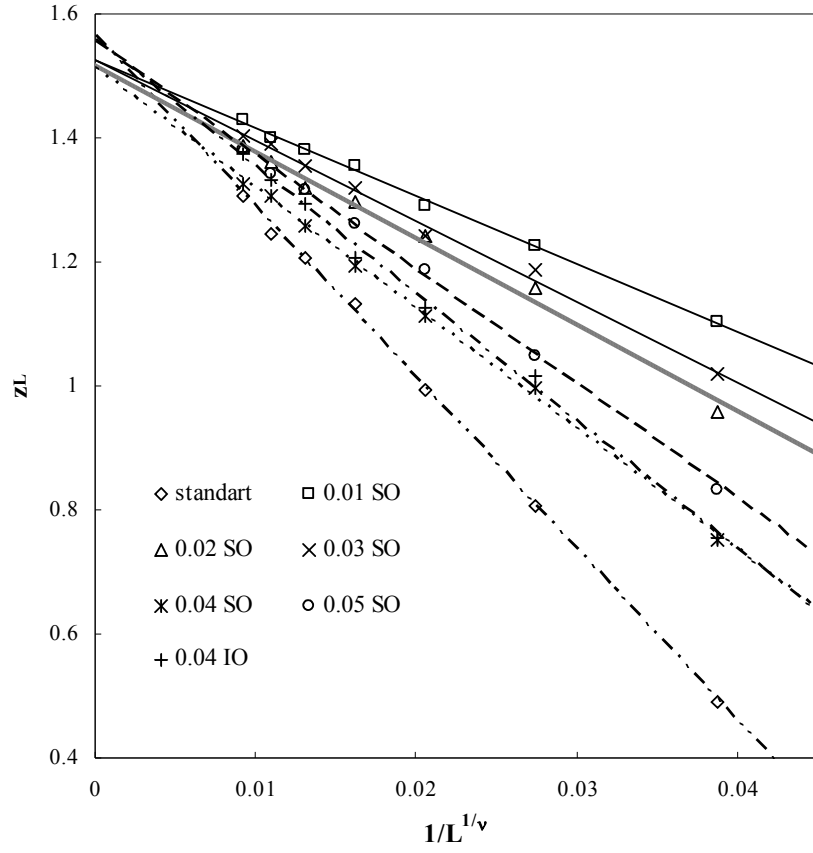
Bulunan $T_C^Z(\infty)$ değerleri tüm algoritmalar için ortalama $0,01$ ‘lık bir hata oranıyla birbirine uymaktadır. Ayrıca $T_C(\infty)$ için bulunmuş olan değerler daha önce 3 boyutlu Ising Modeli için farklı yöntemler kullanılarak bulunmuş olan $T_C(\infty)$ değerleriyle uyum içersindedir. Literatür değerleri Çizelge.4.2 de verilmektedir.

Çizelge 4.2.D/J=0 parametre uzayında basit kübik örgü (3d) için farklı yöntemlerle bulunan T_C literatür değerleri[40,55,70-72,81-82]

Cluster variation	Seri açılımı	Etkin alan teorisi	Bethe App.	Bethe-Peirls A	Cellular automaton
3.44	3.192	3.516	3.439	3.389	3.195

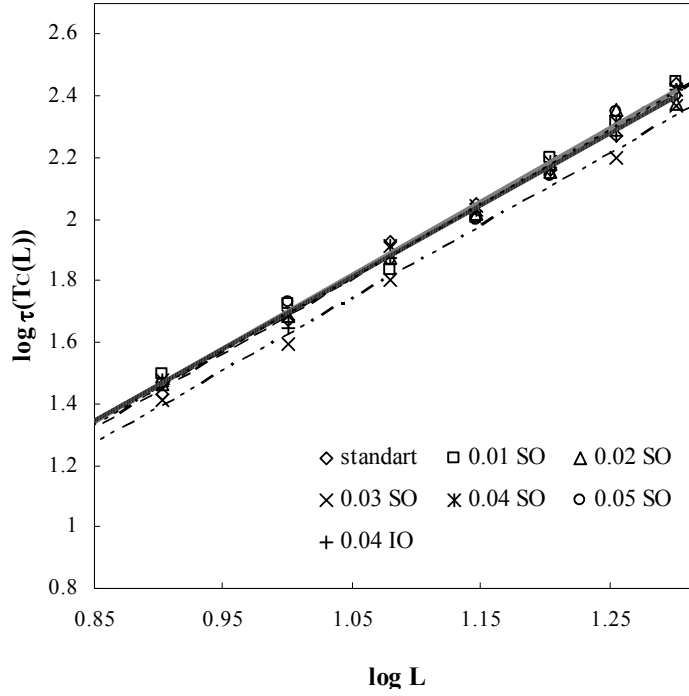
Ayrıca, Çizelge.4.3’ de verilen ekstrapolasyon ve Binder kümülanlarından bulunan kritik sıcaklık $T_C(\infty)$ değerlerinin birbirleri ile uyum içinde olduğu görülmektedir.

Şekil 4.15. de D/J=0 parametre uzayındaki basit kare örgüde yapılan simülasyonlar sonucunda bulunan z değerleri görülmektedir. Şekilden anlaşılacağı üzere basit kübik örgüde kullanılan tüm algoritmalar için tespit edilen $z_M^d(\infty)$ değerleri 0,02 farkla birbirine uymaktadır.



Şekil 4.15. $z_M^d(L)$ ' nin $1/L^{1/\nu}$ ye karşı değişimi.

İkinci yöntem olan kritik sıcaklık $T=T_C(L)$ 'de doğrusal durulma zamanını örgü uzunluğu L 'ye bağlayan ve denklem 2.27 ile verilen dinamik sonlu örgü ölçekleme bağıntısı kullanılarak z_M^d 'nin hesaplandığı $\log(\tau_M^d(L)) - \log L$ grafiği Şekil 4.16'da görülmektedir. Grafiğin eğimi $z(T=T_C)$ 'yi verir. Sonuçlar Çizelge 4.3'de verilmektedir.

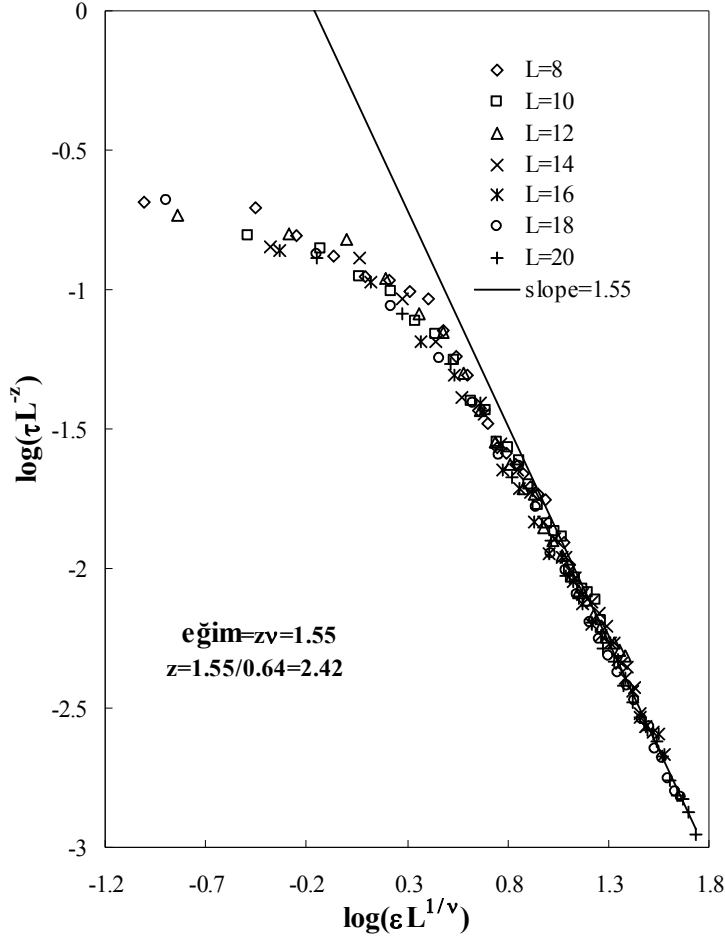


Şekil 4.16. $T=T_c(L)$ için $\log(\tau_M^d(L))$ 'nin $\log(L)$ ye karşı değişimi.

Dinamik kritik üs z yi tespit etmenin bir diğer yolu olan dinamik sonlu örgü ölçeklemesine göre, $\log(\tau L^{-z})$ 'nin $\log(L^{-1/\nu} \varepsilon)$ 'a karşı değişim grafiği çizilerek $(L^{-1/\nu} \varepsilon)$ 'nin en büyük değerleri için sonlu örgülerde çizilen eğrilerin tek bir doğruya uyduğu z değeri belirlenmiştir (Şekil 4.17). Sonuçta, doğrunun eğiminin sonsuz örgü için ölçekleme ifadesinde kullanılan z değerini doğruladığı görüldü. Ölçeklemeden elde edilen dinamik kritik üs z değerleri Çizelge 4.3'de gösterilmektedir.

Çizelge 4.3. $D/J=0$ parametre uzayında basit kübik örgü (3d) için bulunan değerler

3D BCM	$T_c(g_L)$	$T_c(\text{eks.})$	$z(\text{eks.})$	$z(T(L)=T_c(L))$	$z(\text{ölç.})$
standart	3.197	3.193	2.43	2.44	2.40
0.005SO	3.222	3.226	2.34	2.34	2.36
0.01 SO	3.220	3.216	2.38	2.38	2.39
0.02 SO	3.201	3.205	2.38	2.38	2.42
0.03 SO	3.194	3.194	2.38	2.36	2.39
0.04 SO	3.210	3.209	2.37	2.39	2.40
0.05 SO	3.200	3.198	2.42	2.34	2.40
0.04 IO	3.195	3.194	2.43	2.39	2.35



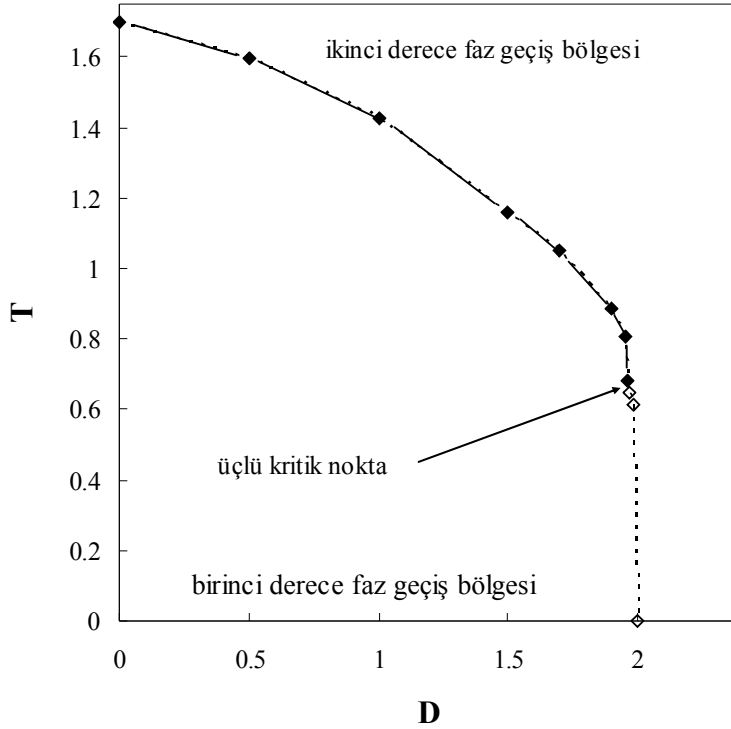
Şekil 4.17. $T=T_C(L)$ için $\log(\tau_M^d(L))$ 'nin $\log(L^{1/\nu}\epsilon)$ ye karşı değişimi.

Yapılan simülasyonlar sonucunda dinamik kritik üs z değerleri 2.4 civarında bulundu. Soğutma oranının ve farklı algoritmaların ikinci derece faz geçiş bölgesinde statik ve dinamik kritik üsler üzerinde herhangi bir etkisi olmadığı tespit edildi.

Literatürde 3 boyutta farklı yöntemler kullanılarak yapılmış olan çalışmalarda $2.0 < z < 2.35$ arasında değişen farklı değerlerde hesaplanmıştır [31-37,112]. Literatürde ‘cellular automaton’ Q2R ile simüle edilmiş 3 boyutlu modeller için yapılan bir çalışmada $z \approx 2.5$ civarında hesaplanmıştır[37]. Çalışma kapsamında bulunan sonuçlar literatürü destekleyecek yöndedir.

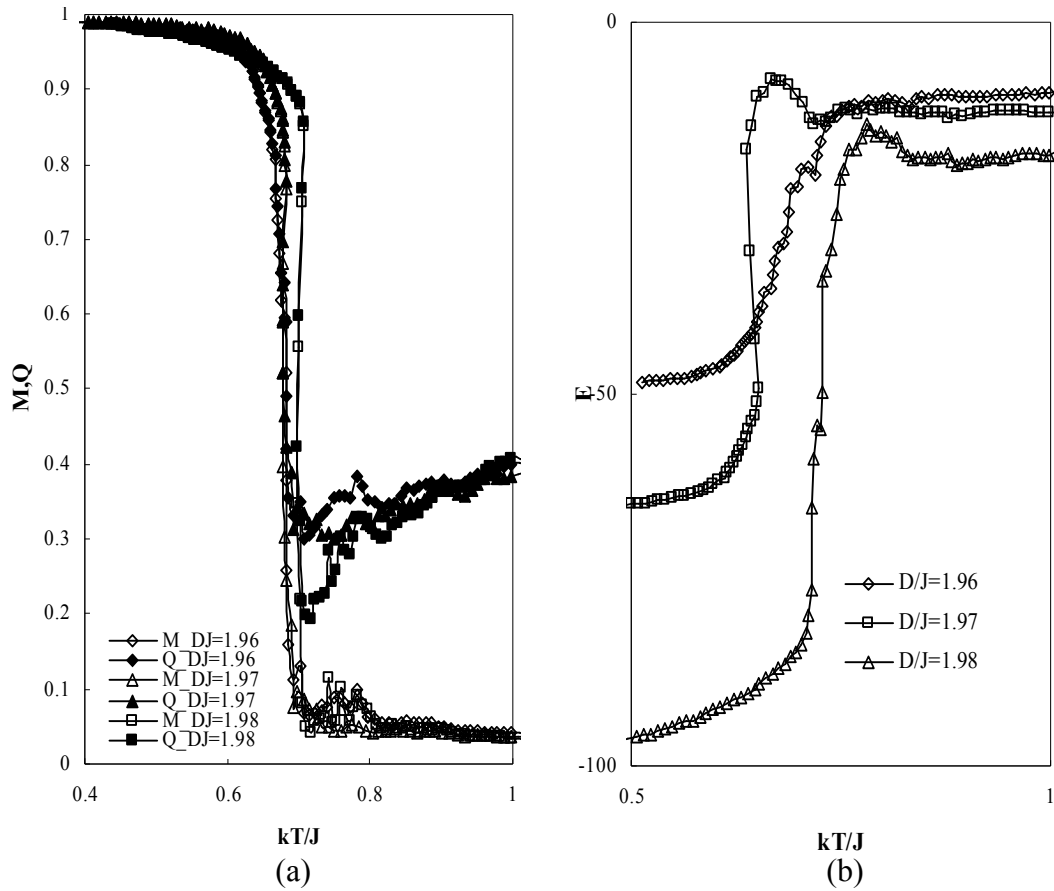
4.3. Üçlü Kritik Noktada Dinamik Kritik Üs Hesabı ve Algoritma Bağımlılığı

2 boyutlu Blume Capel model için daha önce yapılan çalışmalarda üçlü kritik nokta Monte Carlo renormalizasyon grubu hesabıyla $D/J = 1,9655$ olarak bulunmuştur[104].



Şekil 4.18. Blume Capel modelin soğutma algoritması kullanılarak bulunan faz diyagramı.

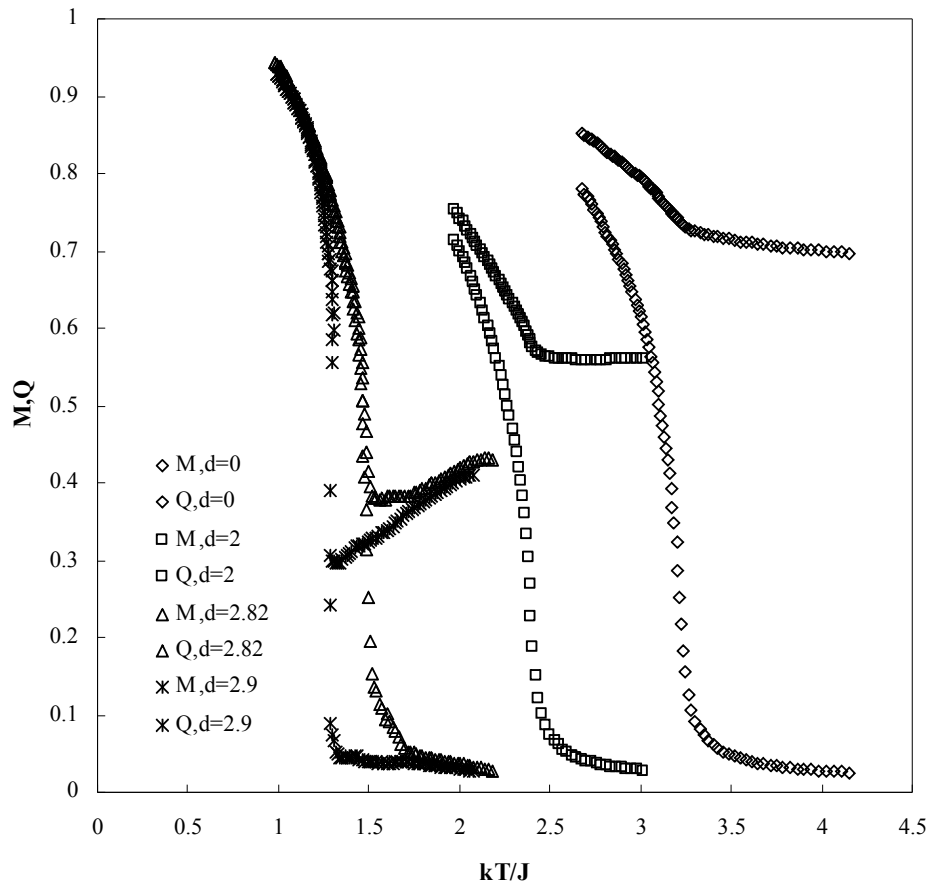
Modelin cellular automaton standart algoritma simülasyonu ile $0 \leq D/J \leq 1,5$ parametre aralığında ikinci derece faz geçişine, $1,5 < D/J \leq 2$ parametre aralığında ise üçlü kritik noktaya sahip olduğu belirtilmektedir[80]. 2 boyutlu Blume Capel modelin Şekil 4.18’de verilmekte olan faz diyagramı, soğutma algoritması için bulunmuş olan sıcaklıklar kullanılarak literatürde ilk kez tez çalışması kapsamında oluşturuldu. Faz diyagramını oluşturabilmek için $D/J = 0, 0,5, 1, 1,5, 1,7, 1,9, 1,95, 1,96, 1,97$ ve $1,98$ parametre uzayında $L = 40, 60, 80$ ve 100 kenar uzunluklu örgülerde, hücre başına $0,01 H_k$ soğutma oranı için soğutma algoritması kullanılarak 1 000 000 cellular automaton adımı hesaplama yapıldı.



Şekil 4.19.a. 2 boyutlu BCM'in faz diyagramında yer alan $D/J=1.96$, 1.97 ve 1.98 in $0.01 H_K$ soğutma oranı için yapılan simülasyonuna göre elde edilen M, Q grafiği.
 b. 2 boyutlu BCM'in faz diyagramında yer alan $D/J=1.96$, 1.97 ve 1.98 in $0.01 H_K$ soğutma oranı için yapılan simülasyonuna göre elde edilen E grafiği.

Şekil 4.19'da 2 boyutlu Blume Capel model için $D/J=1.96$, 1.97 ve 1.98 için çizilmiş olan M, Q ve E grafikleri verilmektedir. Buradan görüleceği gibi 1.96 da ikinci dereceye yakın bir davranış, 1.97 'de ikinci dereceden birinci derece faz geçişine doğru bir eğilim olduğu, 1.98 de ise birinci derece faz geçişini gösteren karakteristik davranışın ortaya çıktığı görülmektedir. Buna göre üçlü kritik noktanın 1.96 ile 1.97 arasında olduğu sonucu çıkarılır. Diğer bir deyişle Monte Carlo renormalizasyon grubu hesabıyla bulunmuş olan üçlü kritik nokta[104,84] ile soğutma algoritması kullanılarak ilk kez çalışma kapsamında bulunmuş olan değer birbirine uymaktadır.

