



DÜŞÜK BOYUTLU SİSTEMLERDE MANYETİK FAZ GEÇİŞİ

Hasan ÜNLÜ

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANA BİLİM DALI**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

HAZİRAN 2019

Hasan ÜNLÜ tarafından hazırlanan “DÜŞÜK BOYUTLU SİSTEMLERDE MANYETİK FAZ GEÇİŞİ” adlı tez çalışması aşağıdaki jüri tarafından OY BİRLİĞİ ile Gazi Üniversitesi Fizik Ana Bilim Dalında YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak kabul edilmiştir.

Danışman: Prof. Dr. Bülent KUTLU

Fizik Ana Bilim Dalı, Gazi Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Yüksek Lisans Tezi olduğunu onaylıyorum.

.....

Başkan: Prof. Dr. Bora ALKAN

Fizik Mühendisliği Anabilim dalı, Ankara Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Yüksek Lisans Tezi olduğunu onaylıyorum.

.....

Üye: Prof. Dr. Mehmet KASAP

Fizik Ana Bilim Dalı, Gazi Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Yüksek Lisans Tezi olduğunu onaylıyorum.

.....

Tez Savunma Tarihi: 27/06/2019

Jüri tarafından kabul edilen bu tezin Yüksek Lisans Tezi olması için gerekli şartları yerine getirdiğini onaylıyorum.

.....

Prof. Dr. Sena YAŞYERLİ
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

ETİK BEYAN

Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Tez Yazım Kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmada;

- Tez içinde sunduğum verileri, bilgileri ve dokümanları akademik ve etik kurallar çerçevesinde elde ettiğimi,
- Tüm bilgi, belge, değerlendirme ve sonuçları bilimsel etik ve ahlak kurallarına uygun olarak sunduğumu,
- Tez çalışmada yararlandığım eserlerin tümüne uygun atıfta bulunarak kaynak gösterdiğimi,
- Kullanılan verilerde herhangi bir değişiklik yapmadığımı,
- Bu tezde sunduğum çalışmanın özgün olduğunu,

bildirir, aksi bir durumda aleyhime doğabilecek tüm hak kayıplarını kabullendiğimi beyan ederim.

Hasan ÜNLÜ

27/06/2019

DÜŞÜK BOYUTLU SİSTEMLERDE MANYETİK FAZ GEÇİŞİ
(Yüksek Lisans Tezi)

Hasan ÜNLÜ

GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Haziran 2019

ÖZET

Bu çalışmada nano yüzeylerin manyetik davranışı spin-1/2 Ising model için Creutz Cellular Automaton algoritması kullanılarak incelenmiştir. Bu amaçla periyodik sınır şartı ve serbest kenar sınır şartları için ayrı ayrı, $L=16, 32, 64, 128, 256, 512$ kenar uzunluklarına sahip kare örgülerde termodinamik niceliklerin sıcaklıkla değişimleri oluşturuldu. Simulasyon sonucu yapılan hesaplamalar kenar uzunluğu $L \leq 32$ olan serbest kenar sınır şartına sahip kare örgülerin nano yüzey davranışı sergilediğini göstermiştir.

Bilim Kodu : 20208
Anahtar Kelimeler : Ising Modeli, Faz Geçişleri, CCA, Serbest Kenar
Sayfa Adedi : 41
Danışman : Prof. Dr. Bülent KUTLU

MAGNETIC PHASE TRANSITIONS ON THE LOW DIMENSIONAL SYSTEMS
(M. Sc. Thesis)

Hasan ÜNLÜ

GAZİ UNIVERSITY
GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCES
June 2019

ABSTRACT

In this study, the magnetic behavior of nano surfaces were investigated by using the Creutz Cellular Automaton (CCA) algorithm for spin-1/2 Ising model. For this purpose, the changes in the thermodynamic quantities with temperature in square lattices (side lengths: $L = 16, 32, 64, 128, 256, 512$), were formed for both periodic and free edge boundary conditions separately by using CCA algorithm. Simulation results showed that square lattices, which have side lengths $L \leq 32$ with free edge boundary conditions exhibit nano-surface behavior.

Science Code : 20208

Key Words : Ising Model, Phase Transitions, CCA, Free Edges

Page Number : 41

Supervisor : Prof. Dr. Bülent KUTLU

TEŞEKKÜR

Tez süresince ve öncesinde, yardım ve yönlendirmelerini esirgemeyen, her soruma sabırla cevap veren sayın Prof. Dr. Bülent KUTLU'ya; Cellular Automaton hakkındaki bilgilerini benimle paylaşan saygıdeğer Sayın Doç. Dr. Aycan ÖZKAN'a, bilgisayarım ile ilgili yaşadığım teknik sıkıntılarımı çözüme kavuşturan Sayın Doç. Dr. Mustafa Kemal ÖZTÜRK'e ve tüm çalışmam boyunca beni motive eden ve her an yanında olan hayatımın kadını güzel meleğime sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET	iv
ABSTRACT.....	v
TEŞEKKÜR.....	vi
İÇİNDEKİLER	vii
ŞEKİLLERİN LİSTESİ.....	ix
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	xi
1. GİRİŞ.....	1
2. TEORİ	3
2.1. Ising Model.....	3
2.2. Sonlu Örgü Ölçekleme Teorisi.....	6
2.2.1 Boyut analizi	6
2.2.2 Termodinamik nicelikler için sonlu örgü ölçekleme bağıntıları.....	8
2.3. Periyodik Sınır Koşulu	10
2.4. Serbest Kenar Sınır Koşulu	10
3. MODEL	13
3.1. Cellular Automaton	13
3.2. Creutz Cellular Automaton.....	14
3.2.1 Isıtma algoritması	15
3.3 Creutz Cellular Automaton’da Termodinamik Niceliklerin Hesabı.....	16
4. SONUÇ VE ÖNERİLER	19
4.1. Kare Örgülerde Termodinamik Niceliklerin Periyodik Sınır Şartı İçin Sıcaklıkla Değişimleri.....	19
4.2. Kare Örgülerde Termodinamik Niceliklerin Serbest Kenar Sınır Şartı İçin Sıcaklıkla Değişimleri.....	25
5. TARTIŞMA	35

Sayfa

KAYNAKLAR	37
ÖZGEÇMİŞ	41

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.1. Basit ferromanyetik spin düzeni.....	3
Şekil 2.2. Manyetizasyonun sıcaklıkla değişimi.....	4
Şekil 2.3. Kare örgüde en yakın komşuluklar.....	5
Şekil 2.4. İki boyutlu Ising Model için sınır şartlarının uygulaması: (solda) periyodik sınır şartı; (sağda) serbest kenar sınır şartı	11
Şekil 3.1. Cellular Automaton ısıtma algoritması akış şeması	16
Şekil 4.1. Periyodik sınır şartına sahip kare örgülerde manyetizasyonun sıcaklığa bağlı değişimi	20
Şekil 4.2. Periyodik sınır şartına sahip kare örgülerde manyetik alınganlığın sıcaklığa göre değişimi	20
Şekil 4.3. Periyodik sınır şartına sahip kare örgülerde özısının sıcaklığa göre değişimi	21
Şekil 4.4. Periyodik sınır şartına sahip kare örgülerde iç enerjinin sıcaklığa göre değişimi	21
Şekil 4.5. Periyodik sınır şartına sahip kare örgülerde g_L nin sıcaklığa göre değişimi	22
Şekil 4.6. Periyodik sınır şartına sahip kare örgülerde g_L nin $\epsilon L1/v$ göre değişimi ...	23
Şekil 4.7. Periyodik sınır şartına sahip kare örgülerde manyetizasyon için sonlu örgü ölçekleme grafiği	24
Şekil 4.8. Periyodik sınır şartına sahip kare örgülerde manyetik alınganlık için sonlu örgü ölçekleme grafiği.....	24
Şekil 4.9. Serbest kenar sınır şartına sahip kare örgülerde manyetizasyonun sıcaklığa bağlı değişimi	26
Şekil 4.10. Serbest kenar sınır şartına sahip kare örgülerde manyetik alınganlığın sıcaklığa göre değişimi	26
Şekil 4.11. Serbest kenar sınır şartına sahip kare örgülerde özısının sıcaklığa göre değişimi	27
Şekil 4.12. Serbest kenar sınır şartına sahip kare örgülerde iç enerjinin sıcaklığa göre değişimi	27
Şekil 4.13. Serbest kenar sınır şartına sahip kare örgülerde g_L nin sıcaklığa göre değişimi	28