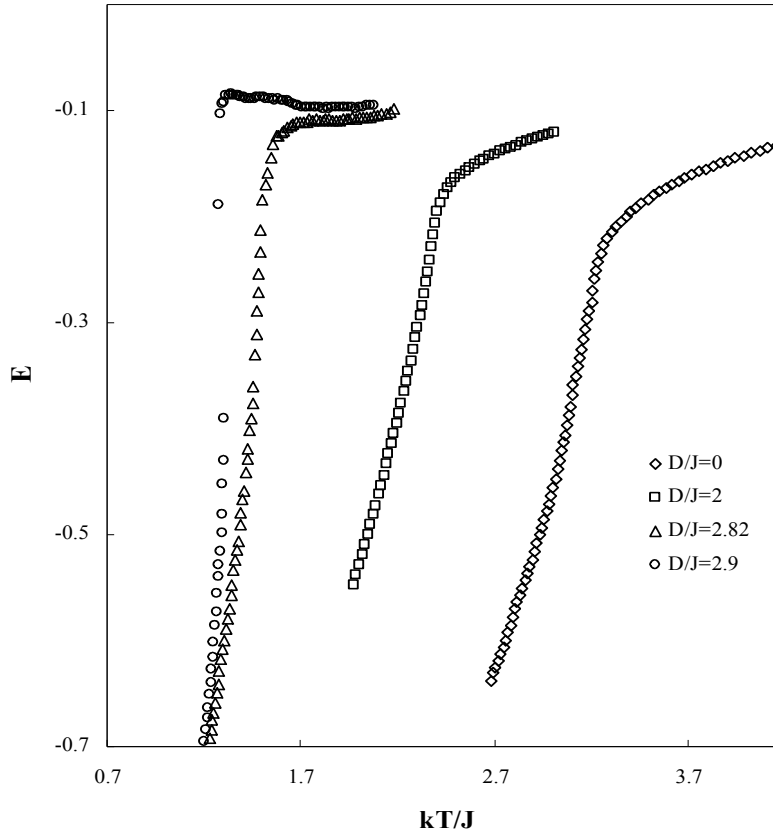
Modelin 3 boyutta üçlü kritik nokta değeri ise seri açılım methodu[53,72], etkin alan teorisi[55] ve cellular automaton[40] ile $D/J = 2,82$, kümesel değişim methodu[81] ile $D/J = 2,817$ ve self-consistent Ornstein-Zernike yaklaşımı[73] ile $D/J=2,845$ olarak verilmektedir. Soğutma algoritması kullanılarak tez kapsamında yapılmış olan çalışmada[40] üçlü kritik noktanın $D/J=2,82$ olduğu belirlenerek faz diyagramı çizilmiştir(Bkz.Şekil.3.1).



Şekil 4.20. 3 boyutlu BCM'in faz diyagramında yer alan $D/J=0, 2,82, 2$ ve $2,9$ un $0,01H_K$ soğutma oranı için yapılan simülasyonuna göre elde edilen M,Q grafiği.

Şekil 4.20'de 3 boyutlu Blume Capel model için $D/J = 0, 2, 2,82, 2,9$ için düzen parametrelerinin sıcaklığa göre değişimleri çizilmiştir. $D/J=0$ ve 2 faz uzayında ikinci derece faz geçişi gözlenirken, $2,82$ faz uzayı üçlükritik nokta davranışını doğrulamaktadır. $2,9$ parametre uzayında ise karakteristik birinci derece faz geçişi davranışı kendini gösterir. Ayrıca birinci derece faz geçişinin özelliği olarak düzen

parametresi ve iç enerjinin sıcaklıkla değişim eğrisinde görülen S-şekli yapısı, Şekil 4.20 ve 4.21'deki düzen parametresi ve iç enerji grafiklerinde görülmektedir.



Şekil 4.21. 3 boyutlu BCM'in faz diyagramında yer alan $D/J=0, 2, 2.82$ ve 2.9 un $0.01H_K$ soğutma oranı için yapılan simülasyonuna göre elde edilen E grafiği.

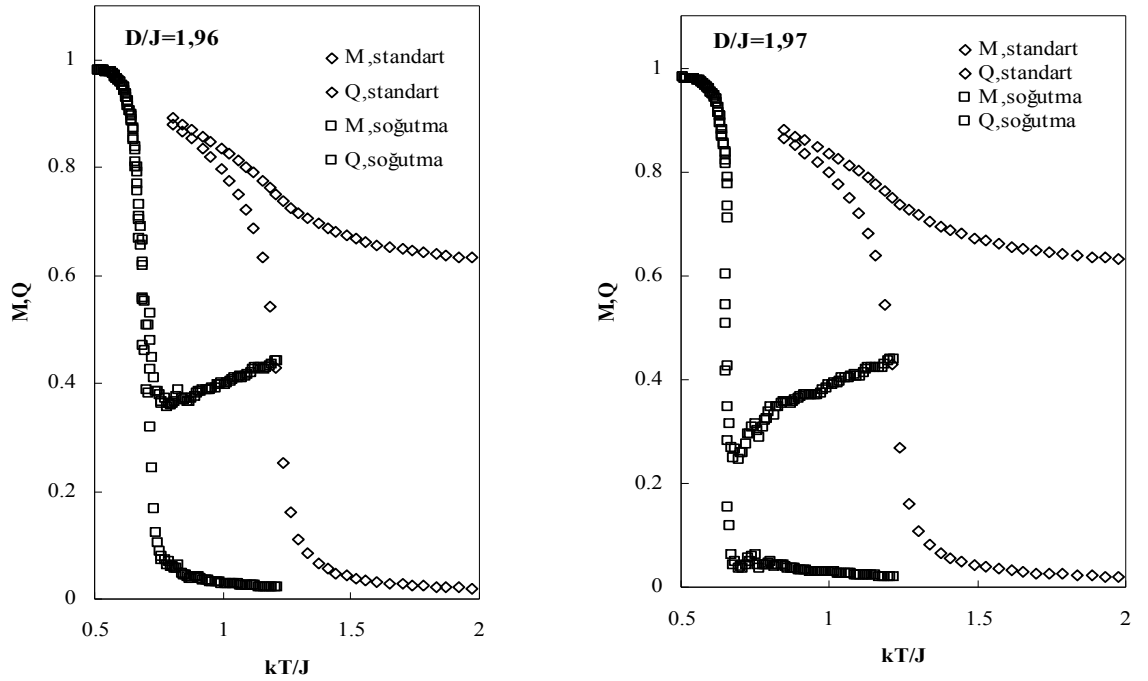
Çalışmanın bu bölümünde 2 ve 3 boyutlu Blume Capel modelin faz diyagramında belirtilmiş olan[80], üçlü kritik noktada dinamik kritik üs hesabı yapıldı.

4.3.1. 2 boyutta üçlü kritik nokta civarında algoritma bağımlılığı ve dinamik davranış

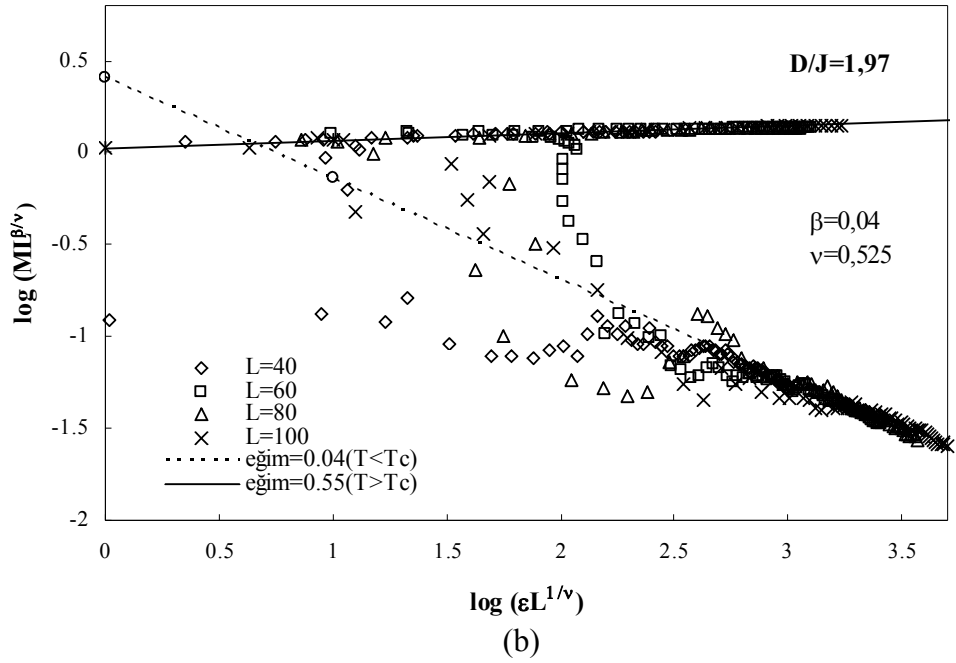
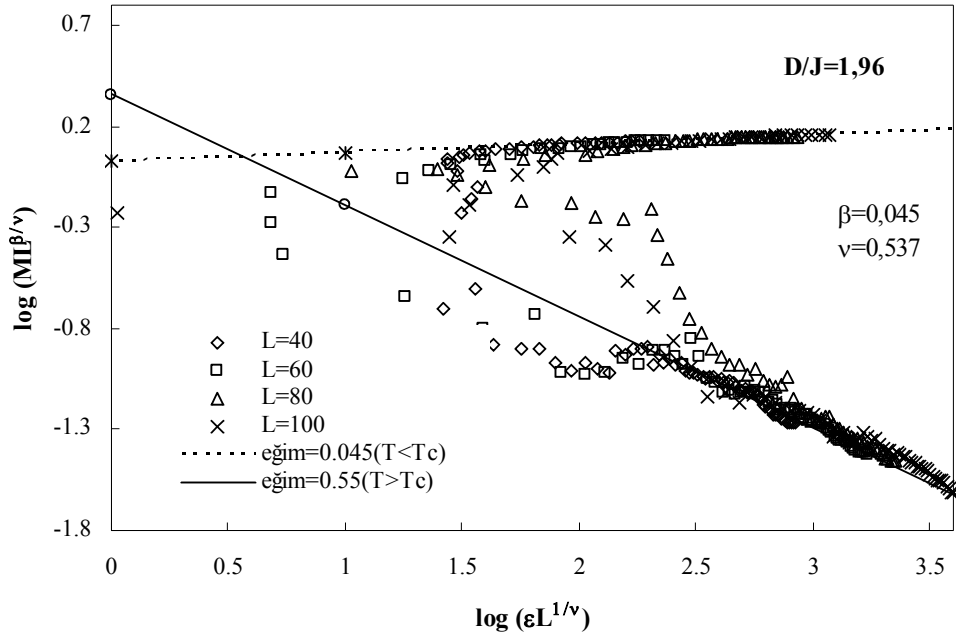
Öncelikle 2 boyutlu Blume Capel model için $D/J= d= 1.96$ ve 1.97 parametre uzayında dinamik kritik davranış incelenmiştir. Hesaplamalarda standart ve 0.01 SO için soğutma algoritması kullanıldı. Isıtma algoritması ile soğutma algoritması aynı mantıkla oluşturulmuş olan 2 algoritma olduğundan bundan sonraki hesaplamalarda

ısıtma algoritması kullanılmamış, standart ve soğutma algoritmaları kullanılarak algoritmaların dinamik davranışı incelenmiştir. Dinamik kritik davranış incelenirken ikinci derece faz geçiş bölgesinde anlatılmış olan adımlar tekrarlandı.

Şekil 4.22 de $d=1,96$ ve $1,97$ parametre uzaylarında algoritma farkının görülmesi amacıyla M, Q grafikleri çizilmiştir. Her iki parametre uzayında da standart algoritma davranışı ile soğutma algoritmasının ortaya koyduğu davranış farklıdır. Özellikle $1,97$ parametre uzayı için bu farklılık daha da etkin olarak görülmektedir.

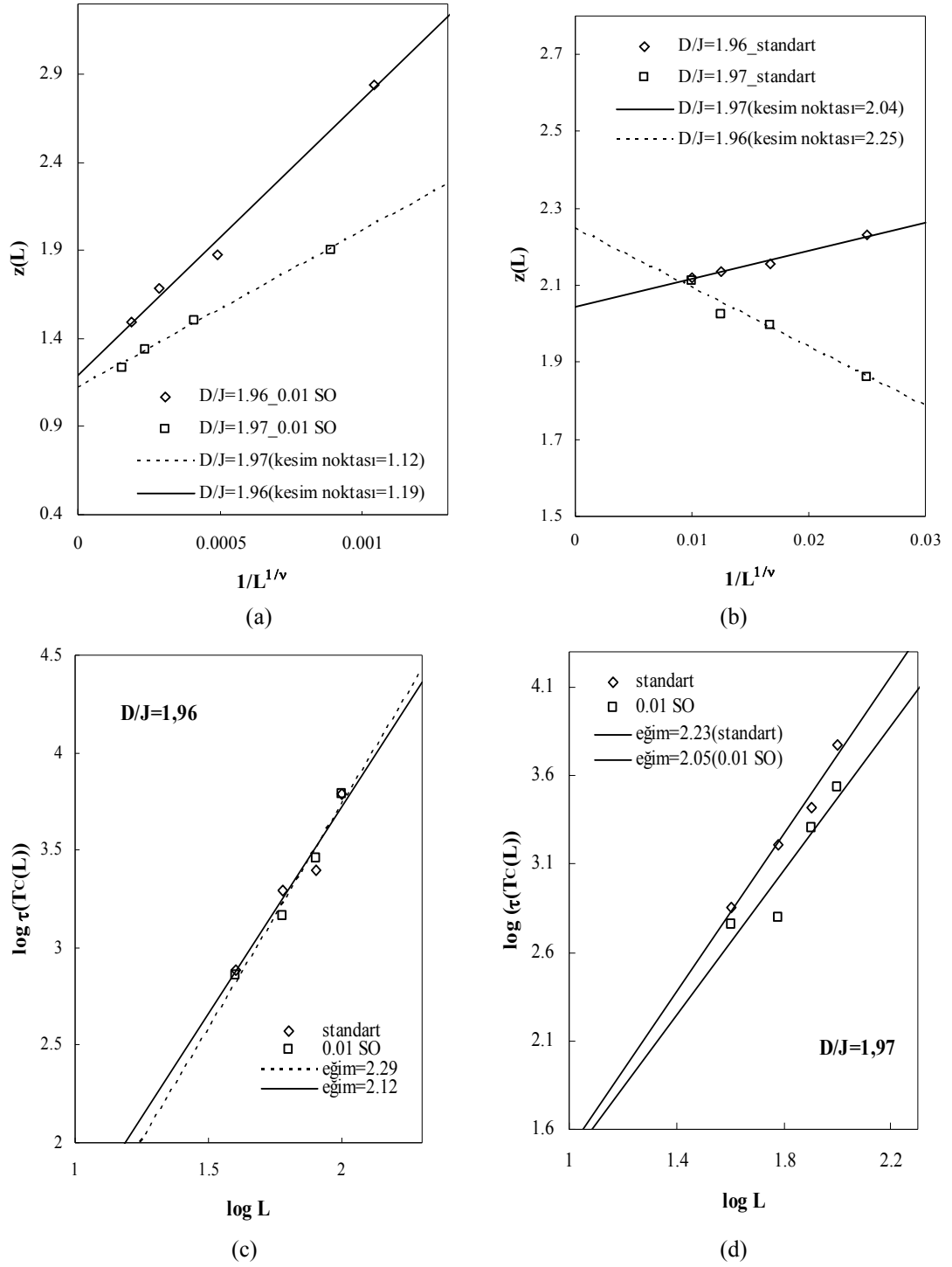


Şekil 4.22. 2 boyutlu BCM'in faz diyagramında yer alan $d=1,96$ ve $1,97$ nin standart ve $0,01H_K$ soğutma oranı için yapılan simülasyonuna göre elde edilen M, Q grafiği.



Şekil 4.23.a. 2 boyutlu BCM'in faz diyagramında yer alan $d=1,96$ nin $0,01H_K$ soğutma oranı için yapılan simülasyonuna göre düzen parametresinin ölçeklenmesi.

b. $d=1,97$ nin $0,01H_K$ soğutma oranı için yapılan simülasyonuna göre düzen parametresinin ölçeklenmesi.



Şekil 4.24.a. 2 boyutlu BCM'in faz diyagramında yer alan $D/J=1,96$ ve $1,97$ nin $0,01H_K$ soğutma oranı için yapılan simülasyonuna göre elde edilen z ,
b. Standart algoritma için z ,
c. $D/J=1,96$ 'da $T=T_c(L)$ için $\log(\tau_M(L))$ 'nin $\log(L)$ ye karşı değişimi
d. $D/J=1,97$ 'de $T=T_c(L)$ için $\log(\tau_M(L))$ 'nin $\log(L)$ ye karşı değişimi

Şekil 4.23.a ve b de, $d=1,96$ ve $1,97$ parametre uzayında $0,01$ SO için $L=40, 60, 80$ ve 100 kenar uzunluğuna sahip basit kare örgüler için elde edilmiş olan düzen parametresi değerlerinin, Eşitlik 2.19’da verilmiş olan düzen parametresi sonlu örgü ölçekleme bağıntısına göre yapılmış ölçeklenme grafikleri verilmektedir. Düzen parametresi, $d=1,96$ parametre uzayında, $\beta=0,045$ ve $\nu=0,537$ değerleri için ölçeklenmiştir. $d=1,97$ parametre uzayında ise, $\beta=0,04$ ve $\nu=0,525$ değerleri için ölçeklenme gerçekleşmiştir. Elde edilmiş olan kritik üs değerleri literatürde Monte Carlo algortimasıyla yapılmış olan çalışma sonucunda verilen değerlerle uyumludur[84]. Standart algoritma için her iki parametre uzayı ikinci derece faz geçiş bölgesinde yer almaktadır. Kritik üsleri de iki boyutlu Blume Capel modelde, ikinci derece faz geçişi için bilinen $\beta=0,125$ ve $\nu=1$ evrensel kritik üs değerleridir[80]. $d=1,96$ ve $1,97$ parametre uzayında dinamik kritik üs hesabı, 2 set üzerinden ortalama alınarak yapılmıştır. Hesaplama grafikleri Şekil 4.24 ile, sonuçlar ise Çizelge 4.4’ de verilmektedir.

Çizelge 4.4. $D/J = 1,96, 1,97$ parametre uzayında bulunan dinamik kritik üsler

		$z\nu$ (ekstrapolasyon)	ν	z	$z (T=T_C(L))$
$D/J = 1,96$	standart	2,25	1	2,25	2,12
	0,01 SO	1,19	0,537	2,21	2,29
$D/J = 1,97$	standart	2,04	1	2,04	2,23
	0,01 SO	1,12	0,525	2,13	2,05

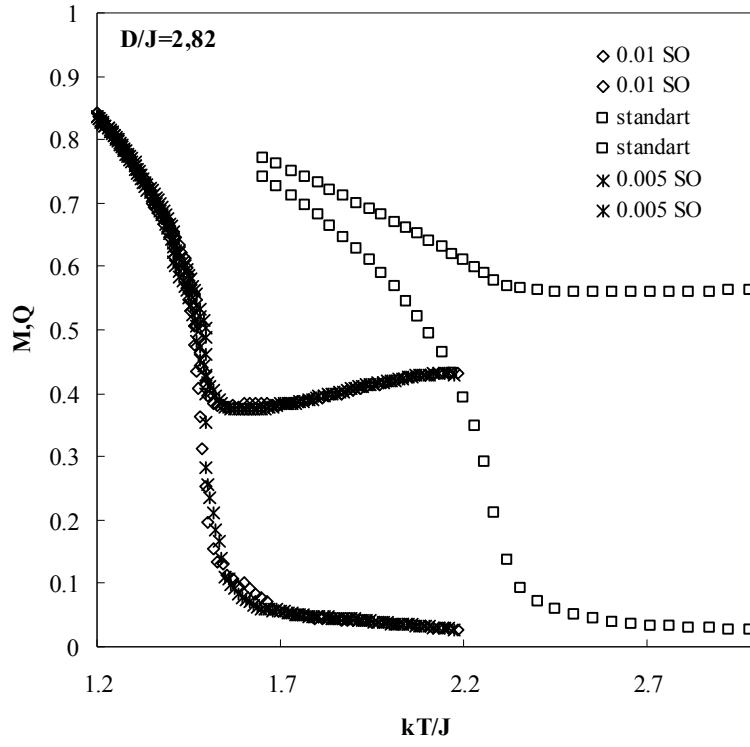
Çizelge 4.4’de görüldüğü üzere, özellikle $T=T_C(L)$ de, $d=1,96$ ve $1,97$ parametre uzayının her ikisinde de standart algoritma ile bulunan z dinamik kritik üs sonuçları, ikinci derece faz geçiş bölgesi için daha önce de hesaplanan dinamik kritik üs değerleriyle uyumludur. Ekstrapolasyondan elde edilmiş olan z değerleri, eğrinin y eksenini kestiği noktadan $z\nu$ olarak tespit edilmiştir. Standart algoritma için $\nu=1$ olduğundan, verilen değerler z ’nin kendisine eşittir. $d=1,96$ parametre uzayında soğutma algoritması kullanılarak yapılan simülasyon sonucunda $\nu=0,537$ olarak tespit edilmiştir. $z=1,19/0,537=2,21$ bulunur. Bu değer $T=T_C(L)$ ‘de hesaplanan dinamik kritik üs değeri ile uyumludur. $d=1,97$ parametre uzayında soğutma

algoritması kullanılarak yapılan simülasyon sonucunda ise, sonlu örgü ölçekleme teorisi kullanılarak Şekil 4.23’de verilen grafiklerden $v= 0,525$ bulundu. Bu değer kullanılarak, $z= 1,12/0,525 = 2,13$ bulunur. Ekstrapolasyondan elde edilen z değeri, $T=T_C(L)$ ‘de hesaplanan dinamik kritik üs değeri ile uyumludur.