Şekil	Sayfa
Şekil 4.14. Serbest sınır şartına sahip kare örgülerde g_L nin $\varepsilon L^{1/v}$ göre değişimi	29
Şekil 4.15. Serbest kenar sınır şartına sahip kare örgülerde manyetizasyon için sonlu örgü ölçekleme grafiği.....	29
Şekil 4.16. Serbest kenar sınır şartına sahip kare örgülerde manyetik alınganlık için sonlu örgü ölçekleme grafiği	30
Şekil 4.17. Periyodik sınır şartı ve serbest sınır şartları için $L=32$ kenar uzunluklarına sahip örgülerin manyetizasyonlarının sıcaklığa göre değişimleri.....	31
Şekil 4.18. Periyodik sınır şartı ve serbest sınır şartları için $L=32$ kenar uzunluklarına sahip örgülerin manyetik alınganlıklarının sıcaklığa göre değişimleri.....	31
Şekil 4.19. Periyodik sınır şartı ve serbest sınır şartları için $L=32$ kenar uzunluklarına sahip örgülerin öz ısılarının sıcaklığa göre değişimleri	32
Şekil 4.20. Periyodik sınır şartı ve serbest sınır şartları için $L=512$ kenar uzunluklarına sahip kare örgülerde manyetizasyonun sıcaklığa göre değişimleri	32
Şekil 4.21. Periyodik sınır şartı ve serbest sınır şartları için $L=512$ kenar uzunluklarına sahip örgülerin manyetik alınganlıklarının sıcaklığa göre değişimleri.....	33
Şekil 4.22. Periyodik sınır şartı ve serbest sınır şartları için $L=512$ kenar uzunluklarına sahip örgülerin öz ısılarının sıcaklığa göre değişimleri	33

SİMGELER VE KISALTMALAR

Bu çalışmada kullanılmış simgeler ve kısaltmalar, açıklamaları ile birlikte aşağıda sunulmuştur.

Simgeler	Açıklamalar
∞	Sonsuz
C	ÖZİSİ
d	Uzay boyutu
J	Bilineer etkileşim enerji sabiti
k_b	Boltzmann sabiti
L	Kenar uzunluğu
M	Manyetizasyon
T	Sıcaklık
T_c	Kritik sıcaklık
Z_I	Bölüşüm fonksiyonu
α	ÖZİSİ kritik üssü
β	Manyetizasyon kritik üssü
γ	Manyetik alınganlık kritik üssü
ε	İndirgenmiş sıcaklık
ν	Korelasyon uzunluğu üssü
ξ	Korelasyon uzunluğu
χ	Manyetik alınganlık
Kısaltmalar	Açıklamalar
CCA	Creutz Cellular Automaton

1. GİRİŞ

Varoluşundan beri doğadaki hayatta kalma mücadelesinde insanoğlunun en önemli aracı aklı ve zekâsı olmuştur. Fiziksel eksikliklerini aletler yaparak gidermiş ve yaşamını devam ettirmek için yaptığı aletleri en etkin şekilde kullanarak gezegen üzerindeki en baskın tür olmayı başarmıştır. Kendi içinde de sürekli bir çatışma ve rekabet halinde olan insanoğlu ihtiyaçları doğrultusunda her geçen gün yeni aletler icat ederek konforunu ve güvenliğini en üst düzeye taşımaya çalışmıştır. Teknoloji ilerledikçe alet ve cihazların en az yer kaplayacak ve en hafif olacak şekilde küçültülmesinin önemini fark ederek bu doğrultuda çalışmalarını hızlandırmıştır. Elektronikteki ilerlemeler sonucunda ise özellikle haberleşme ve bilgisayar endüstrisinde elektronik ve optoelektronik devre elemanlarının küçültülmesinin gerekliliğinin farkına vararak nanometre boyutunda düşük boyutlu yapılar üretmiştir. Düşük boyutlu yapıların fiziksel davranışlarının anlaşılması için yapılan çalışmalar sonucunda, yapısal, elektronik ve manyetik özelliklerle ilgili yeni fiziksel durumlarla karşılaşmıştır. Bu tarz yapıların endüstriyel alanda etkin ve verimli bir şekilde kullanılabilmesi için manyetik özelliklerinin iyi bilinmesi gerekir.

Düşük boyutlu malzemelerde manyetizasyonun sıcaklığa bağlı değişiminde ortaya çıkan faz geçişlerinin doğası, manyetik yapı hakkında önemli bilgiler verir. Manyetik faz geçişleri, maddenin kararlı bir yapıdan, sıcaklıktaki değişim sebebiyle belirli bir sıcaklıkta başka bir kararlı yapıya dönüşümüdür. Faz geçişinin en iyi bilinen örneği günlük hayatta karşılaşılan suyun faz değiştirmesi olayıdır. Ancak diğer maddelerin de faz değiştirmeleri oldukça önemlidir. Örneğin ferromanyetik (Fe, Co, Ni gibi) maddeler Curie sıcaklığı olarak bilinen kritik bir sıcaklık değerinin (T_c) altında mıknatıslanma gösterirken, Curie sıcaklığının üstünde mıknatıslanma kaybolur. Curie noktası maddenin ferromanyetik durumundan paramanyetik durumuna geçerek manyetik fazını değiştirdiği sıcaklıktır. Faz geçişleri yoğun madde fiziğinin temel araştırma alanlarından birisidir. Sıvıdan gaza, normal iletkenlikten süper iletkenliğe veya paramanyetik fazdan ferromanyetik faza geçişler için en yaygın örneklerdir [1].

Manyetik yapılarda boyutlar küçüldüğünde ise ilginç fiziksel durumlar gözlenir. Mesela bir mikrometrenin altındaki boyutlarla tanımlanan manyetik nanoyapılar buna örnekler. Çünkü yapısal uzunluk ölçekleri fiziksel uzunluk ölçeklerine büyük ölçüde müdahale eder ve ilgi çekici yeni etkilere neden olur [2, 3] .

Ayrıca Manyetik sistemin boyutu, numunenin anizotropisine ve geometrisine [4] bağı olarak yaklaşık 5 ila 100 nm ile karşılaştırılabilir bir duruma geldiğinde manyetik domainler oluşmaz, çünkü değişim enerjisinin artması artık manyetostatik enerji azalması ile telafi edilemez manyetik ters çevirme daha sonra mıknatıslanmanın koherent dönüşü tarafından etkilenir [3]. Bu tür etkiler bilimsel olarak ilginçtir ve teknolojiye birçok etkisi vardır [5].

Yoğun madde fiziği çalışmalarında ise sonlu boyutlu etkiler büyük ilgi çekmiştir. Sonlu boyutlu etkiler ayrıca nano ölçekli malzemelerin yeni şekillerle üretilmesine olanak tanıyan ince işleme teknolojilerindeki son gelişmelerden dolayı pratikte de ilgi çekmektedirler [6-8]. Kesin çözümler, sonlu ölçeklendirme şeklinin belirlenmesinde kilit bir rol oynamaktadır. Ferdinand ve Fisher [9], Onsager'in de kesin çözümünü genişleten [10] iki boyutlu (2B) Ising modelinde sonlu boyutlu bir örgü üzerine yaptıkları çalışmayla öncülük ettiler ve bu çalışmalar sonlu ölçeklendirme fikirlerini teşvik etti. O zamandan beri, çeşitli sınırlara sahip sonlu büyüklükteki örgülerde modelin kesin sonuçları yoğun bir şekilde çalışılmıştır [9-17]. Torus durumu [13-14], sarmal sınır koşulu [15], Brascamp-Kunz sınır koşulu [16,17] ve sonsuz uzun bir silindir için [18] detaylı bilgi edinilmiştir. Bununla birlikte, iki boyutlu Ising modelinde serbest sınırları olan bir dikdörtgenin kesin sonucuna hala ulaşamamıştır.