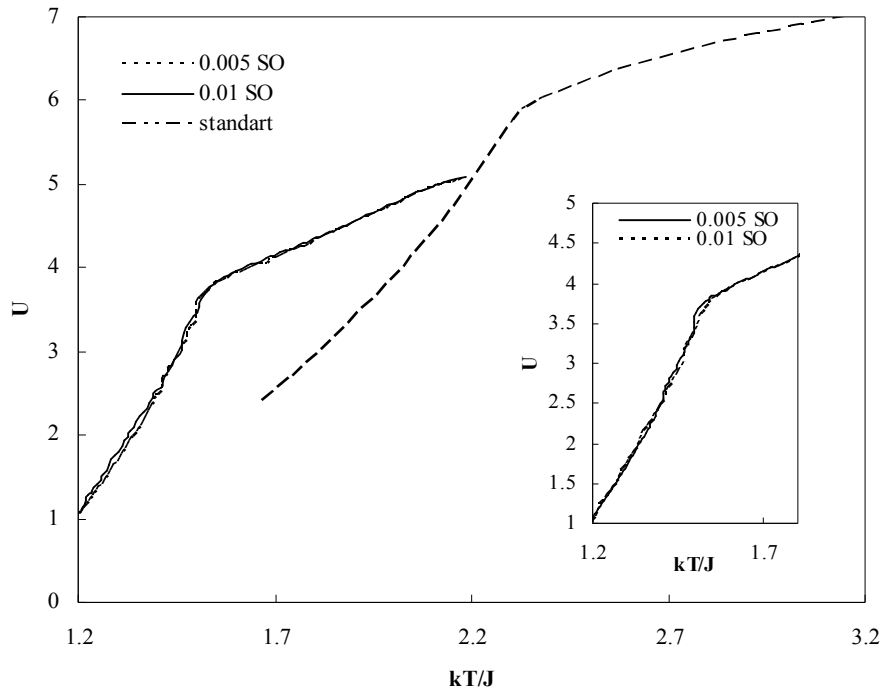
2 boyutlu Blume Capel modelin $d=1,96$ ve $1,97$ parametre uzayında dinamik kritik davranışı cellular automaton algoritmaları kullanılarak ilk kez çalışma kapsamında yapılmıştır. Monte Carlo algoritması kullanılarak 2 boyutta $D/J=1,9655$ parametre uzayında (üçlükritik noktada) $z, 2,23[84]$, başka bir çalışmada ise $2,215[111]$ bulunmuştur. Çalışma kapsamında bulunan değerler de bu sonuçlara yakındır. Standart algoritma ile soğutma algoritması bu parametre uzayında farklı davranış sergiler. Bulunan z dinamik kritik üs değerleri her iki parametre uzayında da kullanılan her iki algoritma için $2 < z < 2,3$ civarında sonuç vermektedir. Bu değerler daha önce 2 boyutlu Blume Capel modelin üçlükritik noktasında tespit edilen değerleri doğrulamaktadır.

4.3.2. 3 boyutta üçlü kritik noktada algoritma bağımlılığı ve bu noktadaki dinamik davranış

Üç boyutlu Blume Capel modelin üçlü kritik noktasının dinamik davranışı ilk kez bu çalışma kapsamında incelenmiştir. Hesaplamalar, standart algoritma ve hücre başına $0,01 H_K$ ve $0,005 H_K$ soğutma oranları için soğutma algoritması kullanılarak yapılmıştır. Böylece üçlü kritik noktada hem dinamik davranış incelenmiş hem de algoritma farkı ortaya konmuştur. 2 boyutlu Blume Capel model hesabında yapıldığı gibi öncelikle Şekil 4.24.a da görülen M, Q grafikleri çizilerek algoritma farkı ortaya konmuştur. Buradan anlaşıldığı üzere standart algoritma ile elde edilen davranış soğutma algoritması sonucunda elde edilenden farklıdır. Soğutma oranlarına göre inceleme yapıldığında, soğutma oranının da üçlü kritik noktada az da olsa etkisinin olduğu görüldü. Şekil 4.24.b deki enerji grafiklerinde bu etki daha net ortaya konmaktadır. $0,005 SO$ için soğutma algoritmasının simülasyonu sonucunda çizilen enerji grafiğinde bir “S” şekli yapısı görüldüğü söylenebilir. $0,01 SO$ için çizilen enerji grafiği ise böyle bir sonuç vermemektedir.



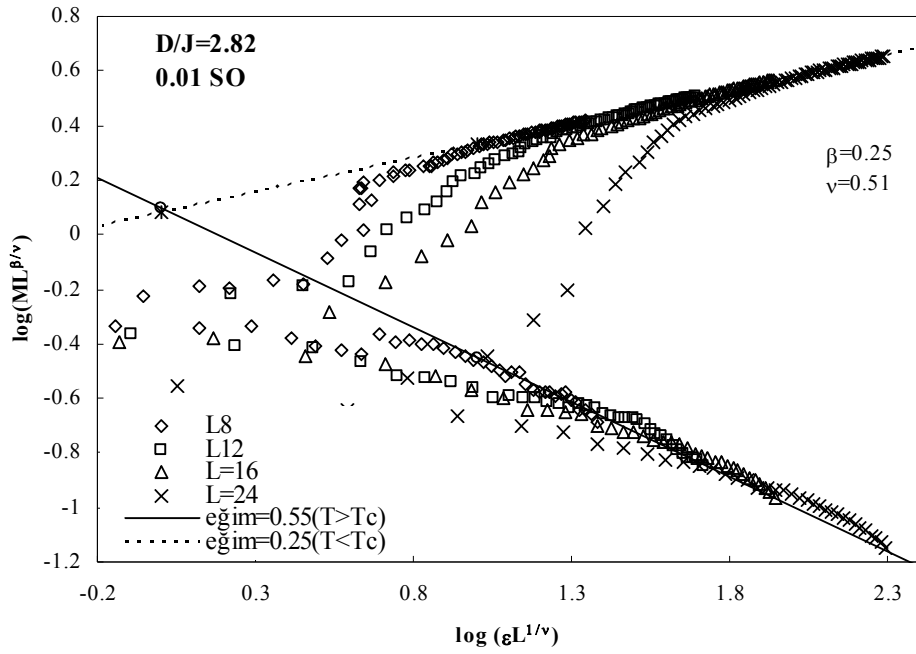
(a)



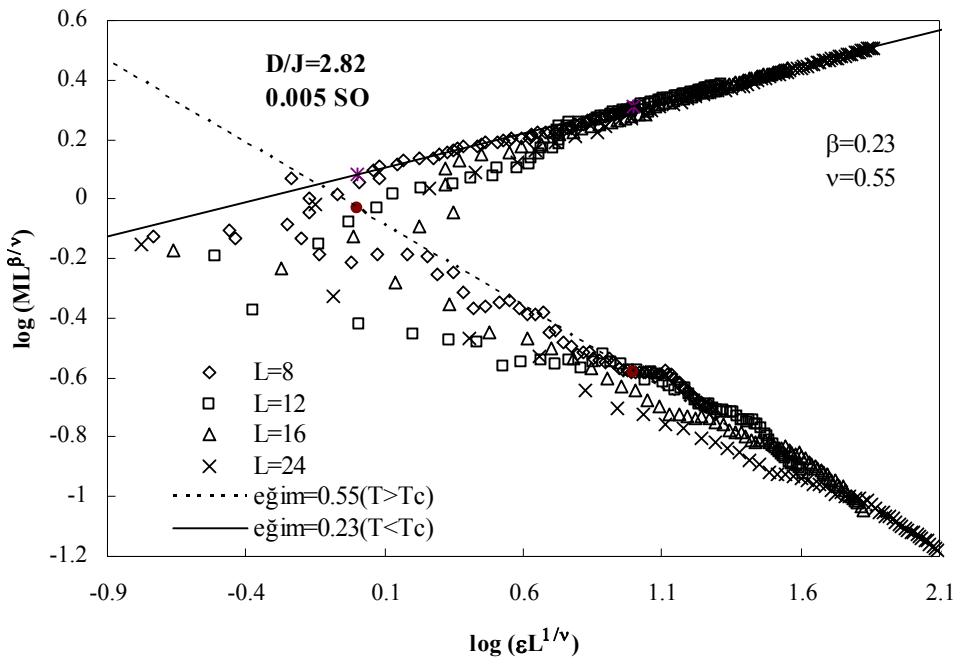
(b)

Şekil 4.25.a. 3 boyutlu BCM'in üçlü kritik noktasının standart, 0,005 SO ve 0,01 SO için M,Q grafikleri.

b. 3 boyutlu BCM'in üçlü kritik noktasının standart, 0,005 SO ve 0,01 SO için Enerji grafikleri.



(a)



(b)

Şekil 4.26.a. 3 boyutlu BCM'in üçlükritik noktasının 0,01 SO yapılan simülasyonuna göre düzen parametresinin ölçeklenmesi.
 b. 3 boyutlu BCM'in üçlükritik noktasının 0,005 SO için simülasyonuna göre düzen parametresinin ölçeklenmesi.

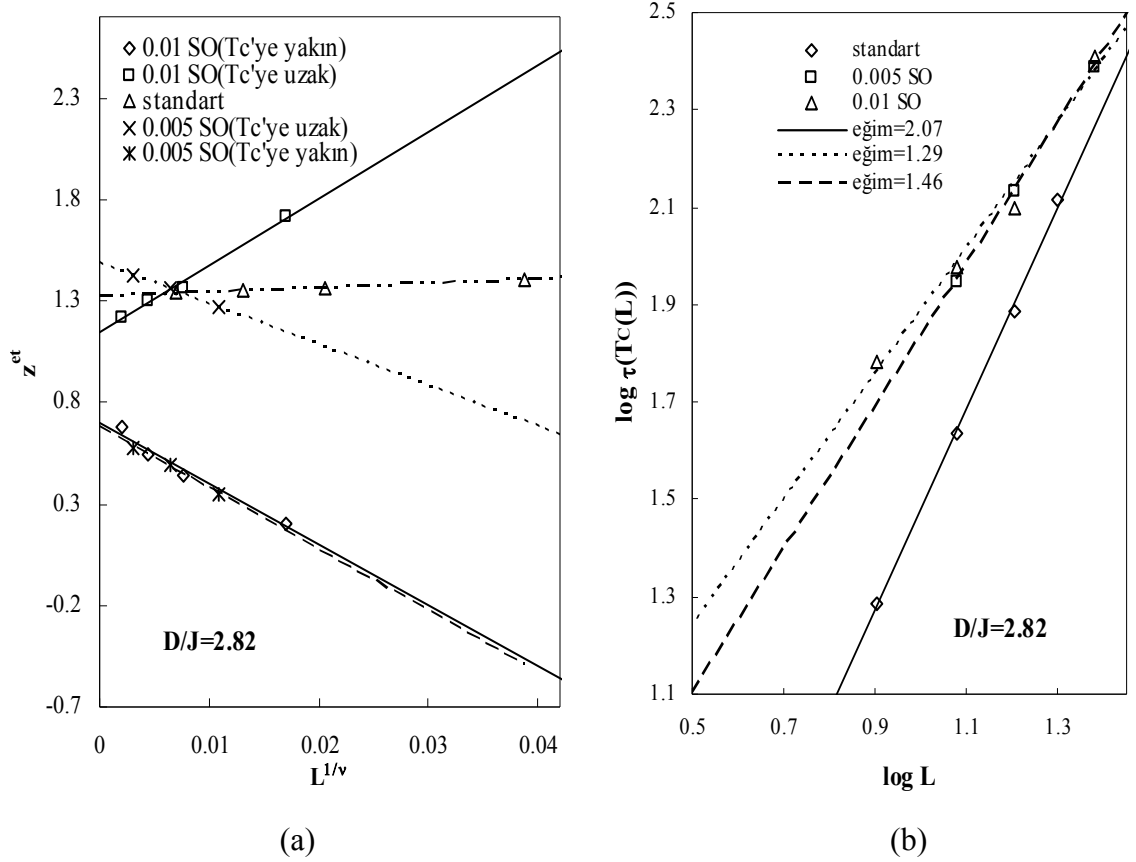
Şekil 4.26.a ve b de, $d = 2,82$ parametre uzayında 0,01 SO ve 0,005 SO için $L = 8, 12, 16$ ve 20 kenar uzunluğuna sahip basit kübik örgülerde elde edilmiş olan düzen parametresi değerlerinin, Eşitlik 2.19’da verilmiş olan düzen parametresi sonlu örgü ölçekleme bağıntısına göre yapılmış ölçeklenme grafikleri verilmektedir. Düzen parametresi, 0,01 SO için, $\beta = 0,25$ ve $v = 0,51$, 0,005 SO için ise, $\beta = 0,23$ ve $v = 0,55$ değerleri ile ölçeklenmiştir. Elde edilmiş olan kritik üs değerleri literatürde üçlü kritik nokta için verilen kritik üs değerleriyle uyumludur[4]. Standart algoritma için $d = 2,82$ parametre uzayı ikinci derece faz geçiş bölgesinde yer almaktadır. Kritik üsleri de üç boyutlu Blume Capel modelde, ikinci derece faz geçişi için bilinen $\beta = 0,31$ ve $v = 0,64$ evrensel kritik üs değerleridir[40,52].

Üçlü kritik noktada dinamik kritik üs hesabı, 2 set üzerinden ortalama alınarak yapılmıştır. Grafikler Şekil 4.27’de, sonuçlar Çizelge 4.5’ de verilmektedir. Sonuçlar z_{et} olarak verildi. Tüm algoritmalarda, parametre uzayındaki v değeri yerine konularak z hesaplanır. Standart algoritma ile yapılan simülasyon sonuçlarından $v = 0,64$ olarak bulundu. Bu değer yerine konulunca $z = 1,32/0,64 = 2,07$ sonucu elde edilir. Hesaplanan bu değer, kritik sıcaklıkta hesaplanmış olan dinamik kritik üs ile uyumludur.

Çizelge 4.5. $D/J = 2,82$ parametre uzayında bulunan dinamik kritik üsler

$D/J = 2,82$	$z(v_{eks.})$	v	z	$z (T=T_C(L))$
standart	1,32	0,64	2,06	2,07
0,01 H_K	0,70 (T_C ’ye yakın)	0,51	1,37	1,29
	1,14 (T_C ’ye uzak)		2,24	
0,005 H_K	0,68 (T_C ’ye yakın)	0,55	1,24	1,46
	1,49 (T_C ’ye uzak)		2,70	

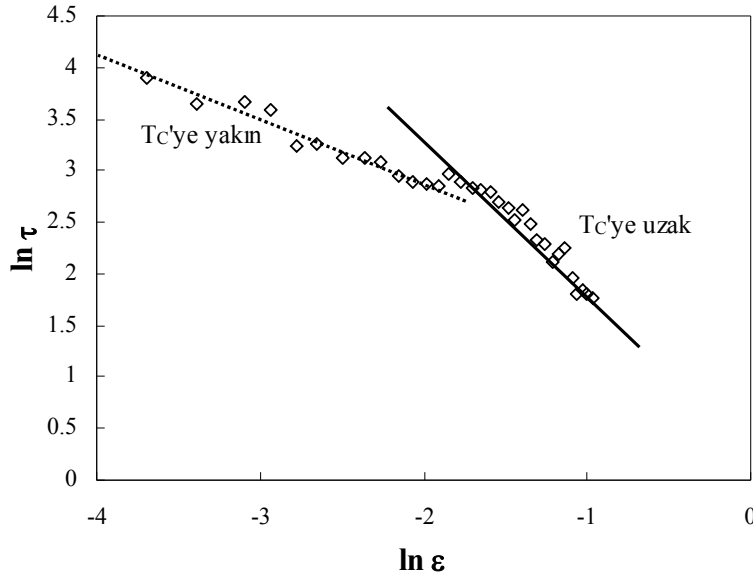
Soğutma algoritması (0,01 SO ve 0,005 SO) ile yapılan simülasyon sonuçlarından 2 farklı z değeri bulundu. Dinamik kritik üs z ’yi belirlemek için, her örgü için kritik sıcaklıktan daha büyük sıcaklık bölgesine doğru sistemi karakterize eden τ değerleri tespit edildikten sonra, $\log(\tau_M)$ ’in $\log((T - T_C(L))/T_C(L))$ ’ye karşı değişimi çizilir ve eğimden $z(L)$ değeri tespit edilir. Üçlü kritik noktada soğutma algoritması için çizilen $\log(\tau_M)$ ’in $\log((T - T_C(L))/T_C(L))$ ’ye karşı değişiminden iki farklı eğim elde



(a) Şekil 4.27.a. 3 boyutlu BCM'in üçlü kritik noktasının standart, 0,005 SO ve 0,01 SO için yapılan simülasyonuna göre elde edilen z_{eff}
 (b) Şekil 4.27.b. 3 boyutlu BCM'in üçlü kritik noktasının standart, 0,005 SO ve 0,01 SO için yapılan simülasyonuna göre elde edilen $T=T_c(L)$ için $\log(\tau_M(L))$ 'nin $\log(L)$ ye karşı değişimi grafiği.

edilmiştir. Bu eğimler Şekil 4.28' de gösterilmektedir. Kritik sıcaklığa yakın bölgelerde ($0,01 < \varepsilon = T - T_c(L) / T_c(L) < 0,07$) farklı bir eğim, kritik sıcaklıktan uzak bölgelerde ($0,08 < \varepsilon = T - T_c(L) / T_c(L) < 0,2$) ise farklı bir eğim elde edilerek $z(L)$ bulundu.

0,01 SO'da T_c 'ye yakın bölgede $z = 0,70/0,51 = 1,37$, T_c 'ye uzak bölgede $z = 1,14/0,51 = 2,24$ olarak bulundu. $T=T_c(L)$ 'de tespit edilen değer ise $z = 1,29$ dur. Bu değer, T_c 'ye yakın bölgede elde edilmiş olan değerle uyum sağladığı görülmektedir. T_c 'ye uzak bölgede bulunan z değeri ise ikinci derece faz geçiş bölgesi için bulunan z değerine yakın bir değerdir. Şekil 4.25'deki 0,01 SO soğutma algoritması için çizilen M grafiği incelenerek bu durum açıklanır. Kritik sıcaklık



Şekil 4.28. 3 boyutlu BCM'in üçlü kritik noktasında soğutma algoritması ile bulunan $\ln \tau$ - $\ln \varepsilon$ grafiği

civarında sistemdeki yarıkararlı durumlar tam olarak ortaya çıkmakta, kritik sıcaklıktan uzaklaşınca bu yarıkararlı durumlar ortaya çıkmamakta ve sistem ikinci derece faz geçiş bölgesindeki davranışa benzer bir davranış sergilemektedir. O nedenle üçlü kritik noktada, ε 'nın küçük olduğu bölgenin dinamik davranışı, ε 'nın büyük olduğu bölgenin dinamik davranışından farklıdır.

0,005 SO'da T_C 'ye yakın bölgede $z = 0,68/0,55 = 1,24$, T_C 'ye uzak bölgede $z = 1,49/0,55 = 2,70$ olarak bulundu. $T=T_C(L)$ 'de tespit edilen değer ise $z = 1,46$ dır. Bu değer, T_C 'ye yakın bölgede elde edilmiş olan değerle uyum sağladığı görülmektedir. T_C 'ye uzak bölgedeki z değeri ise, 0,01 SO için elde edilen değerden farklıdır. Bu sonuç, üçlü kritik noktada soğutma oranının dinamik davranış üzerinde etkisi olduğunu göstermektedir.

Tez kapsamında cellular automaton standart ve soğutma algoritmasıyla yapılan Blume Capel modelin üçlü kritik davranışın ortaya konduğu çalışmada[21] üçlü kritik noktanın soğutma oranına bağlılığı gösterilmektedir. Bu bilgiden hareketle dinamik davranış incelenirken hem standart hem de soğutma algoritmasının farklı soğutma oranları için simülasyon yapılarak sonuçlar bulundu. Sonuçta, $d=2,82$ standart algoritma ile ikinci derece faz geçiş bölgesinde yer almaktadır. Bu

bağlamda, bu algoritma ile tespit edilen sonuçlar ikinci derece faz geçiş bölgesindeki sonuçlarla uyumludur. Soğutma algoritması için ise bu parametre uzayı, modelin üçlü kritik noktasıdır[21]. Ayrıca soğutma oranının üçlü kritik noktada etkisi olduğu açıkça görülmektedir. Literatürde 3 boyutlu Blume Capel modelin üçlü kritik noktada dinamik davranışı ilk kez bu çalışma kapsamında yapılmıştır. Bu anlamda bulunan sonuçların literatüre getireceği katkı açısından yararlı olacaktır.