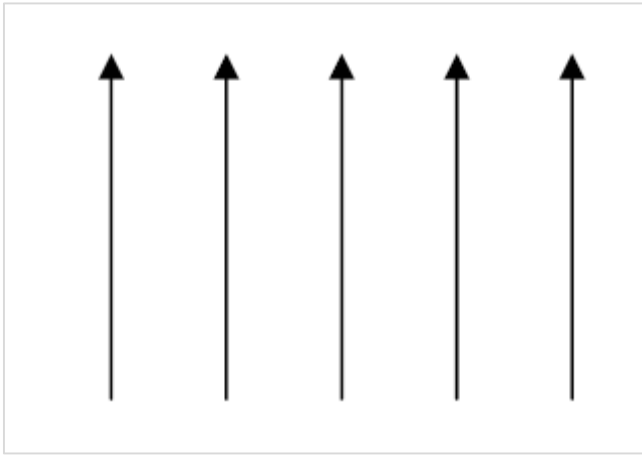
Çalışmamızda iki boyutlu sistemlerden bir boyutlu sistemlere geçilirken sıcaklığa bağlı manyetik faz geçişleri periyodik ve serbest sınır şartları kullanılarak incelenmiş düşük boyutlu maddelerin sıcaklığa bağlı manyetik davranışları hakkında bilgi edinmek hedeflenmiştir.

Bu tezdeki nicelikler $L = 16, 32, 64, 128, 256$ ve 512 kare örgülerde Creutz Cellular Automaton ısıtma algoritması ile kritik sıcaklıklar civarındaki sıcaklıklar için 1000000 zaman adımı üzerinden ortalama alınarak hesaplanmıştır. Hesaplamalarda periyodik sınır şartı ve serbest kenar sınır şartı ayrı ayrı kullanılarak veriler alınmıştır.

2. TEORİ

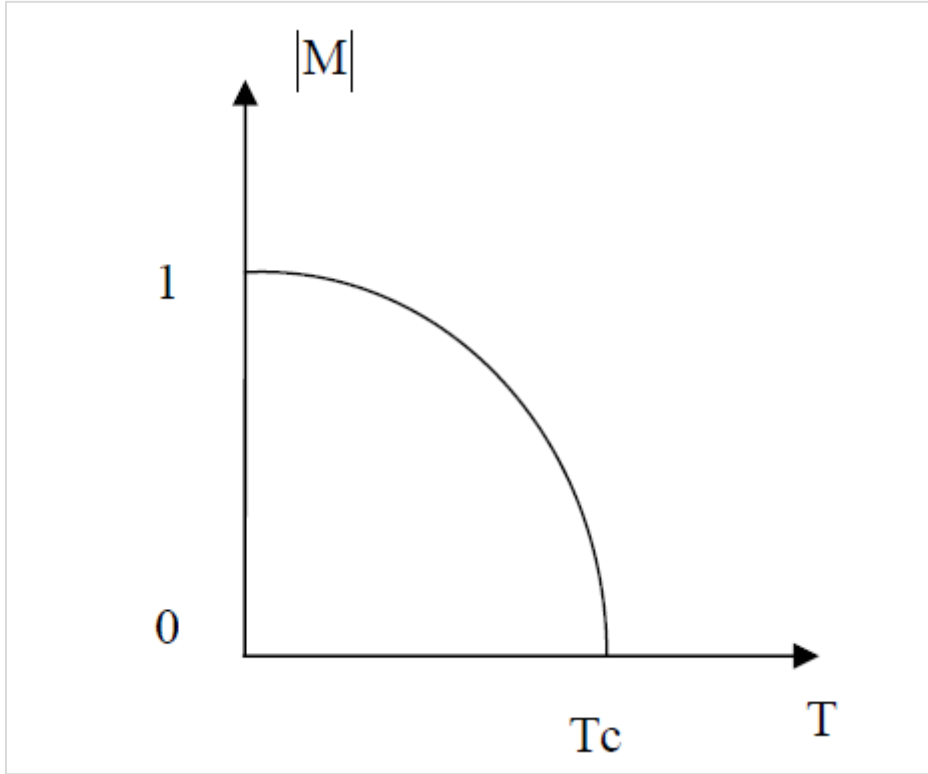
2.1. Ising Model

Ising yapmış olduđu model spinler arası etkileşmeleri içeren ferromanyetik maddelerin gösterdiği termodinamik davranışların anlaşılmasını sağlayan bir modeldir. Ferromanyetik materyal Ising model ile modellenmektedir. Ferromanyetik madde kendiliğinden mıknatıslanma oluşturacak şekilde düzenlenmiş spinler setidir (Şekil 2.1).