4.4. Birinci Derece Faz Geçiş Bölgesinde Dinamik Kritik Üs Hesabı ve Algoritma Bağımlılığı

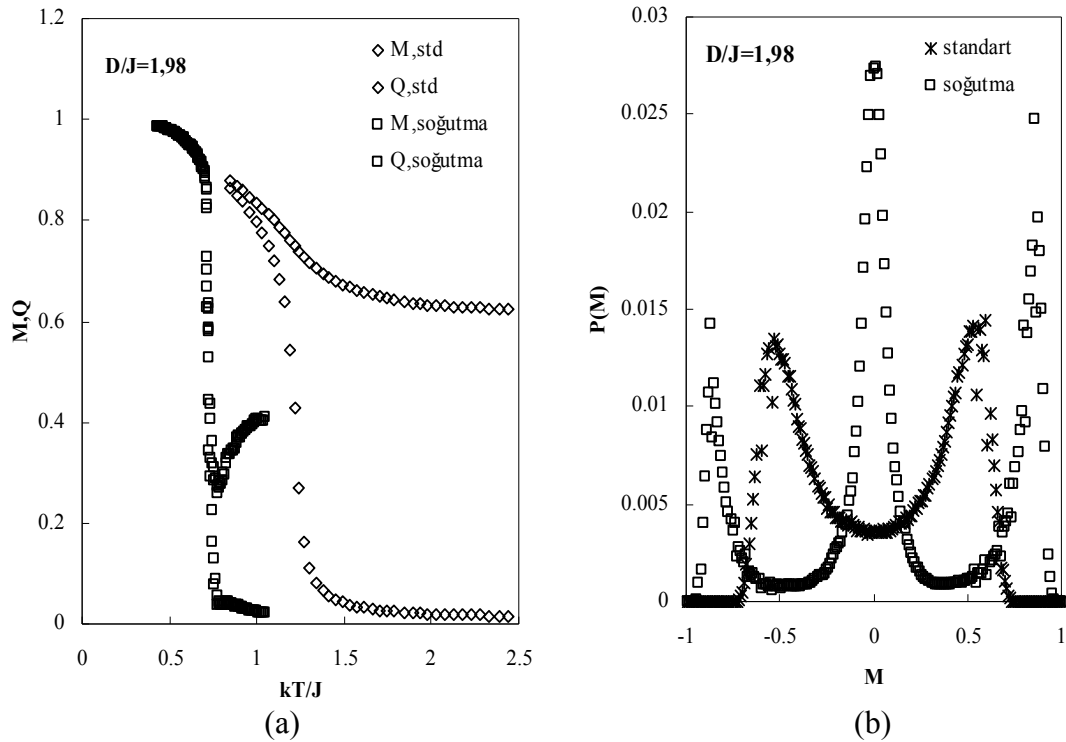
Birinci derece faz geçiş bölgesinde düzen parametresinin sıcaklığa göre değişimi çizildiğinde, çizilen grafikte karakteristik birinci derece davranışını gösteren “S” şekli yapısına sahiptir. Ayrıca bilindiği gibi birinci derece faz geçişi yapan sistemde olasılık dağılımı geçiş sıcaklığının altında iki pike sahiptir. Geçiş sıcaklığına yaklaşıırken $P(M)$ düzenli ve düzensiz iki fazın “bir arada” bulunduğunu işaret edecek şekilde eşit yükseklikte üç pik sergiler. Bu bölümde 2 ve 3 boyutlu Blume Capel modelin faz diyagramına göre birinci derece faz geçiş bölgesinde standart ve soğutma algoritmaları kullanılarak dinamik davranış incelendi.

4.4.1. 2 boyutlu Blume Capel modelin standart ve soğutma algoritmaları için birinci derece faz geçiş bölgesinde dinamik davranışı

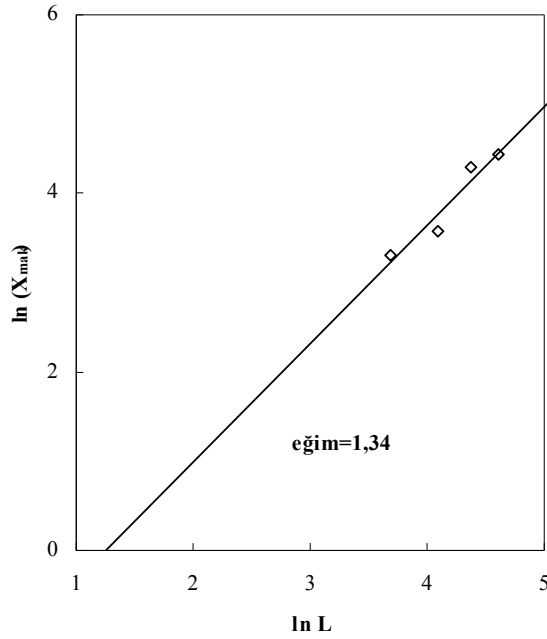
İki boyutlu Blume Capel modelin faz diyagramına ve yapılan simülasyonlardan elde edilen sonuçlara göre $D/J=1,98$ birinci derece faz geçiş bölgesinde yer almaktadır. Bu bölgede de standart ve soğutma algoritması kullanılarak hesap yapılmıştır. Şekil 4.29’da $d=1,98$ parametre uzayında yapılan simülasyonlar sonucunda çizilen M, Q ve $P(M)$ grafikleri görülmektedir. Standart algoritma ile elde edilen grafiklerde ikinci derece faz geçişi davranışı, soğutma algoritması grafiklerinde ise karakteristik birinci derece davranışını gösteren düzen parametresindeki “S” şekli yapısı ve $P(M)$ grafiğinin üç pikli yapısı görülmektedir. Her iki algoritma için dinamik kritik üs hesabı yapıldı. Grafikleri Şekil 4.31’de, sonuçlar ise Çizelge 4.6’da verilmektedir.

Birinci derece faz geiş bölgesinde kritik sıcaklık civarında tüm kritik üslerin boyuta gittiği bilinmektedir[75]. Bu bilgidten hareketle, $T=T_C$ de $\ln(\chi_{\text{mak}})$ ın $\ln L$ 'ye karşı grafiğı çizilerek eğimden kritik üs tespit edilmiştir(Şekil 4.30). Tespit edilen kritik üsler, ölçekleme bağıntıları göz önüne alınarak, χ_{mak} için γ/v 'dür. Ayrıca, $\chi \propto \varepsilon^{-\gamma}$ şeklindedir. Bu orantının logaritması alınınca, $\log \chi \propto -\gamma \log(\varepsilon)$ ifadesi elde edilir.

Bu ifade kullanılarak, $\gamma \propto (-\frac{\log(\chi)}{\log(\varepsilon)})$ elde edilir. Bu ifade, her örgü için $T_C(\infty)$ için $\log \chi - \log(\varepsilon)$ grafiğinin eğiminden tespit edildi. Tüm örgüler için bulunan değeri, yaklaşık $\gamma = 1,92$ olarak tespit edilir. Şekil 4.30'daki sonuç için, $\gamma/v = 1,34$ 'den, $v = 1,94/1,34 = 1,45$ bulunur.



Şekil 4.29.a. 2 boyutlu BCM'in $d=1,98$ faz uzayında standart ve 0,01 SO için yapılan simülasyonuna göre elde edilen M, Q
b. 2 boyutlu BCM'in $d=1,98$ faz uzayında standart ve 0,01 SO için yapılan simülasyonuna göre elde edilen $P(M)$ grafiğı.

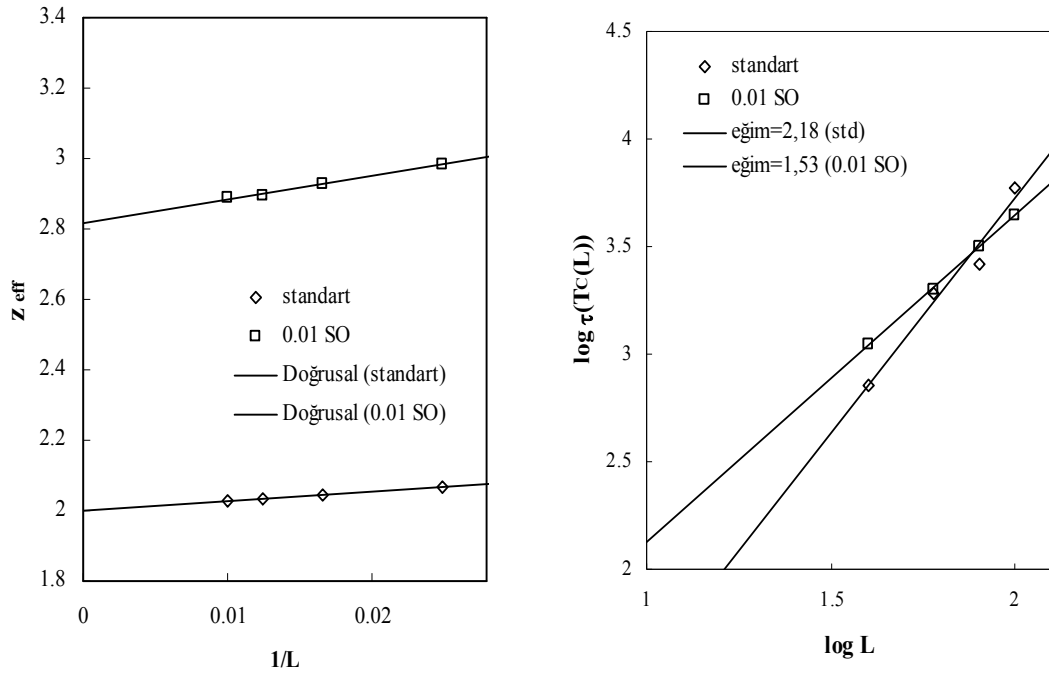


Şekil 4.30. 2 boyutlu BCM'in $d=1,98$ faz uzayında 0,01 SO için çizilen $\ln(\chi_{\text{mak}})$ ın $\ln L$ ye karşı grafiği.

Çizelge 4.6. $D/J = 1,98$ parametre uzayında bulunan dinamik kritik üsler

$D/J = 1,98$	ν	$z_{\text{eff}}(z, \nu)$	z	$z(T=T_C(L))$
standart	1,0	2,00	2,00	2,18
0,01 SO	1,45	2,82	1,94	1,53

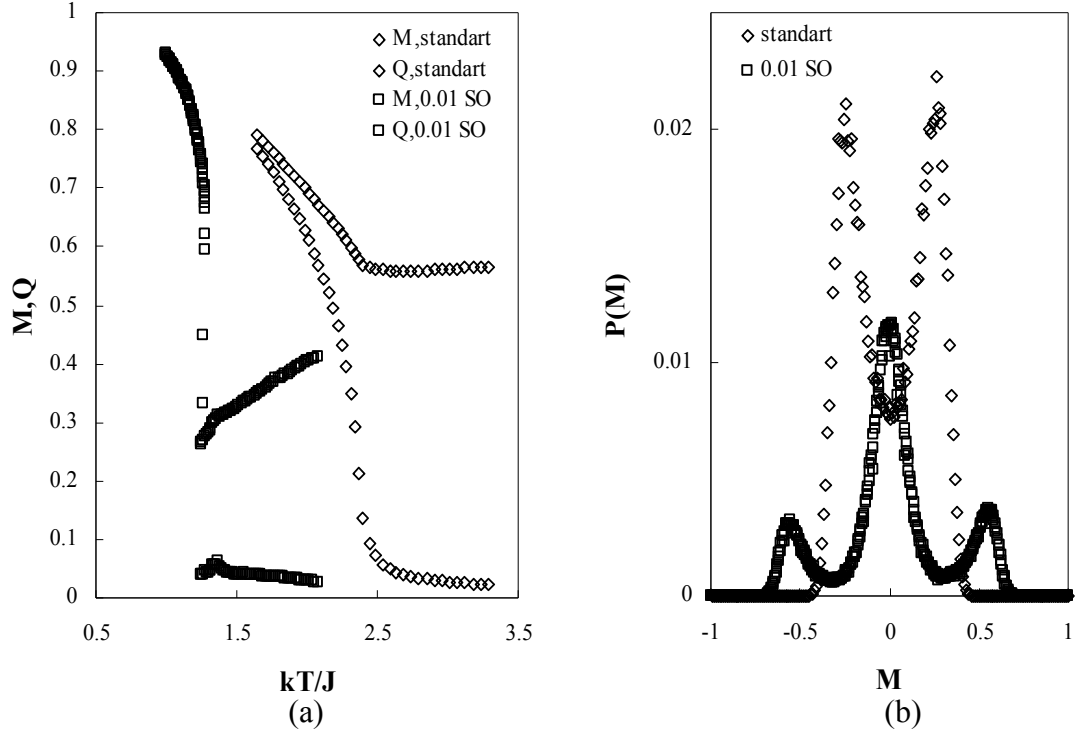
Çizelge 4.6 daki sonuçlara göre standart algoritma ile soğutma algoritmasının bu parametre uzayındaki dinamik davranışı birbirinden farklıdır. $T=T_C$ için, standart algoritma simülasyonundan bulunan dinamik kritik üs, $D/J=0$ parametre uzayındaki dinamik kritik üs sonuçları ile aynıdır. Bunun yanında soğutma algoritması için $T=T_C$ ve ekstrapolasyondan hesaplanan değer, birinci derece faz geçiş bölgesindeki diğer kritik üsler gibi boyut civarında bulundu. 2 boyutlu Blume Capel modelin cellular automaton ile birinci derece faz geçiş bölgesinde yeralan $d=1,98$ parametre uzayında dinamik davranışı ilk kez tez çalışması kapsamında yapılmıştır.



Şekil 4.31. 2 boyutlu BCM’in $d=1,98$ faz uzayında standart ve 0,01 SO için yapılan simülasyonuna göre z_{eff} ve $T=T_c(L)$ için $\log(\tau_M(L))$ ’nin $\log(L)$ ye karşı değişimi grafiği.

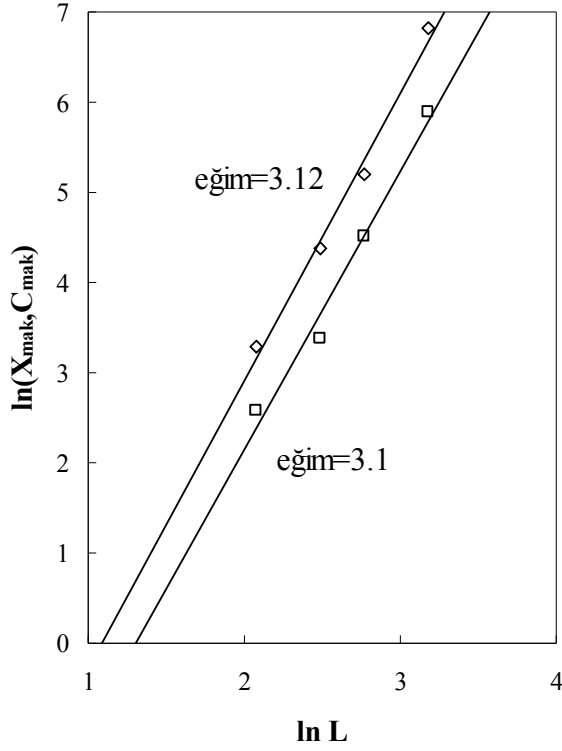
4.4.2. 3 boyutlu Blume Capel modelin standart ve soğutma algoritmaları için birinci derece faz geçiş bölgesinde dinamik davranışı

Üç boyutlu Blume Capel model için, $D/J=2.9$ bölgesi birinci derece faz geçişi göstermektedir. Bu bölge için daha önce statik kritik üs hesaplamaları yapılmıştır[29]. Tez çalışmasında birinci derece faz geçiş bölgesinde standart ve soğutma algoritmalarının dinamik davranış üzerine etkileri incelenmiştir. Standart algoritma ile $D/J=3$ değerine kadar modelin sahip olduğu faz geçişinin sürekli olmasına karşılık soğutma algoritması ile $2.8 < D/J < 3$ aralığında düzen parametresi ve iç enerjinin faz geçiş sıcaklığı civarında “S” şekli yapısında olduğu ortaya konmuştur.



Şekil 4.32.a. 3 boyutlu BCM'in $d=2,9$ faz uzayında standart, 0,01 SO ve 0.05 SO için yapılan simülasyonuna göre elde edilen M, Q
 b. 3 boyutlu BCM'in $d=2,9$ faz uzayında standart, 0,01 SO ve 0.05 SO için yapılan simülasyonuna göre elde edilen $P(M)$ grafiği.

Şekil 4.32'deki grafiklerde standart algoritmanın ikinci derece faz geçiş yapısı ortaya koyduğu, 0,01 SO için çizilenlerin ise birinci derece faz geçiş özelliğini ortaya koyduğu görülmektedir. Birinci derece faz geçiş bölgesinde kritik sıcaklık civarında tüm kritik üslerin boyuta gittiği bilinmektedir[75]. Bunu doğrulamak amacıyla karakteristik birinci derece faz geçiş özelliği gösteren 0,01 SO için soğutma algoritması ile elde edilen sonuçlar için $T=T_C$ de $\ln(\chi_{\text{mak}}, C_{\text{mak}})$ un $\ln L$ 'ye karşı grafiği çizilerek eğimden kritik üsler tespit edilmiştir. Tespit edilen kritik üsler, ölçekleme bağıntıları göz önüne alınarak, χ_{mak} için γ/ν , C_{mak} içinse α/ν dür. Bu üsler, hata oranları içerisinde boyut civarındadır.



Şekil 4.33. 3 boyutlu BCM'in d=2,9 faz uzayında 0,01 SO için çizilen $\ln(\chi_{\text{mak}}, C_{\text{mak}})$ ın $\ln L$ ye karşı grafiği.

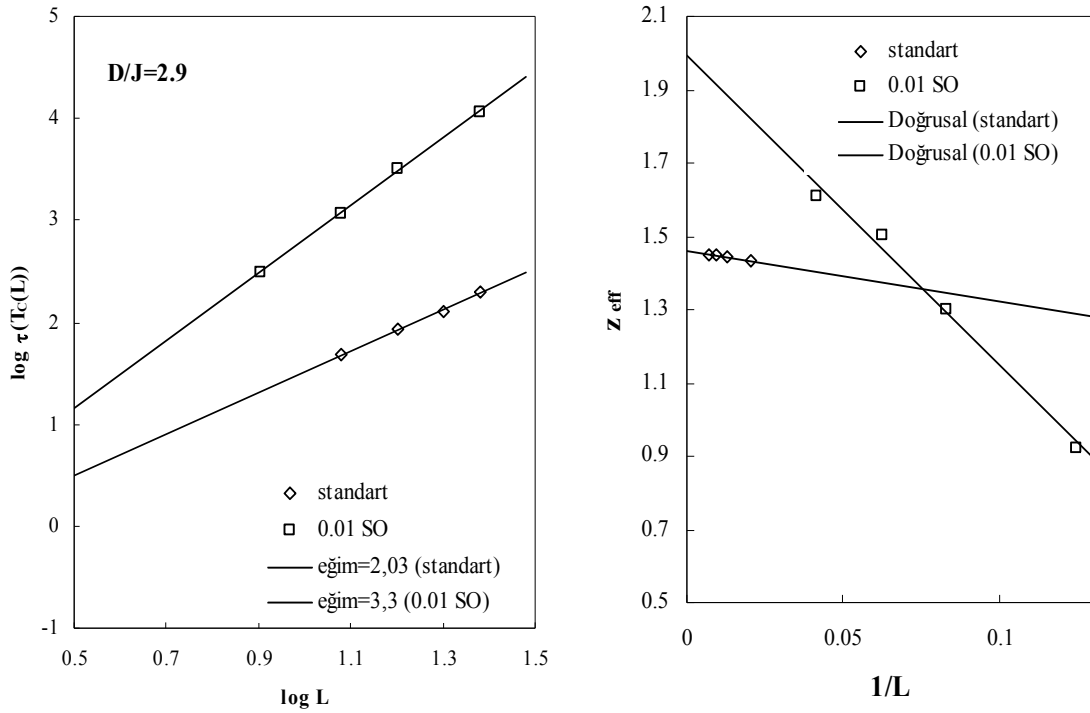
Ayrıca, $\chi \propto \varepsilon^{-\gamma}$ şeklindedir. Bu orantının logaritması alınınca, $\log \chi \propto -\gamma \log(\varepsilon)$ ifadesi elde edilir. Bu ifade kullanılarak,

$\gamma \propto \left(-\frac{\log(\chi)}{\log(\varepsilon)}\right)$ elde edilir. Bu ifade, her örgü için $T_C(\infty)$ için $\log \chi - \log(\varepsilon)$

grafığının eğiminden tespit edildi. Tüm örgüler için bulunan değer, yaklaşık $\gamma = 1,82$ olarak tespit edilir. Şekil 4.33'deki sonuç için, $\gamma/v = 3,1$ 'den, $v = 1,82/3,1 = 0,61$ bulunur.

Dinamik kritik üs hesabı birinci derece faz geçiş bölgesi özelliği gösteren $d=D/J=2.9$ parametresi bölgesinde standart ve 0,01 SO için soğutma algoritmaları kullanılarak hesaplanmıştır. Dinamik kritik üs hesabı için çizilen grafikler Şekil 4.34' de verilmektedir. Bu grafiklerden elde edilmiş olan dinamik kritik üsler ise Çizelge 4.7 'de yer almaktadır. Standart algoritma ile yapılan simülasyon sonucunda $d=2,9$ parametre uzayı ikinci derece faz geçişi özelliği gösterir. $d=2,9$ parametre uzayında

$v=0,64$ olarak bulundu. z_v için $z=1,46/0,64= 2,3$ tür. Bu değer daha önce hesaplanmış olan ikinci derece faz geçiş bölgesindeki değerlerle uyum içersindedir.



Şekil 4.34. 3 boyutlu BCM'in $d=2,9$ faz uzayında standart, 0,01 SO için yapılan simülasyonuna göre z_{eff} ve $T=T_c(L)$ için $\log(\tau_M(L))$ 'nin $\log(L)$ ye karşı değişimi grafiği.

Standart algoritma için $T=T_c(L)$ 'de hesaplanmış olan dinamik kritik üs z için de aynı şeyi söylemek mümkündür. 0,01 SO için ise birinci derece faz geçiş bölgesindeki diğer kritik üslerde olduğu gibi dinamik kritik üssün boyut civarında olduğu sonucu bulunur.

Çizelge 4.7. $D/J = 2,9$ parametre uzayında farklı soğutma hızları için bulunan dinamik kritik üsler

$D/J=2,9$	v	$z_{eff}(z,v)$	z	$z(T=T_c(L))$
standart	0,64	1,46	2,28	2,03
0,01 SO	0,61	1,99	3,26	3,30

Soğutma algoritması kullanılarak $d=2,9$ faz uzayının statik kritik üslerini ortaya koymak amacıyla yapılmış olan çalışmada 0,01 SO için modelin simülasyonu

yapılmıştır[75]. Buradan hareketle dinamik davranışı incelemek amacıyla 0,01 SO için işlem yapıldı. Burada amaç, algoritmaların dinamik davranışını test etmek idi. Statik üsler için olduğu gibi dinamik kritik üssün de kritik sıcaklıkta birinci derece faz geçiş bölgesinde boyuta doğru gittiği sonucu çıkar. Blume Capel modelin cellular automaton ile birinci derece faz geçiş bölgesindeki dinamik davranışı ilk kez tez çalışması kapsamında yapılmıştır.

4.5. Düzen Parametresi Olasılık Dağılım Fonksiyonlarından Kritik Sıcaklık Tayini ve Analitik İfadesindeki Parametrelerin Bulunması

Düzen parametresi sonlu sistemlerde dalgalı bir niceliktir ve $P(M)$ olasılık dağılımı fonksiyonları ile ifade edilir. Ölçekleme limitinde yani sistem, sonsuz örgüye doğru giderken olasılık dağılımı fonksiyonları evrenseldir. Olasılık dağılım fonksiyonları için sonlu örgü ölçekleme bağıntılarının bilinmesi önemlidir.

Düzen parametresi olasılık dağılımı,

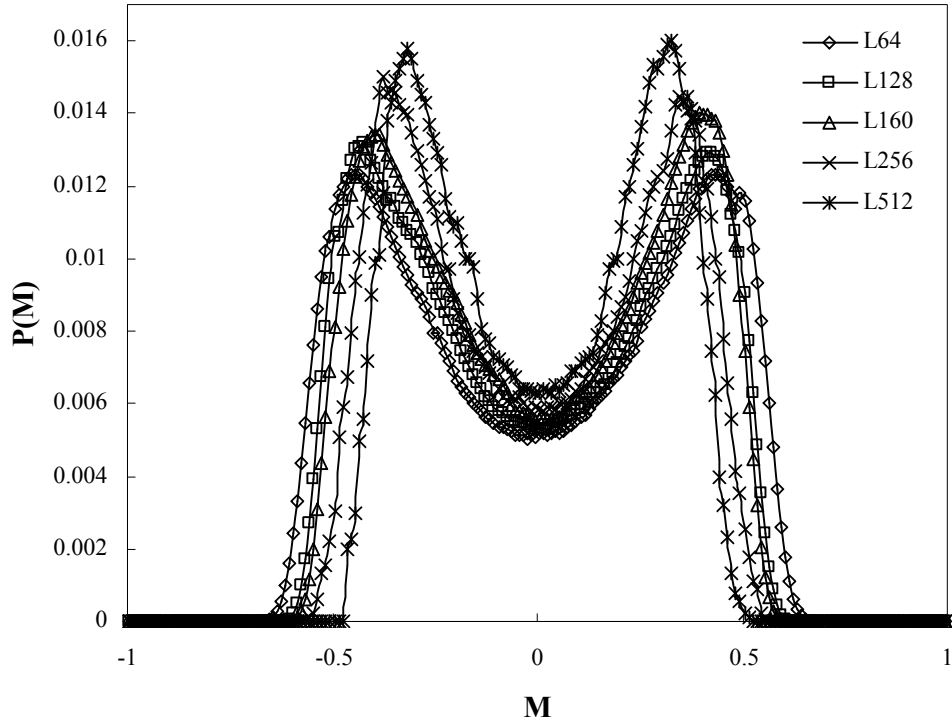
$$P_L(M) = \frac{N_M}{N_{CCAS}}$$

ifadesi ile hesaplanmıştır. Burada N_M manyetizasyonun ortaya çıktığı andaki sayı diğer bir deyişle m değerinin oluşma zaman adım sayısı; N_{CCAS} ise Creutz cellular automaton zaman adım sayısıdır.

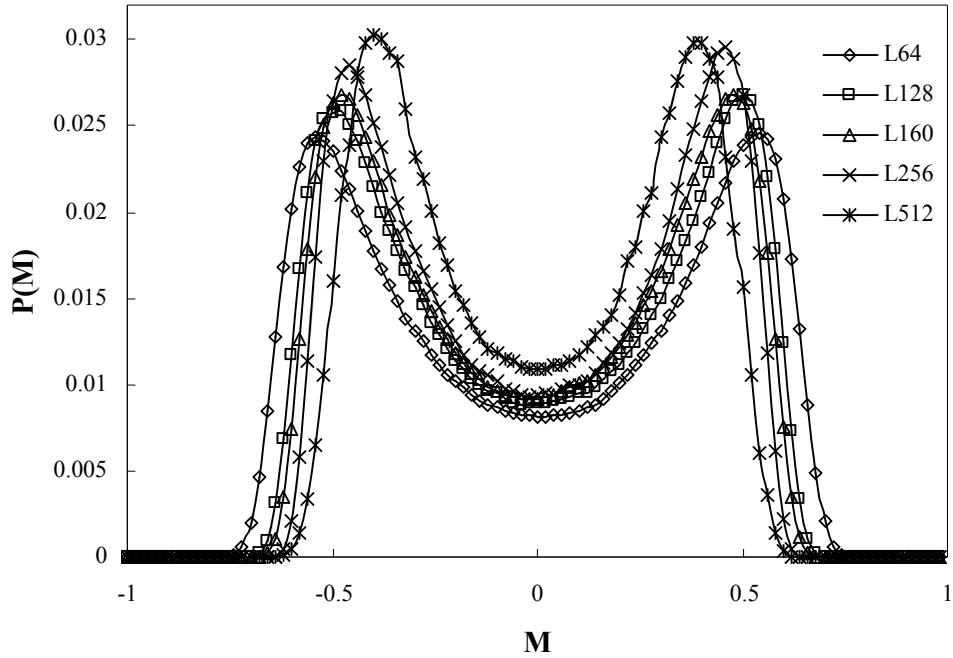
İkinci derece faz geçişi gösteren bölgede $P(M)$ fonksiyonları tam kritik sıcaklıkta birbirine eşit 2 pik vermektedir[44]. Bu bilgiden yola çıkarak 2 ve 3 boyutlu Blume Capel model ve Ising model için kendi örgü kritik sıcaklıklarında $P(M)$ fonksiyonları bulunarak analitik fonksiyonundaki sabitler belirlenmiştir. Cellular automaton algoritmalarında sıcaklık giriş parametresi olmadığı için sonsuz örgü sıcaklığını başlangıçta belirlemek çok zordur. Çalışma kapsamında bu nedenle $T_C(L)$ değerlerinde hesaplama yapıldı. Çalışma 2 boyut için $L = 64, 128, 160, 256$ ve 512 kenar uzunluklu örgülerde, 3 boyutta ise kenar uzunlukları $L = 16, 20, 24, 32$ ve 64 olan örgülerde yapılmıştır. Öncelikle örgü kritik sıcaklıkları belirlendi. Örgü kritik sıcaklığını belirlemek için periyodik sınır şartları altında 1 000 000 cellular

automaton zaman adımı süresince örgünün simülasyonu yapıldı. Bu işlem sonucunda örgünün kritik sıcaklığı manyetik alinganlığın pik değerinden ve o noktadaki $P(M)$ fonksiyonunun davranışından tayin edilmiştir. Belirlenen bu kritik sıcaklık noktasının daha hassas belirlenmesi için bu noktanın 1 ileri ve 1 gerisi alınarak bu aralıkta 2 000 000 cellular automaton zaman adımı süresince simülasyon yapılarak çıkan sonuçlardan kritik sıcaklık noktası daha hassas belirlenmiştir. Bulunan bu kritik sıcaklık için ortalama 50×10^6 cellular automaton zaman adımı simülasyon yapılarak ortalama alındı. Ortalama alırken genel davranışa uymayanlar istatistik olarak ortalamaya dahil edilmedi. Bunlar atılarak kalan dosyalar üzerinden ortalama alındı.

Şekil 4.35.a) da Blume Capel model için , Şekil 4.35.b) de ise Ising model için basit kare örgüde (2 boyut) $L = 64, 128, 160, 256$ ve 512 kenar uzunluklu örgüler için belirlenmiş olan $T_C(L)$ noktalarında yapılan istatistik sonucunda elde edilen $P(M)$ eğrileri görülmektedir. Kritik sıcaklıktaki eğriler örgü boyuna bağlı olarak değişim göstermektedir. Beklendiği gibi[78], küçük örgülerde daha geniş ve tepesi kısa, örgü boyu büyüdükçe darlaşan ve boyu uzayan eğriler ortaya çıkar. Bu davranış iki boyutlu modeller için Şekil 4.35’de görülmektedir.



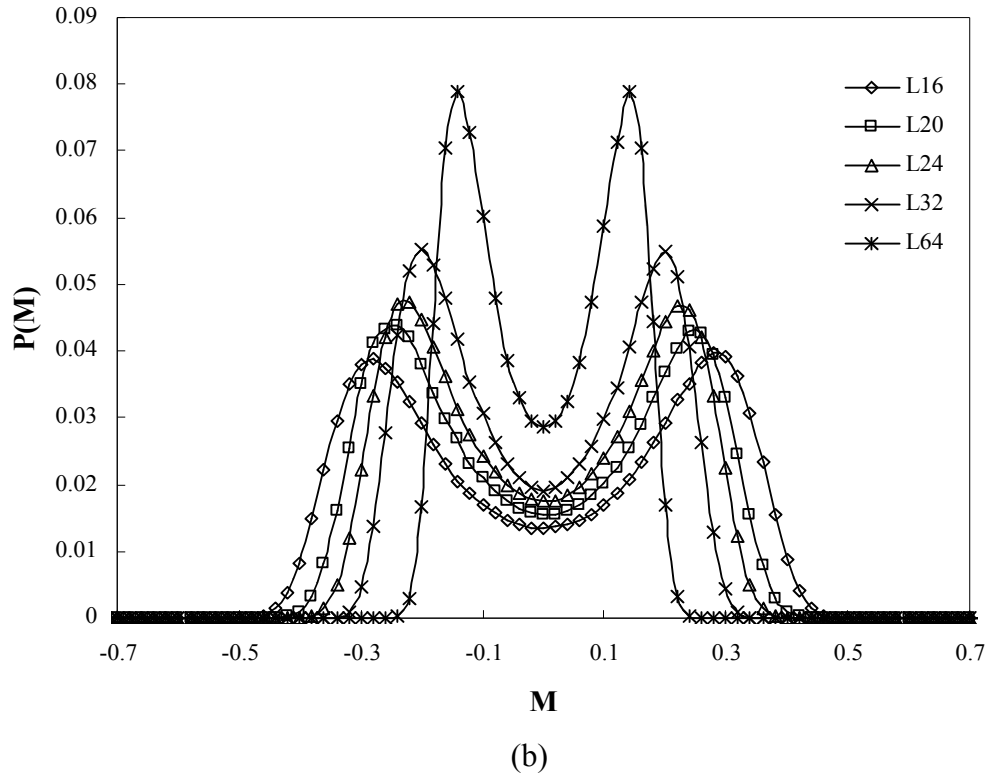
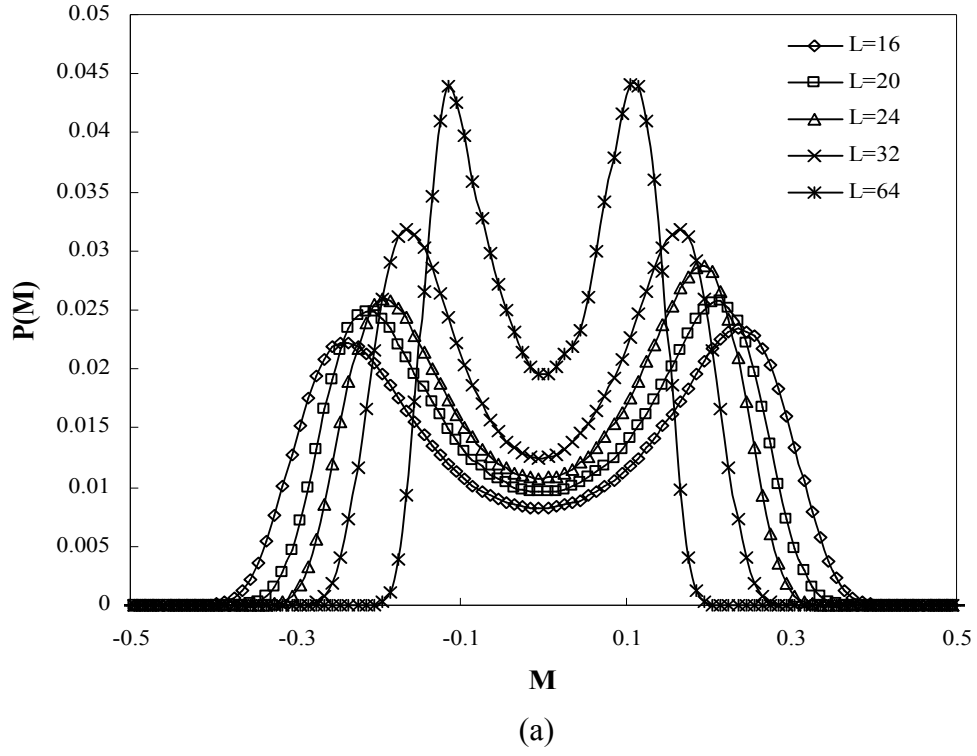
(a)



(b)

Şekil 4.35.a. 2 boyutlu Blume Capel modelin $T=T_c(L)$ için $P(M)$ ' nin M 'ye karşı değişimi

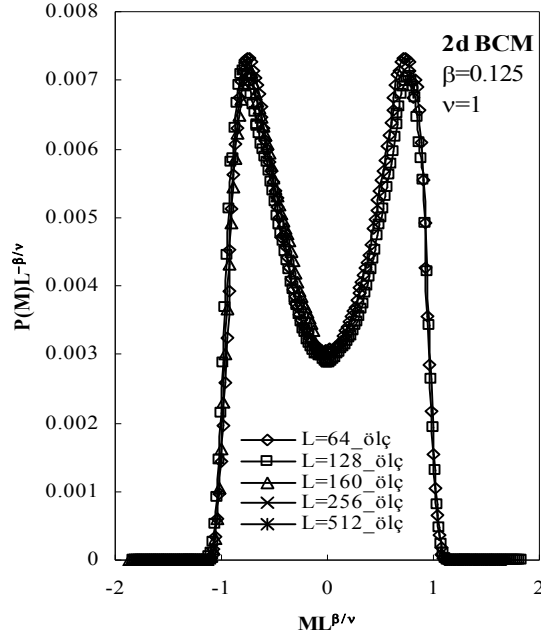
b. 2 boyutlu Ising modelin $T=T_c(L)$ için $P(M)$ ' nin M 'ye karşı değişimi.



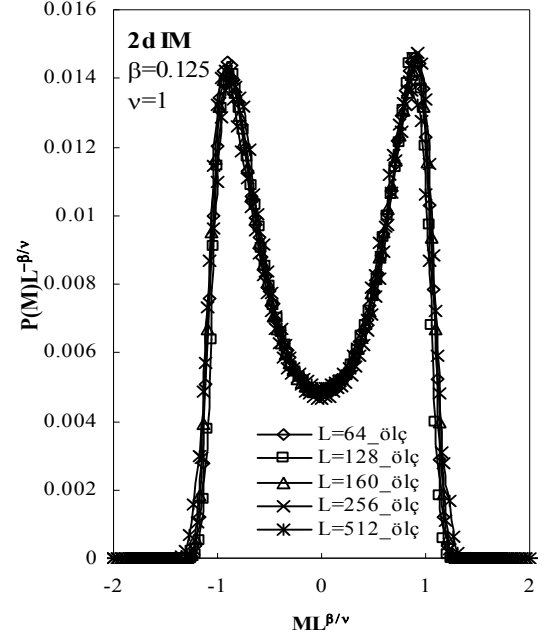
Şekil 4.36.a. 3 boyutlu Blume Capel modelin $T=T_C(L)$ için $P(M)$ ' nin M 'ye karşı değişimi
 b. 3 boyutlu Ising modelin $T=T_C(L)$ için $P(M)$ ' nin M 'ye karşı değişimi.

Şekil 4.36.a’da 3 boyutlu (basit kübik örgüde) Blume Capel modelin, b’ de ise Ising modelin basit kübik örgüde (3 boyut) $L = 16, 20, 24, 32$ ve 64 kenar uzunluklu örgüler için belirlenmiş olan $T_c(L)$ sıcaklıklarında yapılan istatistik sonucunda elde edilen $P(M)$ eğrileri görülmektedir. Basit kare örgüde örgü boyuna bağlı olarak görülen davranış basit kübik örgüde de görülmüştür. Literatürde olasılık dağılım fonksiyonları için termodinamik limite(sonsuz örgü kritik sıcaklığında) yapılmış farklı çalışmalarda da[41,67,78,106] örgü boyu arttıkça darlaşıp uzayan eğrilerin ortaya çıktığı söylenmiştir.

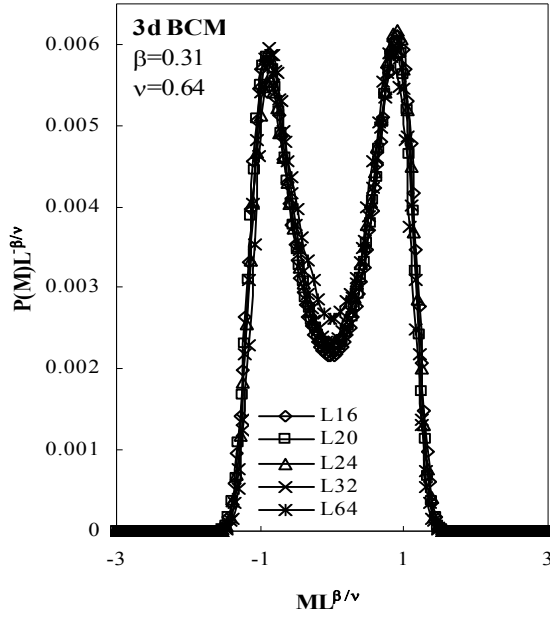
Eşitlik (2.48) verilmekte olan düzen parametresi olasılık dağılımı için sonlu örgü ölçekleme ifadesine göre ölçekleme yapıldı. Burada yapılan ölçeklemelerde evrensel kritik üs değerleri kullanılmıştır. 2 boyutlu sistemlerde $\beta = 0.125$, $\nu = 1$, 3 boyutlu sistemlerde ise $\beta = 0.31$, $\nu = 0.64$ sonsuz örgü kritik üs değerleri alınarak ölçekleme yapıldı. Şekil 4.37.(a)’da 2 boyutlu Blume Capel model, (b)’de 2 boyutlu Ising model, (c)’de 3 boyutlu Blume Capel model ve (d)’ de 3 boyutlu Ising model için sonlu örgü ölçekleme grafikleri verilmektedir. Her iki modelde de evrensel kritik üs değerleriyle ölçekleme gerçekleşmiştir. Yapılan ölçekleme sonucunda tüm eğrilerin üst üste geldiği görüldü. Düzen parametresi olasılık dağılım fonksiyonları için verilen sonlu örgü ölçekleme teorisi, örgülerin kendi örgü kritik sıcaklığı için bulunmuş olan sonuçlarla da çalışmaktadır. Bu ilk kez tez çalışması kapsamında doğrulanmış oldu.