Şekil 2.1. Basit ferromanyetik spin düzeni

Ferromanyetik metallerde (demir, nikel, kobalt gibi) dış manyetik alanın yokluğunda bile kritik sıcaklık (T_c)'tan düşük sıcaklıklarda kendiliğinden mıknatıslanma oluşmaktadır. Kendiliğinden mıknatıslanma kritik sıcaklığa yaklaşıldıkça sıfıra gitmektedir. (Şekil 2.2). Kritik sıcaklığa her iki taraftan yaklaşıldığında ferromanyetik meteryalin özısı ve manyetik alınganlığı ıraksamaktadır.

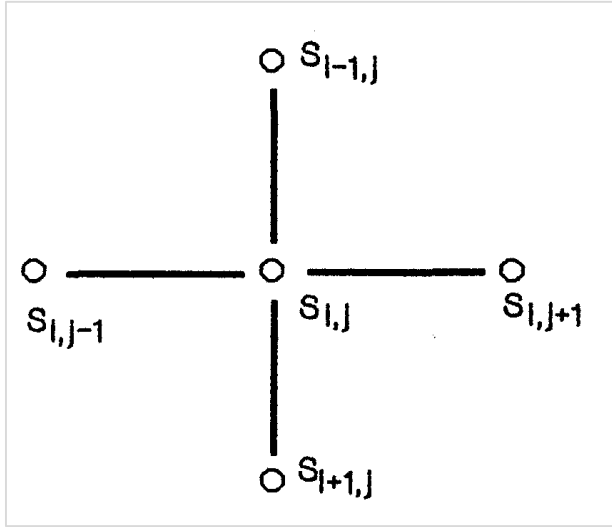


Şekil 2.2. Manyetizasyonun sıcaklıkla değişimi

Ising modelde incelenen sistem, örgü konumları adı verilen N tane sabit noktadan oluşan n -boyutlu periyodik bir örgü olup, geometrik yapısı iki boyutta kare, dikdörtgen veya üçgen, üç boyutta kübik veya hegzagonal, dört boyutta ise basit hiperkübik olabilir. Örgüdeki her bir konumuna, $+1$ veya -1 değerlerinden birisini alabilen S_i ($i=1, 2, \dots, N$) spin değişkeni atanmıştır. Sistemde bundan başka değişken yoktur. Eğer $S_i = +1$ ise i . konumun spin yukarı durumda olduğu ve $S_i = -1$ ise spin aşağı durumda olduğu söylenir. Verilen bir $\{S_i\}$ kümesi bütün sistemin konfigürasyonunu belirtmekte ve $\{S_i\}$ ile belirtilen konfigürasyonuna sahip olan bir sistemin enerjisi aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır.

$$E_1 = -\sum_{ij} J_{ij} S_i S_j - H \sum_{i=1}^N S_i \quad (2.1)$$

Burada E_1 Ising enerjisi, $\langle ij \rangle$ en yakın komşu spin çiftleri üzerinden toplamı göstermektedir. J_{ij} (en yakın komşu etkileşme sabiti) ve H dış manyetik alan sabit olarak verilmektedir. İki boyutta kare örgü için Şekil 2.3' de görüldüğü gibi bir spin dört en yakın komşu spine sahiptir. $\langle ij \rangle$ üzerinden toplam $2N$ terim ihtiva etmektedir. J_{ij} etkileşme enerjisi ve H dış manyetik alan sabit olarak verilmektedir.