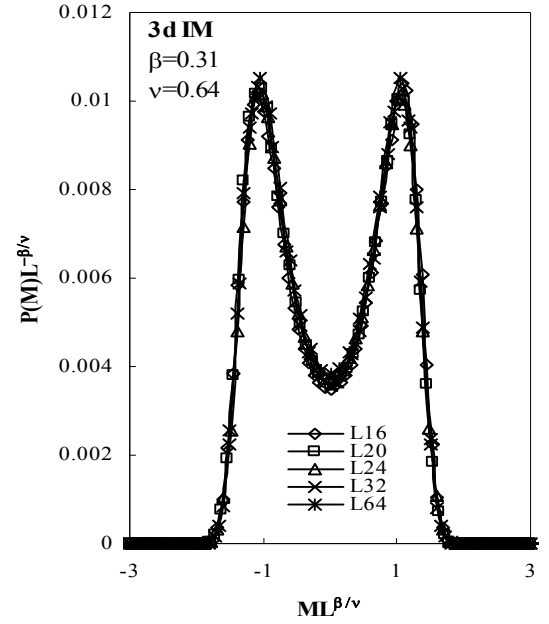
(a)



(b)



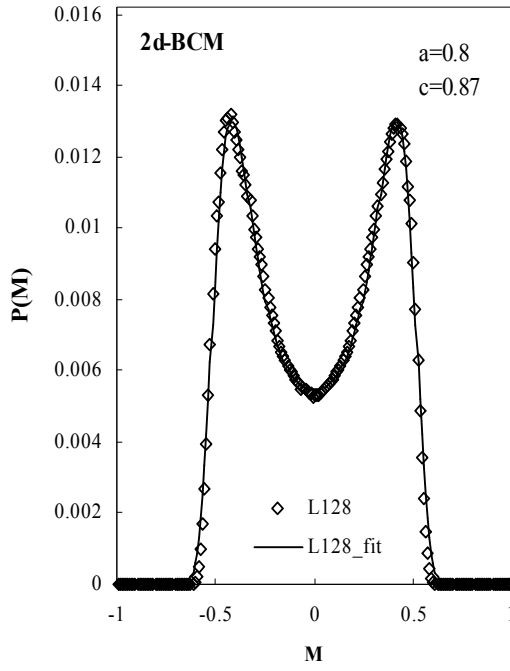
(b)



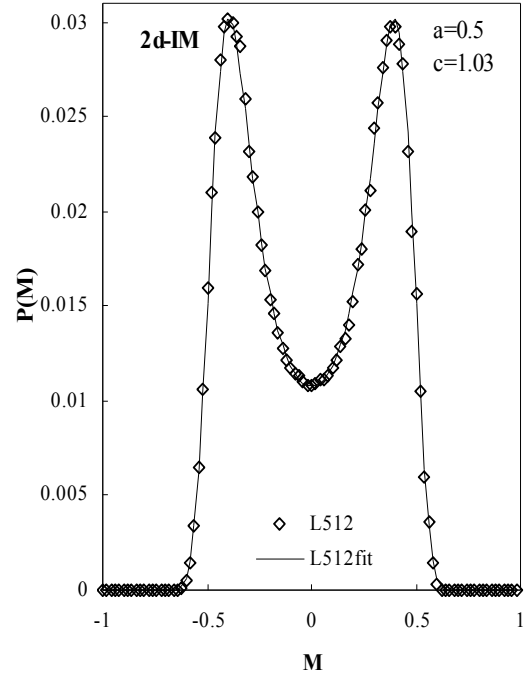
(d)

Şekil 4.37.a. 2 boyutlu BCM için düzen parametresi olasılık dağılımının $P(M)$, $T=T_C(L)$ için M 'ye karşı sonlu örgü ölçeklemesine göre çizimi,
 b. 2 boyutlu IM için düzen parametresi olasılık dağılımının $P(M)$, $T=T_C(L)$ için M 'ye karşı sonlu örgü ölçeklemesine göre çizimi
 c. 3 boyutlu BCM için düzen parametresi olasılık dağılımının $P(M)$, $T=T_C(L)$ için M 'ye karşı sonlu örgü ölçeklemesine göre çizimi
 d. 3 boyutlu IM için düzen parametresi olasılık dağılımının $P(M)$, $T=T_C(L)$ için M 'ye karşı sonlu örgü ölçeklemesine göre çizimi

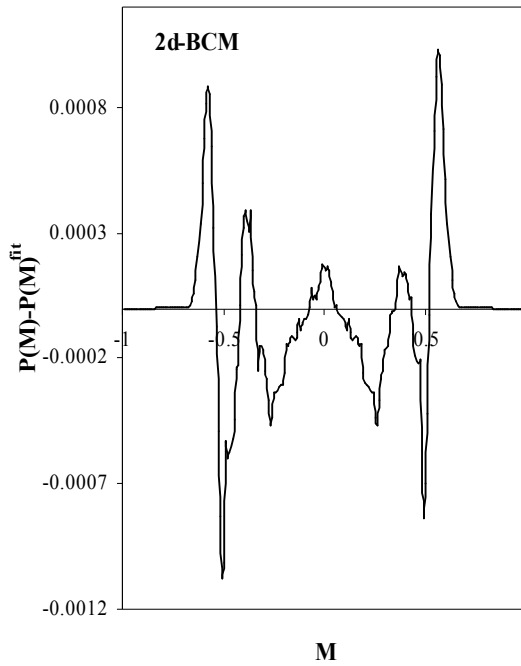
Düzen parametresi olasılık dağılımı için yazılmış olan analitik fonksiyonun en basit hali eşitlik 2.50’de verilmektedir. Buradaki a ve c katsayıları birer sabit olup $P(M)$ eğrisine uydurulan ve analitik ifadeye göre yapılmış fit ile belirlenebilmektedir. Literatürde 3 boyutlu Blume Capel ve Ising model için sonsuz örgü kritik sıcaklığındaki düzen parametresi olasılık dağılım fonksiyonlarına analitik ifadeye göre fit yapılarak a ve c değerleri tespit edilmiştir. Tez çalışması kapsamında ise ilk kez 2 boyutta ve 3 boyutta Blume Capel model ve Ising model için ilk kez kendi örgü kritik sıcaklıklarındaki düzen parametresi olasılık dağılım fonksiyonları için analitik ifadeye göre fit yapılmış a ve c değerleri tespit edilmiştir. Ayrıca XLSTAT 2008 programı kullanılarak aynı fitler tekrarlanmıştır. Her iki yöntemle de aynı a ve c değerleri tespit edildi. Analitik fonksiyona yapılan fit sonucunda elde edilen değerler Çizelge 4.9’da verilmektedir. Şekil 4.38.a da verilmekte olan grafik 2 boyutlu Blume Capel model için kenar uzunluğu $L=128$ olan örgüde $P(M)$ fonksiyonu ile analitik fonksiyona göre yapılan fit eğrisini göstermektedir. (b) deki ise, 2 boyutlu Ising modelin kenar uzunluğu $L=512$ olan örgüsü için aynı şekilde $P(M)$ fonksiyonu ile analitik fonksiyona göre yapılan fit eğrisidir. Yapılan fitler tüm örgülerde $P(M)$ fonksiyonlarına oldukça iyi uyum sağlamaktadır. Uyumun test edilmesi için (c) ve (d)’de $P(M)$ fonksiyonu ile yapılmış olan fit fonksiyonunun farkları alınarak dağılımı gösterilmiştir. $L=128$ kenar uzunluklu basit kare örgüde Blume Capel model için yapılan fit ile $P(M)$ fonksiyonu ortalama 0,04 ‘lük, $L=512$ kenar uzunluklu basit kare örgüde Ising model için ise yapılan fit ile $P(M)$ fonksiyonu ortalama %3‘lük sapmayla birbirine uymaktadır. 2 boyutlu, her iki modeldeki tüm örgülerde, en fazla %4 ‘lük hata oranıyla $P(M)$ fonksiyonları ile fitleri birbirine uymaktadır.



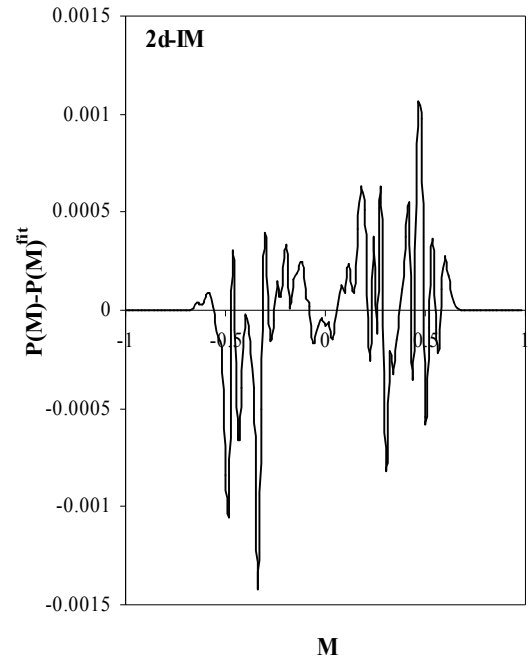
(a)



(b)

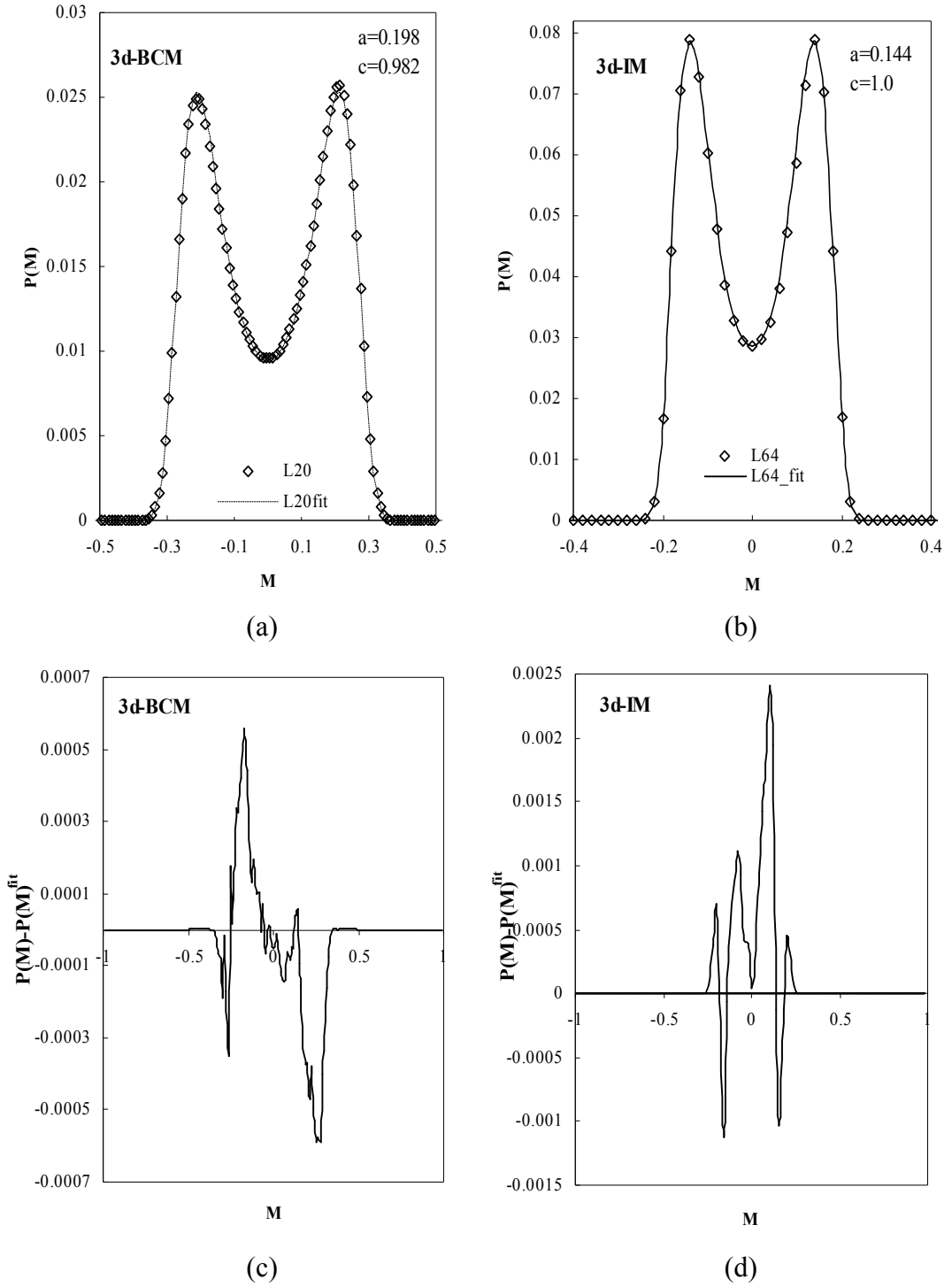


(c)



(d)

Şekil 4.38.a. $P(M)$ 'nin, 2d BCM, $L=128$, $T=T_C(L)$ için M 'ye karşı analitik ifadesine göre yapılan fit
 b. 2d IM, $L=512$, $T=T_C(L)$ için M 'ye karşı analitik ifadesine göre yapılan fit
 c. $L=128$ için $P(M)$ ve fit'in farkı
 d. $L=512$ için $P(M)$ ve fit'in farkı.



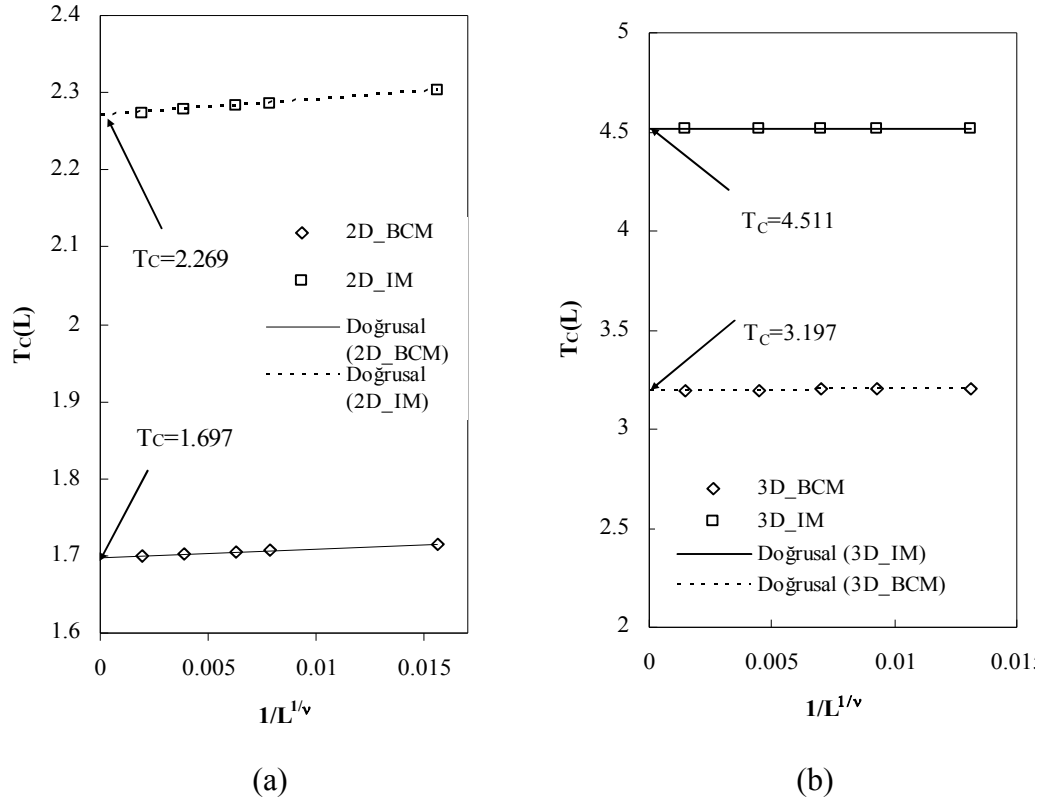
Şekil 4.39. a. $P(M)$ 'nin, 3d BCM, $L=20$, $T=T_C(L)$ için M 'ye karşı analitik ifadesine göre yapılan fit
 b. 3d IM, $L=64$, $T=T_C(L)$ için M 'ye karşı analitik ifadesine göre yapılan fit
 c. $L=20$ için $P(M)$ ve fit'in farkı
 d. $L=64$ için $P(M)$ ve fit'in farkı.

3 boyutlu Blume Capel model için kenar uzunluğu $L=20$ olan örgüde $P(M)$ fonksiyonu ile analitik fonksiyona göre yapılan fit eğrisi, Şekil 4.39.a da verilmekte olan grafikte görülmektedir. 3 boyutlu Ising modelin kenar uzunluğu $L=64$ olan örgüsü için aynı şekilde $P(M)$ fonksiyonu ile analitik fonksiyona göre yapılan fit eğrisi ise (b) dedir. 2 boyutta olduğu gibi 3 boyutta, her iki modelde de yapılan fitler $P(M)$ fonksiyonlarına oldukça iyi uyum sağlamaktadır. (c) ve (d)'de $P(M)$ fonksiyonu ile yapılmış olan fit fonksiyonunun farkları alınarak dağılımı gösterilmiştir. $L=20$ kenar uzunluklu basit kare örgüde Blume Capel model için yapılan fit ile $P(M)$ fonksiyonu ortalama %2 'lik, $L=64$ kenar uzunluklu basit kare örgüde Ising model için ise yapılan fit ile $P(M)$ fonksiyonu ortalama %3 'lük sapmayla birbirine uymaktadır. En fazla %5 lik oranlarla tüm örgülerde uyum görülmüştür.

Her örgünün kendi kritik sıcaklığında $P(M)$ fonksiyonları bulunarak çalışılmıştır. Örgü kritik sıcaklığı $T_C(L)$, örgü boyu arttıkça (sonsuz örgüye doğru yaklaştıkça) azalmakta ve sonsuz örgü kritik sıcaklığına doğru gitmektedir. Tespit edilmiş olan bu örgü kritik sıcaklıklarının doğruluğunu ispatlamak için $T_C(L)$ nin $1/L^{1/\nu}$ 'ye karşı değişimi çizilerek doğrusal eğimin y eksenini kestiği nokta belirlenmiştir. Bu kesim noktası $T_C(\infty)$ değerini verir. Şekil 4.40' da sonsuz örgü kritik sıcaklığını tespit etmek için çizilen bu grafikler gösterilmektedir. Çizelge 4.8'de çalışma kapsamında bulunan sonsuz örgü kritik sıcaklıkları ile literatürde bu sistemler için bulunmuş olan kritik sıcaklık değerleri verilmektedir. Bulunan değerler literatür değerleri ile uyumludur.

Çizelge 4.8. Sonsuz örgü kritik sıcaklık değerleri[4,40,102]

	2D		3D	
	Literatür	Bulunan değer	Literatür	Bulunan değer
BCM	1.695	1.697	4.51	4.511
IM	2.269	2.269	3.197	3.197



Şekil 4.40.a. 2 boyutlu BCM ve IM'in, $T_c(L)$ nin $1/L^{1/\nu}$ ye karşı değişimi
 b. 3 boyutlu BCM ve IM'in $T_c(L)$ nin $1/L^{1/\nu}$ ye karşı değişimi.
 Eğrilerin kesim noktasından $T_c(\infty)$ tespit edilmiştir.

Analitik sonlu örgü ölçekleme fonksiyonunun parametreleri için, bu fonksiyonun L örgü boylarına ait düzen parametresi olasılık dağılımlarının sonlu örgü ölçekleme çizimlerine uydurulmasıyla elde edilen tüm sonuçlar Çizelge 4.9'da verilmektedir. Burada verilen $T_c(L)$, manyetik alınganlık ve düzen parametresinin ortalama değerleri, belirlenen örgü kritik sıcaklığında, 2 boyut için yaklaşık 80×10^6 , üç boyut için yaklaşık 50×10^6 cellular automaton zaman adımı simülasyon yapılarak bulunan değerlerdir. Çizelgede verilen kritik sıcaklık, manyetik alınganlık ve düzen parametresi değerlerine $\pm$ standart sapmaları yazılarak verilmiştir. Ayrıca çizelgede, kritikteki $P(M)$ fonksiyonlarının M_0 ve P_0 değerleri de verilmektedir.

Çizelge 4.9. Analitik sonlu örgü ölçekleme fonksiyonunun parametreleri için, bu fonksiyonun L örgü boylarına ait düzen parametresi olasılık dağılımlarının sonlu örgü ölçekleme çizimlerine uydurulmasıyla elde edilen değerler

2D		$T_c(L)$	M ort	X ort	a	c	M_0	P_0	Adım sayısı
BCM	L=64	1.715 ± 0.003	0.35 ± 0.05	90.88 ± 23.33	0.85	0.88	0.445	0.0123	25×10^6
	L=128	1.706 ± 0.0009	0.307 ± 0.036	325.38 ± 53.35	0.8	0.87	0.415	0.0133	60×10^6
	L=160	1.704 ± 0.0008	0.292 ± 0.043	467.13 ± 106.06	0.76	0.86	0.395	0.014	80×10^6
	L=256	1.703 ± 0.0008	0.29 ± 0.07	778.24 ± 395.5	0.74	0.87	0.355	0.0144	80×10^6
	L=512	1.700 ± 0.0004	0.282 ± 0.04	1075.17 ± 569.64	0.5	0.87	0.324	0.0159	90×10^6
IM	L=64	2.304 ± 0.002	0.395 ± 0.024	127.42 ± 11.91	0.86	1.1	0.52	0.0247	25×10^6
	L=128	2.286 ± 0.001	0.367 ± 0.034	429.70 ± 68.67	0.82	1.09	0.485	0.0269	60×10^6
	L=160	2.284 ± 0.0005	0.355 ± 0.019	642.47 ± 63.93	0.78	1.07	0.463	0.02683	80×10^6
	L=256	2.278 ± 0.001	0.353 ± 0.057	1238.95 ± 446.95	0.76	1.06	0.44	0.028	90×10^6
	L=512	2.274 ± 0.0005	0.336 ± 0.055	3216.06 ± 1866.65	0.5	1.02	0.396	0.0302	90×10^6
3D		$T_c(L)$	M ort	X ort	a	c	M_0	P_0	Adım sayısı
BCM	L=16	3.201 ± 0.002	0.190 ± 0.006	30.94 ± 1.575	0.297	1.009	0.24	0.023	18×10^6
	L=20	3.1997 ± 0.002	0.169 ± 0.008	48.24 ± 3.625	0.198	0.982	0.211	0.0253	20×10^6
	L=24	3.1991 ± 0.0003	0.152 ± 0.002	68.97 ± 1.287	0.173	0.938	0.1895	0.0273	30×10^6
	L=32	3.1987 ± 0.001	0.13 ± 0.009	119.46 ± 12.23	0.152	0.92	0.1642	0.0317	42×10^6
	L=64	3.1973 ± 0.0004	0.088 ± 0.006	483.66 ± 46.79	0.14	0.817	0.112	0.044	64×10^6
IM	L=16	4.518 ± 0.002	0.227 ± 0.004	43.01 ± 1.29	0.293	1.065	0.285	0.0392	20×10^6
	L=20	4.517 ± 0.001	0.200 ± 0.005	66.89 ± 4.28	0.197	1.042	0.25	0.0439	20×10^6
	L=24	4.516 ± 0.001	0.181 ± 0.006	96.49 ± 4.66	0.173	1.03	0.226	0.0477	30×10^6
	L=32	4.5138 ± 0.001	0.159 ± 0.007	170.18 ± 12.56	0.154	1.0	0.1976	0.055	40×10^6
	L=64	4.512 ± 0.0005	0.112 ± 0.0006	685.56 ± 50.53	0.144	1.0	0.139	0.0782	48×10^6

Çizelge 4.9 da analitik sonlu örgü ölçekleme fonksiyonunun parametreleri için, bu fonksiyonun L örgü boylarına ait düzen parametresi olasılık dağılımlarının sonlu örgü ölçekleme çizimlerine uydurulmasıyla elde edilen değerler verilmektedir. Şekil 4.35 ve 4.36'da verilen $P(M)$ -M grafiklerinden de anlaşılacağı üzere P_0 değerleri örgü boyu arttıkça artar, M_0 değerleri ise örgü boyu arttıkça azalır. a ve c katsayıları ise örgü boyu ile birlikte azalmakta ve sabit bir değere doğru gitmektedir. Bulunan a sabiti değerleri 2 boyutta Blume Capel model ve Ising model için aynı sabite doğru gitmektedir. c değerleri ise 2 modelde farklı bir sabite doğru gitmektedir. Aynı şekilde a sabiti değerleri 3 boyutta da Blume Capel model ve Ising model için aynı sabite doğru giderken c değerleri 2 modelde farklı bir sabite doğru gider.

Çizelge 4.10. Metropolis algoritması kullanılarak basit kübik Spin-1 Ising Model'in sonsuz örgü kritik sıcaklığında bulunmuş değerler[68]

Örgü	Method	Adım sayısı	a	c	M_0
12^3	M5W	10^7	0.1648	0.7712	0.30243
14^3	M5W	$3.6 \cdot 10^7$	0.1624	0.7714	0.27915
16^3	M5W	10^7	0.1576	0.7746	0.26035
18^3	M5W	10^7	0.1585	0.7749	0.24500
20^3	M5W	$9 \cdot 10^6$	0.1568	0.7782	0.23194
20^3	M5W	$3.6 \cdot 10^7$	0.1578	0.7762	0.23194
22^3	M5W	10^7	0.1618	0.7739	0.22108
26^3	M5W	10^7	0.1570	0.7761	0.20243
32^3	M5W	10^7	0.1553	0.7776	0.18180
38^3	M10W	10^7	0.1575	0.7732	0.16633
46^3	M10W	$2 \cdot 10^6$	0.158	0.781	0.1506
58^3	M10W	$7.2 \cdot 10^5$	0.143	0.776	0.1331

Çizelge 4.11. Swendsen-Wang cluster algoritması kullanılarak basit kübik Ising Model'in sonsuz örgü kritik sıcaklığında bulunmuş değerler[68]

Örgü	Method	Adım sayısı	a	c	M_0
12^3	SW	$7.2 \cdot 10^5$	0.268	0.859	0.3892
16^3	SW	$7.2 \cdot 10^5$	0.237	0.845	0.3360
20^3	SW	$7.2 \cdot 10^5$	0.209	0.839	0.2984
32^3	SW	$7.2 \cdot 10^5$	0.200	0.807	0.2344
58^3	SW	$7.2 \cdot 10^5$	0.196	0.807	0.1733

Analitik fonksiyonun basit halini öneren Tyspin ve Blöte, Monte Carlo algoritmaları kullanılarak 3 boyutlu Spin-1 Ising model ve Spin-1/2 Ising model için çeşitli örgülerde a ve c analitik fonksiyon sabiti değerlerini bulmuştur[68]. Çizelge 4.10 ve 4.11’de Tyspin ve Blöte’nin değerleri verilmektedir[68]. Bu sonuçlar, tüm örgüler için sonsuz örgü kritik sıcaklık değerlerinde yapılan simülasyonlar sonucunda elde edilen $P(M)$ fonksiyonlarının analitik fonksiyona yapılan fit’i ile bulunmuştur. Termodinamik limitte ($L \rightarrow \infty$), $P(M)$ fonksiyonları evrenseldir. Şekil 4.37’de olasılık dağılımı sonlu örgü ölçeklemesine göre evrensel kritik üs değerleri kullanılarak yapılan ölçekleme grafiklerinden de bu görülmektedir. Tyspin ve Blöte buradan hareketle $P(M)$ fonksiyonlarının analitik ifadesindeki a ve c sabitlerinin de evrensel olacağının düşünüldüğünü söylemişlerdir. Ancak Çizelge 4.10 ve 4.11’deki sonuçları incelendiğinde bu sabitlerin 2 modelde farklı değerlere gittiği görülmektedir. Çizelge 4.9’daki tez kapsamında yapılan çalışmada elde edilmiş olan a ve c parametreleri incelendiğinde a değerinin iki modelde de aynı sabite, c ’nin ise iki modelde de farklı değerlere gittiği ortadadır. a sabiti evrensel ancak c sabiti evrensel değildir.

Her örgünün kendi kritik sıcaklığında çizilen $P(M)$ fonksiyonlarında $M=0$ değeri için Eşitlik 2.52 deki ifadeye göre c sabiti için sağlama yapıldı. Bu sonuçlar Çizelge 4.12’de verilmektedir. Bu çizelgeden görüldüğü üzere her örgüde, analitik fonksiyona göre yapılan fitten tespit edilen c sabiti, eşitlik 2.53 deki ifadeye göre yerine konulduğunda bulunan sonuçlar en fazla %2 lik hata oranıyla birbirine uymaktadır. Yapılan fitlerin doğruluğu bu yöntemle bir kez daha tespit edilmiştir.

Çizelge 4.12. Analitik sonlu örgü ölçekleme fonksiyonunun c parametresi için, Eşitlik 2.52'ye göre yapılan doğrulama değerleri

2D		P_0	P	c	e^c	P/P_0
BCM	L=64	0.0051	0.0123	0.88	2.41	2.41
	L=128	0.0053	0.0128	0.87	2.39	2.41
	L=160	0.0059	0.0139	0.86	2.36	2.36
	L=256	0.0059	0.0145	0.87	2.39	2.45
	L=512	0.0066	0.0160	0.87	2.39	2.42
IM	L=64	0.0082	0.0246	1.1	3.00	3.00
	L=128	0.0089	0.0267	1.09	2.97	3.00
	L=160	0.0092	0.0268	1.07	2.92	2.91
	L=256	0.0096	0.0274	1.06	2.89	2.86
	L=512	0.0109	0.0302	1.02	2.80	2.77
3D		P_0	P	c	e^c	P/P_0
BCM	L=16	0.0083	0.0227	1.009	2.74	2.74
	L=20	0.0095	0.0256	0.982	2.67	2.69
	L=24	0.0107	0.0272	0.938	2.55	2.54
	L=32	0.0125	0.0318	0.92	2.51	2.54
	L=64	0.0196	0.0439	0.817	2.26	2.24
IM	L=16	0.0135	0.0389	1.065	2.89	2.88
	L=20	0.0154	0.0432	1.042	2.84	2.81
	L=24	0.0175	0.0475	1.01	2.74	2.71
	L=32	0.0199	0.0549	1.01	2.74	2.76
	L=64	0.0287	0.0788	1.0	2.72	2.75

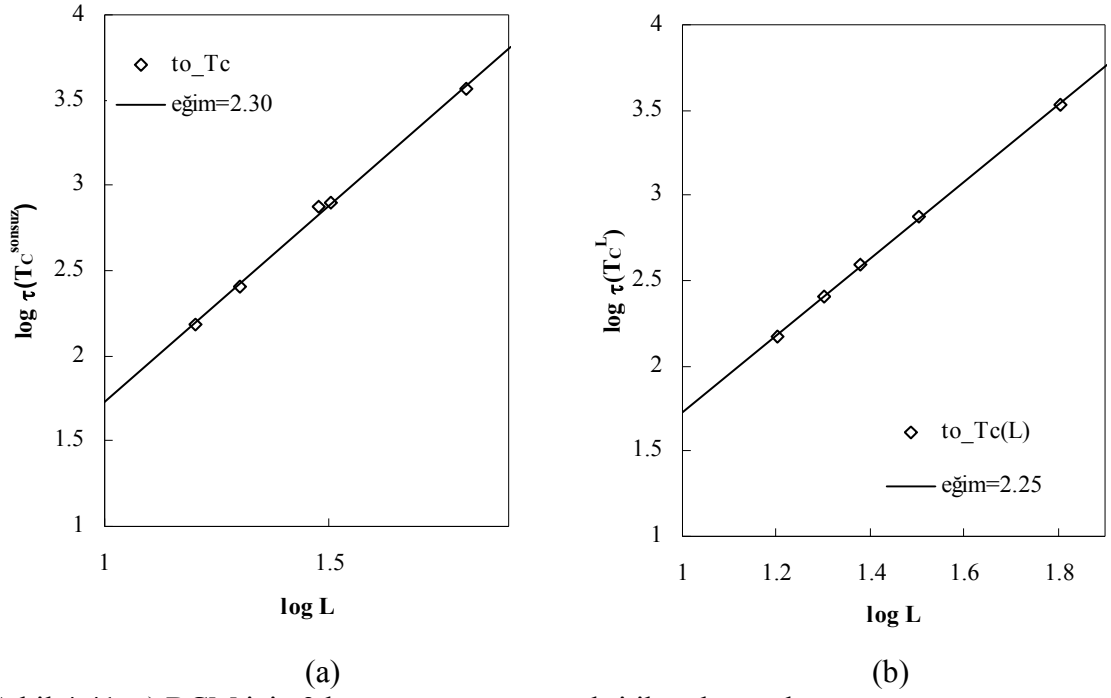
Literatürde, özellikle 2 boyut için bu analitik fonksiyonların sabitleri daha önce bulunmamış ilk kez tez çalışması kapsamında yapılmıştır. 3 boyutlu modeller için daha önce yapılmış olan çalışmalar sonsuz örgü kritik sıcaklığında yapılmıştır. Bu çalışmada ise ilk kez örgülerin kendi kritik sıcaklıklarında analitik fonksiyonlara göre sonlu örgü ölçeklemesi yapılmış ve analitik fonksiyon sabitleri belirlenmiştir.

Çizelge 4.9 daki sonuçlar incelendiğinde Blume Capel model ve Ising modelde en büyük örgüler için, a sabiti 2 boyutta 0,5, 3 boyutta ise 0,14 civarındadır. Bu sonuçlar, Çizelge 4.10’da verilmekte olan Monte Carlo algoritmaları kullanılarak sonsuz örgü kritik sıcaklığında yapılmış olan çalışmadaki değerlerle uyumludur. a sabiti, iki ve üç boyutta her iki modelde de sonsuz örgüye doğru aynı değerlere gittiği için evrenselidir. c sabitinin, her iki modelde de farklı sonuç verdiğiinden dolayı evrensel olmadığı sonucuna varıldı. Blume Capel modelde sistemde bulunan “0” ların sayısının bu sabitin evrenselliği üzerinde etkisinin olduğu düşünülmektedir.

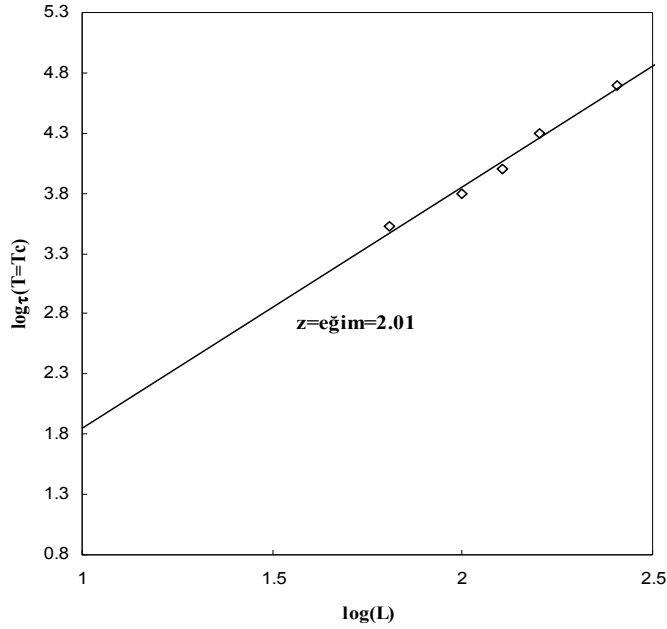
4.6. Kritik Noktada Dinamik Kritik Üs Hesabı

$P(M)$ düzen parametresi olasılık dağılımı fonksiyonlarından kritik sıcaklığın değeri tam olarak belirlenebilmektedir. z_M ’nin hesaplandığı bir yöntem olan kritik sıcaklık $T=T_C$ ’de doğrusal durulma zamanını örgü uzunluğu L ’ye bağlayan ve denklem 65 ile verilen dinamik sonlu örgü ölçekleme bağıntısı kullanılarak bulunan kritik sıcaklıklarda z_M hesaplandı. Bunun için her örgünün sonsuz ve kendi kritik sıcaklığında düzen parametresi için zamana bağlı korelasyon fonksiyonları oluşturulup $\exp(-t/\tau)$ üstel fonksiyonuna fit edilerek $\log(\phi^M(t))$ ’nin t ’ye karşı değişiminin eğiminden her örgünün kritik sıcaklıktaki durulma zamanları tespit edilmiştir. Çizilen $\log(\tau_M(T_C)) - \log L$ grafiğinin bir doğruya uyar ve eğimi Şekil.4.40’da görüldüğü gibi dinamik kritik üs z değerini verir.

z değerleri daha önce bulunmuş olan ve Çizelge 4.1 ve 4.3 deki değerlerle uyum göstermektedir. Sonsuz örgü kritik sıcaklıklarından hesaplanan z dinamik kritik üs değeri ile kendi örgü kritik sıcaklıklarından elde edilen datalarla bulunan z değeri arasında ufakta olsa farklılık olduğu görülür. Sonsuz örgü kritik sıcaklığında sadece 3 boyutlu Blume Capel model için yapıldı.



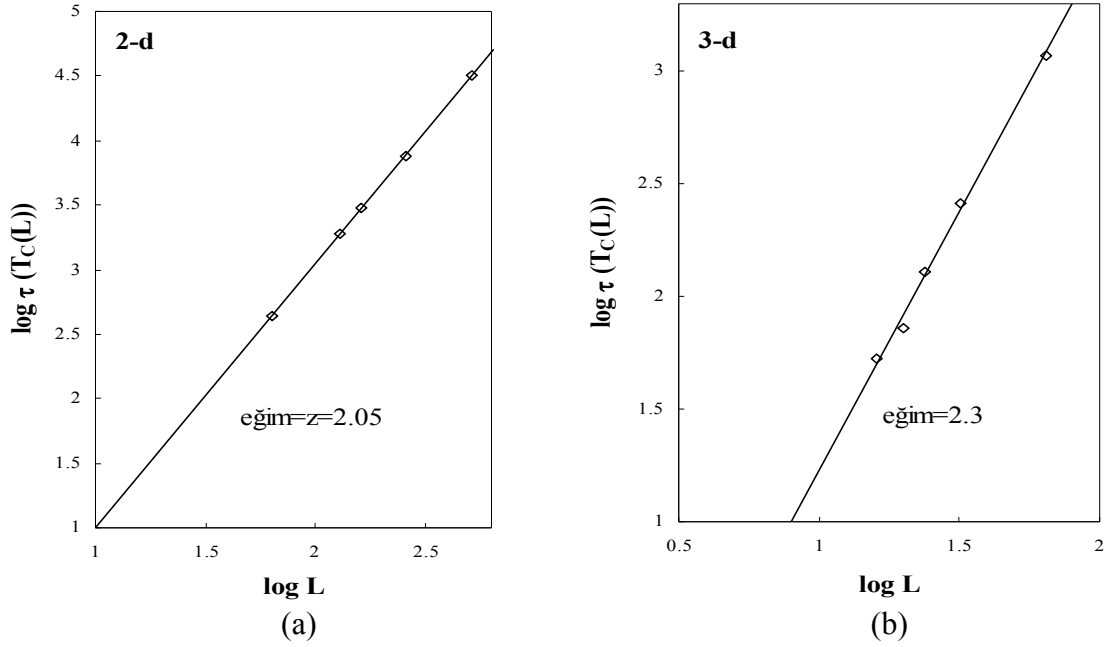
Şekil 4.41. a) BCM için 3 boyutta sonsuz örgü kritik noktasından,
b) Her örgünün kendi örgü kritik sıcaklığından bulunan z değerleri.



Şekil 4.42. 2 boyutta BCM'nin kendi örgü kritiklerinden bulunan z grafiği.

2 ve 3 boyutlu Ising model için de kritik sıcaklıktaki $P(M)$ fonksiyonları bulundu. Şekil 4.42'de Ising model için z dinamik kritik üs hesaplanması amacıyla çizilen grafikler görülmektedir. Bulunan sonuçlara göre her iki modelin ikinci derece faz

geçiş için cellular automaton standart algoritmasının dinamik kritik davranışı birbirine uymaktadır.



Şekil 4.43. a. IM için 2 boyutta kendi örgü kritiklerinden bulunan z
b. 3 boyutta kendi örgü kritiklerinden bulunan z grafikleri

2 boyutlu Ising model için bulunan dinamik kritik üs z , önceki yıllarda yine cellular automaton algoritmasıyla bulunan kritik üsse eşittir[79].

5. SONUÇLAR

Bu çalışmada, 2 ve 3 boyutta Blume Capel modelin dinamik davranışının ortaya konulması amaçlanmıştır. Bu amaç doğrultusunda modelin cellular automaton algoritması ile simülasyonu gerçekleştirilmiştir. Hesaplamalarda standart cellular automaton ve cellular automaton algoritmasını temel alarak türetilen soğutma ve ısıtma algoritmaları[40,76] kullanılmıştır. Modelin dinamik davranışı ortaya konulurken aynı zamanda dinamik davranışın cellular automaton algoritmalarına bağımlılığı da ilk kez çalışma kapsamında araştırılmıştır. Çalışmalar, sonlu büyüklükteki örgülerde yapılmıştır. Kullanılan kritik sıcaklıklar sonlu örgülerde manyetik alınganlık piklerinden elde edilen değerlerin sonsuza ekstrapolasyonundan ve binder kümülanlarının kesim noktalarından elde edilmiştir. Soğutma algoritması kullanılarak ikinci derece faz geçiş bölgesinde farklı soğutma hızları altında statik üslerin davranışı da ilk kez çalışma içerisinde incelenmiş, burada algoritmanın statik üsler üzerinde bir etkisinin olmadığı tespit edilmiştir. Aynı şekilde ikinci derece faz geçiş bölgesinde standart, ısıtma ve farklı soğutma oranları için soğutma algoritması kullanılarak modelin dinamik davranışı incelenmiş ve statik olayda olduğu gibi dinamik davranışta da algoritmanın bir etkisinin olmadığı görülmüştür. İki boyutlu Blume Capel modelin faz diyagramı daha önce Monte Carlo renormalizasyon grubu ve standart cellular automaton için çizilmiş[13,104], soğutma algoritması kullanılarak ise ilk kez tez çalışması kapsamında ortaya konmuştur. Bulunan üçlü kritik noktanın yeri, literatür sonuçlarıyla benzerlik göstermektedir. Tespit edilen üçlü kritik noktada dinamik davranış ilk kez bu çalışmada incelenmiştir. 3 boyutlu Blume Capel modelin daha önce bulunmuş olan üçlü kritik noktasında da[40] ilk kez dinamik davranış incelenmiştir. Ayrıca modelin 2 ve 3 boyutta birinci derece faz geçişi gösterdiği faz uzayında da dinamik davranış incelenerek dinamik kritik üsler tespit edilmiştir. Birinci derece faz geçiş bölgesinde özellikle 3 boyutlu Blume Capel model için statik üslerin algoritmaya bağlı olduğu bilinmektedir[75]. Aynı düşünceyle algoritmanın dinamik davranış üzerine etkisi incelenerek birinci derece faz geçiş bölgesinde modelin dinamik davranışının algoritmaya bağlı olduğu sonucu çıkarılmıştır. Birinci derece faz geçiş bölgesinde dinamik kritik üssün boyuta gittiği tespit edildi.

2 ve 3 boyutta hem Blume Capel hem de Ising modelin kendi örgü kritik sıcaklıklarında düzen parametresi olasılık dağılımı fonksiyonları $P(M)$ bulunarak sonlu örgü ölçekleme teorisine göre ölçeklemeleri yapılmıştır. Literatürde daha önce önerilmiş olan ölçeklemenin analitik fonksiyonuna göre[68], bu fonksiyondaki parametreler fit yöntemiyle bulunmuş ve a , c parametrelerinin evrenselliği tartışılmıştır. Sonuçlara göre, “ a ” parametresinin evrenselliği bu çalışma kapsamında bir kez daha ortaya konmuştur. “ c ” parametresinin ise evrensel olmadığı, her iki model için elde edilen sonuçlara göre söylenebilir. “ c ” parametresi $P(M)$ fonksiyonlarındaki tepe noktası ile çukur arasındaki uzaklığı kontrol etmektedir. Bu uzaklık ise sıcaklığa göre değişim gösterir. Literatürde sonsuz örgü kritik sıcaklığında ve 3 boyut için bu fonksiyon kullanılarak bulunan sonuçlar, çalışma kapsamında her örgünün kendi kritik sıcaklığında ve 2 boyut için ilk kez yapılmıştır. Sonuç olarak “ a ” parametresi evrensel, “ c ” parametresi evrensel değildir.

Blume Capel modelin $P(M)$ fonksiyonları yardımıyla tespit edilmiş olan kendi örgü kritik sıcaklıklarından ve sonsuz örgü kritik sıcaklığından da dinamik kritik üs hesaplanmış, önceki sonuçları doğruladığı görülmüştür. Ayrıca Ising Model için de kendi örgü kritik sıcaklıklarındaki simülasyon sonuçları kullanılarak dinamik kritik üs hesabı yapılmış Blume Capel model için hesaplanan değerlerle uyumlu sonuçlar bulunmuştur.

Sonuçta, 2 ve 3 boyutlu Blume Capel modelin cellular automaton algoritmalarındaki dinamik davranışı tez çalışmasında tamamıyla ortaya konmuştur.

KAYNAKLAR

1. Onsager, L., "Crystal Statistics I.A Two dimensional model with an Order-Disorder Transition", *Phys. Rev.*, 65:117-149 (1944).
2. Privman, V., "Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems", *World Scientific*, Singapore, 225-260 (1990).
3. Huang, K., "Statistical Mechanics", *John Wiley and Sons, Inc.*: 341-398 (1987).
4. Saul D.M., Wortis M., Stauffer D., "Tricritical behavior of the Blume-Capel model", *Phys. Rev.B* 9: 4964-4980 (1974).
5. Tucker J.W., "Effective-field theory of a quenched dilute spin-1 Ising Model", *J. Magn.Mater.* :104, 191 (1992).
6. Berker A.N., Nelson R., "Superfluidity and phase separation in helium films", *Phys. Rev.B* 19, 2486 (1979).
7. Carneira C.E.I., Hanriques V.B., Salinas S.R., "Renormalisation group calculation for a spin-1 Ising Model with bilinear and biquadratic exchange interactions", *J.Phys.A*, 20: 189 (1987).
8. Bakchich A., Bouziani M.E., "Phase diagrams on the three-dimensional semi-infinite BEG model", *Phys.Rev.B* 56: 11155 (1997).
9. Aoyama Y., Chen W., Tanaka M., "Monte Carlo studies on phase transition of the two dimensional s=1 Ising Model with biquadratic interaction", *J. Phys. Soc. Jpn.*, 66:272-273 (1997).
10. Tanaka M., Kawabe T., "Spin-one Ising Model including biquadratic interaction with positive coupling constant", *J.Phys.Soc.Jpn.* 54, 2194-2203 (1985).
11. Keskin M., Solak A., "Dynamics of the spin-1 Ising Blume-Emery-Griffiths model by the path probability method", *J.Chem.Phys.* 112: 6396-6403 (2000).
12. Hoston, W, Berker, A.N., "Multicritical Phase Diagrams of the Blume-Emery-Griffiths Model with Repulsive Biquadratic Coupling", *Phys.Rev.Lett.* 67: 1027-1030 (1991).
13. Kutlu B., "The Simulation of the 2D Ferromagnetic Blume-Capel Model on a Cellular Automaton, *Int. J.of Mod.Phys.* C 12: 1401-1413(2001).
14. 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).

15. Sivardière J., Lajzerowicz J., “ Spin-1 Lattice Gas model. I. Condensation and solidification of a simple fluid”, *Phys. Rev. A* 11: 2079-2089 (1975).
16. Sivardière J., Lajzerowicz J., “Spin-1 Lattice Gas model. I. Condensation and phase separation in a binary fluid”, *Phys. Rev. A* 11: 2090-2100 (1975).
17. Sivardière J., Lajzerowicz J., “Spin-1 lattice-gas model. III. Tricritical points in binary and ternary fluids”, *Phys. Rev. A* 11: 2101-2110 (1975).
18. Newman K.E., Dow J.D., “Zinc-blende-diamond order-disorder transition in metastable crystalline (GaAs)_{1-x}Ge_{2x} alloys”, *Phys. Rev. B* 27: 7495-7508 (1983).
19. 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).
20. Wolfram, S., “Universality and Complexity in Cellular Automata”, *Physica D* 10: 1(1984).
21. Vichniac, G.Y., “Simulating Physics with Cellular Automata”, *Physica D* 10: 96-116(1984).
22. Pomeau, Y., “Invariant in Cellular Automata”, *J. Phys.A: Math. Gen.* 17: L415(1984).
23. Herrmann, H.J., “Fast Algorithm for The Simulation of Ising Model”, *J. of Stat. Phys.* 45: 145(1986).
24. Creutz, M., “Deterministic Ising Dynamics”, *Annals of Physics* 167: 62(1986).
25. Hohenberg P.C., Halperin B.I., “Theory of dynamical critical phenomena”, *Rev.Mod.Phys.*,49: 435-479 (1977).
26. Ma S.K., “Modern Theory of Critical Phenomena, Frontiers in Physics”:46, *The Benjamin/Cummings Publishing Company*, London, (1976).
27. Kamilov I.K., Murtazaev A.K., Aliev Kh. K. “Monte Carlo studies of phase transitions and critical phenomena”, *Physics-Uspekhi.* 42: 689-709(1999).
28. Rácz Z., “Nonlinear relaxation near the critical point: Molecular-Field and Scaling Theory”, *Phys.Rev.B* 13: 263 (1976).
29. Fisher M.E., Rácz Z., “Scaling theory of nonlinear critical relaxation”, *Phys. Rev.B* 13: 5039 (1976).
30. Damman B., Reger J.D., “Dynamical critical exponent of the two-dimensional Ising Model”, *Europhys.Lett.* 21: 157 (1993).

31. Poole P.H., Jan N., “Dynamical properties of the two and three dimensional Ising Models”, *J.Phys.A* 23, L453 (1990).
32. Stoll E., Binder K., Schneider T., “Monte Carlo investigation of dynamic critical phenomena in two-dimensional kinetic Ising Model”, *Phys.Rev.B*, 8:3266-3289 (1973).
33. Wansleben S., Landau D.P., “Monte Carlo investigation of critical dynamics in the three-dimensional Ising Model”, *Phys.Rev.B*. 43:6006 (1991).
34. Nightingale, M.P., Blöte, H.W.J., “Universal Ising dynamics in two dimensions“, *Physica A*, 251:211-223(1998).
35. Jain, S., “Critical dynamics of the four-state Potts model”, *J.Phys.A: Math.Gen.*, 20:607-613(1987).
36. Pearson, R. B, Richardson, J.L., Toussaint D.,”Dynamic correlations in the three-dimensional Ising model”, *Physical Review B*, 31, 7:4472-4475(1985).
37. Stauffer D., “Critical 2D and 3D Dynamics of Q2R Cellular Automata”, *Int. Mod. Phys. C* :8, 6, 1263 (1997).
38. Binder, K., Hermann, D.W., “Theoretical Foundations of the Monte Carlo Method and Its Applications in Statistical Physics, Monte Carlo Simulation in Statistical Physics”, *World Scientific*, Third Edition, 4-7 (1997).
39. 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).
40. 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).
41. Blöte H. W. J., Heringa J.R., Tyspin M.M., “Three dimensional Ising model in the fixed magnetization ensemble: A Monte Carlo study”, *Phys.Rev.E* 62 1: 77-82 (2000).
42. 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).
43. Binder, K., Landau,D.P., “Finite-size scaling at first order phase transitions”, *Phys. Rev. B* 30: 1477-1485(1984).
44. Mouritsen, O., G., “Computer Studies of Phase Transitions and Critical Phenomena”, *Springer*, Berlin, 22-26 (1984).

45. Deserno M., "Tricriticality and the Blume-Capel model: A Monte Carlo study within the microcanonical ensemble", *Phys.Rev.E* 56: 5204(1997).
46. Wilson W.G., Vause C.A., "Multilattice microcanonical simulation of the three-dimensional three-state Potts model", *Phys Rev.B* 36: 587(1987).
47. Puha I., Diep H.T., "Random-bond and random-anisotropy effects in the phase diagram of the Blume-Capel model", *J.Magn.Mater.* 224: 85-92 (2001).
48. Ota S.B., Ota S., "Microcanonical Monte Carlo imulations of the first order transition in two-dimensional Potts model", *J.Phys:Cond.Matt.*12: 2233-2243 (2000).
49. Ota S., Ota S.B., "Negative specific heat and finite-size effects at the first-order transition", *Phys.Lett.A* 285: 247250 (2001).
50. Rikvold, P.A., German, B.M., In. Annual Reviews of Comput. Phys.I, ed. Stauffer, D., (*World Scientific*, Singapore, 1994), 149-191.
51. Privman, V., "Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems", *World Scientific*, Singapore, 225-260 (1990).
52. 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).
53. Saul D.M., Wortis M., Stauffer D., "Tricritical behavior of the Blume-Capel model", *Phys. Rev.B* 9: 4964-4680 (1974).
54. Grollau S., Kierlik G., Rosinberg M.L., Tarjus G., "Thermodynamically self-consistent theory for the Blume-Capel model", *Phys.Rev.E* 63: 041111-041123 (2001).
55. Siqueira A.F., Fittipaldi I.P., "New effective-field theory for the Blume-Capel model", *Physica A* 138: 592-611 (1986).
56. Yeomans, J.M., "Statistical Mechanics of Phase Transition", *Clarendon Pres*, Oxford: 45-47 (1992).
57. Huang, K., "Statistical Mechanics", *John Wiley and Sons, Inc.*: 341-398 (1987).
58. 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).
59. Binder, K., Landau,D.P., "Finite-size scaling at first order phase transitions", *Phys. Rev. B* 30: 1477-1485(1984).

60. Chen, S., Ferrenberg, A.M., and Landau, D.P., “ Randomness-Induced Second Order Transition in the Two-Dimensional Eight-State Potts Model: A Monte Carlo Study”, *Phys. Rev.Lett.* 69: 1213-1215(1992).
61. Lee, J., Kosterlitz, M.J., “ Finite-size scaling and Monte carlo simulations of first-order phase transitions”, *Phys. Rev. B* 43: 3265-3277(1991).
62. Privman, V., Fisher, M.E., “ Finite-size Effects at First-Order Transitions”, *J. Stat. Phys.* 33: 385-417(1983).
63. Cardy, J.L., Nightingale, M.P., “ Finite-size analysis of first-order phase transitions: Discrete and continuous symmetries”, *Phys. Rev. B* 27: 4256-4260 (1983).
64. Tang S., Landau D.P., “Monte Carlo study of dynamic universality in two-dimensional Potts Model”, *Phys.Rev.B* 36: 567-573 (1987).
65. Glauber R.J., “Time-dependent statistics of Ising Model”, *J. of Math.Phys.* 4: 294-307 (1963).
66. Suzuki, M., “Static and dynamic finite-size scaling theory based on the renormalization group approach”, *Progress of theoretical physics*, 58:1142-1150(1977).
67. Aktekin N., “The finite size scaling relation for the order-parameter probability distribution of the four dimensional Ising model”, *G.Ü. J.Science.*, 17: 59-70(2004).
68. Tyspin M.M., Blöte H. W. J., “Probability distribution of the order parameter for the 3D Ising Model universality class: a high precision Monte Carlo study”, *Phys.Rev.E* ,62: 73-76(2000).
69. Tucker J.W., “ The tri-critical point in the Blume-Emery-Griffiths model”, *J.Phys: Cond. Matt.* 1: 485-489 (1989).
70. Du A., Liu H.J., Yü Y.Q., *Phys.Stat.Sol.B* 241: 175 (2004).
71. Du A., Yü Y.Q.,Liu H.J., “ Expanded Bethe-Peierls approximation fort he Blume-Capel model”, *Physica A* 320: 387-397 (2003).
72. Brankov J.G., Przystawa J., Pravecki E., *J.Phys.C* 5: 3384 (1972).
73. Grollau S. “ Phase diagram of the spin3/2 Blume-Capel model in three dimensions”, *Phys.Rev.E* 65: 056130-056135 (2002).

74. Aktekin N., “The simulation of the Ising Model on Creutz Cellular Automaton”, *Annual Reviews of Computational Physics VII*, ed. D. Stauffer (World Scientific, Singapore), 1-23., (2000).
75. Seferoğlu N., Özkan A. and Kutlu, B. “Finite Size Effect for the First-Order Phase Transition of the Three Dimensional Blume-Capel Model on a Cellular Automaton”, *Chinese Phys. Lett.* 23: 2526-2529 (2006).
76. 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).
77. Wang, Y.L., Wentworth, C., *J. Appl. Phys.* 61: 4411(1987).
78. Kutlu B., Çivi M., “Critical finite size scaling relation of the order-parameter probability distribution for the three-dimensional Ising model on the Creutz cellular automaton”, *Chin. Phys. Lett.*, 23, 10: 2670 (2006).
79. Kutlu, B. and Aktekin, N. “Critical slowing down in Ising model for Creutz algorithm”, *Physica A*, 208:423(1994).
80. Beale P. D., “Finite-size scaling study of the two dimensional Blume-Capel model”, *Phys. Rev. B* 33: 1717-1720(1986).
81. Ng.W.M., Barry J.H., “Cluster-variation method applied in the pair approximation to the $S=1$ Ising ferromagnet having additional single-ion-type uniaxial anisotropy “, *Phys. Rev. B* 17: 3675-3683 (1978).
82. Buzano C., Pelizzola A., “New topologies in the phase diagram of the semi-infinite Blume-Capel model”, *Physica A* 216: 158-168 (1995).
83. Kimel J.D., Rikvold P.A. and Wang Y.L., “Phase diagram for the antiferromagnetic Blume-Capel model near tricriticality “, *Phys. Rev. B* 45: 7237-7243 (1992).
84. Silva R., Alves N.A. and Felicio R.D., “Universality and scaling study of the critical behaviour of the two-dimensional Blume-Capel model in short-time dynamics”, *Physical Review E* 66:026130-1-026130-7 (2002).
85. Kutlu B., “İki boyutlu Ising Modelin Creutz cellular automaton ile incelenmesi”, Doktora Tezi, *Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Ankara, 44-99 (1995).
86. Ying H.P., Zhang J.B., Gu D.W. and Wang L., “Critical scaling and universality in the short-time dynamics”, *Nuc. Physics B* 83-84: 724-726 (2000).
87. Li, Z.B., Schülke L. and Zheng B., “Dynamic Monte Carlo measurement of critical exponents”, *Phys. Rev. Letter* 74: 3396-3398 (1995).

88. Korniss G., White C.J., Rikvold P.A. and Novotny M.A., "Dynamic phase transition, universality and finite-size scaling in the two-dimensional kinetic Ising model in an oscillating field", *Physical Review E* 63: 016120-1-016120-14 (2000).
89. Zheng B., "Monte Carlo simulations of critical dynamics with conserved order parameter", *Physics Letters A* 277: 257-261 (2000).
90. Sancho J.M., Miguel M.S. and Gunton J.D., "Finite size scaling theory for non-linear relaxation", *J.Phys.A.:Math.Gen.* 13: 443-447 (1980).
91. Ito N., "Non-equilibrium relaxation and interface energy of the Ising model", *Physica A* 196: 591-614 (1993).
92. Zhang W.B., Zou X.W., Liu H.Y., Jin Z.Z. and Tian D., "Short-time dynamics behaviour at the gas-liquid critical point", *Physics Letters A* 272: 408-411 (2000).
93. Arcangelis L. and Jan N., "The dynamic critical exponent of the $q=3$ and 4 state Potts model", *J.Phys.A.:Math.Gen.* 19: 1179-1183 (1986).
94. Schülke L. and Zheng B., "Monte Carlo simulation of critical dynamic spin systems", *Nuclear Physics B(Proc. Suppl.)* 53: 712-714 (1997).
95. Rácz Z. and Collins M. F., "Linear and nonlinear critical slowing down in the kinetic Ising model: High-temperature series", *Physical Rev. B* 13:3074-3080 (1976).
96. Wang F., Hatano N. And Suzuki M., "Study on dynamical critical exponents of the Ising model using the damage spreading method", ", *J.Phys.A.:Math.Gen.* 28: 4543-4552 (1995).
97. Sen P., Dasgupta S. and Stauffer D., "Dynamics of antiferromagnetic Ising model with fixed magnetization", *Eur.Phys.J. B* 1: 107-110 (1998).
98. Brower R.C., Moriarty K.J.M, Myers E., Orland P and Tamayo P., "Critical slowing down in microcanonical Ising dynamics", *Physical Review B* 38 (16): 471-473 (1988).
99. Zheng B., "Monte Carlo simulations and numerical solutions of short-time critical dynamics" *Physica A* 283: 80-85 (2000).
100. Goldschmidt Y.Y., "Dynamical relaxation in finite-size systems", *Nuclear Physics B* 285: 519-534 (1987).

101. Yalabık M. C. and Gunton J. D., "Finite size effects in the critical dynamics of the kinetic Ising model", *Progress of Theoretical Physics* 62 (6): 1573-1583 (1979).
102. Adler J. and Enting I. G., "The two dimensional spin 1 Ising system and related. models", *J. Phys. A* 17:2233-2245 (1984).
103. Binder K., Heerman D.W., "Monte Carlo simulation in statistical physics", *Springer* Verlag (1988).
104. Landau D.P. and Swendsen R.H., "Tricritical Universality in Two Dimensions", *Phys. Rev. Lett.* 46: 1437 - 1440 (1981).
105. Jaster A., Mainville J., Schülke L. and Zheng B., "Short-time critical dynamics of the three-dimensional Ising model", *J. Phys. A* 32:1395-1406 (1999).
106. Martins P.H.L. and Plascak J.A., "Probability distribution of the order parameter", *Brazilian Journal of Physics* 34 (2A): 433-437 (2004).
107. Stauffer, D., "Irreversible statistical mechanics from reversible motion: Q2R automata", *Computer Physics Communications* 127: 113-119 (2000).
108. Binder K., Vollmayr K., Deutsch H.P., Reger J, and Scheucher M., "Monte Carlo methods for first order phase transitions: Some recent progress", *Int. J. Of Mod. Phys. C* 3 (5): 1025-1058: (1992).
109. Lang W.M. and Stauffer D., "Test of three-dimensional Q2R Ising algorithm", *J. Phys. A* 20:5413-5415 (1987).
110. Baillie C. F., "Lattice spin models and new algorithms- A review of Monte Carlo computer simulations", *Int. J. Of Mod. Phys. C* 1 (1): 91-117: (1990).
111. Silva R., Alves N.A. and Felicio R.D., "Global persistence exponent of the two-dimensional Blume-Capel model", *Physical Review E* 67:057102-1-057102-4 (2003).
112. Soares S. M., Silva J. K. L., and Barreto F. C. S., "Numerical method to evaluate the dynamical critical exponent", *Physical Review B* 55 (2): 1021-1024 (1997).
113. Solak A, "İki boyutlu Spin-1 Ising Modelin cellular automaton ile benzeşimi", Doktora Tezi, *Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Ankara, 56-111 (2005).

114. Seferoğlu N., “Üç boyutlu Blume-Emery-Griffits Modelin faz geçişlerinin cellular automaton ile simülasyonu”, Doktora Tezi, **Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü**, Ankara, 38-90 (2007).
115. Özkan A., “Fcc Blume-Emery-Griffits Modelin faz uzayı üzerinde dipol kuadropol etkileşimin etkisi”, Doktora Tezi, **Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü**, Ankara, 53-113 (2007).

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı, Adı : BİNAL, Banu Ebru
 Uyruğu : T.C.
 Doğum tarihi ve yeri: 25 Temmuz 1975 Alaşehir
 Medeni hali : Evli ve 1 çocuklu
 Telefon : 0(312) 287 34 30/2323
 Faks : 297 71 85
 e-mail : banu@mta.gov.tr

Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet tarihi
Doktora	Gazi Üniversitesi/Fizik Bölümü	2008
Yüksek Lisans	Hacettepe Üniversitesi/Fizik Müh. Bölümü	2001
Lisans	Hacettepe Üniversitesi/Fizik Müh. Bölümü	1998

İş Deneyimi

Yıl	Yer	Görev
2006-	Maden Tetkik ve Arama Genel Müdürlüğü, Bilgi İşlem Koor.	Birim Yöneticisi
2001-2006	Maden Tetkik ve Arama Genel Müdürlüğü, Bilgi İşlem Koor.	Sistem Mühendisi
1998-2001	Hacettepe Üniversitesi, Mühendislik Fak. Fizik Müh. Bölümü	Araştırma Görevlisi

Yabancı Dil

İngilizce

Yayınlar

1. B.E.Özoğuz, M. Aydın and Y. Gündüç, "Dynamic Scaling for first-order Phase Transitions", Int. Journal of Mod. Phys. C, Vol.11(3) (2001) 553.
2. B Kutlu, A Özkan, N Seferoğlu, A Solak, B Binal, "The Tricritical Behavior of the 3D Blume-Capel Model on a Cellular Automaton", Int. Journal of Mod. Phys. C, Vol.16(6) (2005) 933.

Sunumlar

1. B.E.Özoğuz, Y. Gündüç, M.Aydın, "q=6 ve q=7 yönelimli Potts Modelin dinamik davranışı", 16. TFD Fizik Kongresi Adana, 1999.(Kısa konuşma)

2. B.E.Özoğuz, Y. Gündüç, M.Aydın, ,“4-boyutlu Ising Modelin dinamik davranışı”, 16. TFD Fizik Kongresi, Adana,1999.(Kısa konuşma)
3. B.E.Özoğuz, Y. Gündüç, M.Aydın, “Dynamic Scaling for first-order Phase Transitions”, 8. İstatistik Fizik Günleri, 5-6 Temmuz 2001, İTÜ, İstanbul.
4. 13. Yoğun Madde Fiziği Toplantısı, “İki ve Üç boyutlu Blume Capel modelin dinamik davranışı”, ODTÜ, 2006 (Poster)

Çalıştaylar

1. Ortadoğu Teknik Üniversitesi, Matematik Bölümü, Summer Academy ön hazırlık çalıştayı, Ankara, Mayıs 1999.
2. Erlangen University-ODTU, Summer Academy, Çeşme, Ağustos 1999.