Şekil 2.3. Kare örgüde en yakın komşuluklar

İzotropik etkileşmelerin olduğu durumlarda $J_{ij}=J$ alınmakta ve $J>0$ olduğu durum ferromanyetizmaya, $J<0$ olduğu durum ise antiferromanyetizmaya karşılık gelmektedir. Ising modelde bütün termodinamik fonksiyonlar mümkün olan E_I enerjili konfigürasyonlar üzerinden hesaplanmaktadır. $\{S_i\}$ spin kümesi mikrokanoik topluluk kavramına uymaktadır, ancak analitik çalışmalarında kanonik topluluk kullanılmaktadır. E_I enerjili sistemin dağılım fonksiyonu aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır:

$$Z_I(H,T) = \sum_{S_i} \exp[-E(S_i)/kT] \quad (i=1,2,3,\dots) \quad (2.2)$$

Burada k Boltzmann sabitidir ve değeri $k = \frac{1}{\beta T}$ 'dir. Z_I kanonik topluluk için tanımlanan ağırlık fonksiyonu aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$Z_I(H,T) = \sum_{E_1} \sum_{E_2} \dots \sum_{E_N} e^{-\beta E_I(S_i)} \quad (2.3)$$

Burada her bir S_i spin değişkeni bağımsız olarak ± 1 değerleri alabildiğinden, 2.4 teki toplam 2^N terimden oluşmaktadır. Termodinamik nicelikler genellikle spin başına serbest enerjiden elde edilmektedir. Serbest enerji aşağıdaki gibi tanımlanmıştır:

$$f(H,T) = -kTN^{-1} \log Z_I(H,T) \quad (2.4)$$

Bu serbest enerjiye bağılı olarak spin başına termodinamik nicelikler aşağıdaki şekilde tanımlanmaktadır:

$$U_1(H,T) = -kT^2 \frac{\partial}{\partial H} \left(\frac{f}{kT} \right) \quad (2.5)$$

$$C_1(H,T) = \frac{\partial U_1}{\partial T} \quad (2.6)$$

$$M(H,T) = -\frac{\partial}{\partial H} \left(\frac{f}{kT} \right) \quad (2.7)$$

$$\chi(H,T) = \frac{\partial M}{\partial H} \quad (2.8)$$

Burada U_1 iç enerjiyi, C_1 özısıyı, M düzen parametresini ve χ manyetik alınganlığı göstermektedir. Dış manyetik alan $H=0$ olduğu durumda $M(0,T)$ kendiliğinden mıknatıslanma veya düzen parametresi olarak adlandırılır. Ferromanyetik bir sistemde $M(0,T)$ sıfırdan farklıdır. $\varepsilon = \frac{T-T_c}{T_c}$ olmak üzere termodinamik niceliklerin $M \sim \varepsilon^\beta$, $kT\chi \sim \varepsilon^\gamma$ ve $C \sim \varepsilon^{-\alpha} + b$ kuvvet kanunlarına göre sıcaklıkla değişimi beklenmektedir[19].

2.2. Sonlu Örgü Ölçekleme Teorisi

Adından da anlaşılacağı gibi, ölçeklendirme hipotezinin, çeşitli ölçeklerin uzunluk ölçeği değişikliği altında nasıl değiştiği ile ilgisi vardır. Boyutlu bir niceliğin değeri uzunluk ölçeğinin standart birimleri cinsinden ifade edilir ve standart birim değişirse o da değişir. Böylelikle boyutlu birimler boyutlarına uygun bir şekilde değişirken boyutsuz bir nicelik değişmez kalacaktır. Termodinamik fonksiyonlarla ilgili önemli ölçeklendirme yasaları basit (ama güçlü) bir şekilde kritik sıcaklık yakınında korelasyon uzunluğu ξ 'nin, diğer tüm uzunlukları ölçülmesi gereken sistemin tek karakteristik uzunluğu olduğu varsayımından türetilebilir [20].

2.2.1. Boyut analizi

Ölçekleme teorisini oluşturmanın yollarından birisi kritik sıcaklık civarında boyut niceliğinin ξ^{-d} ile orantılı olduğunu kabul ederek termodinamik niceliklerin boyutlarını ξ 'a

bağlı olarak tanımlamaktır. F/kT boyutsuz serbest enerji olmak üzere $f=F/kTV$ (uzunluk)^{-d} boyutunda olur.

$$[f]=L^{-d} \quad (2.9)$$

Kritik noktada korelasyon fonksiyonunun boyutu tanımı gereği aşağıdaki gibi verilmektedir.

$$[g(x)]=L^{2-d-\eta} \quad (2.10)$$

Tanımdan dolayı korelasyon fonksiyonu ile $\langle M(0) \rangle^2$ değerlerinin boyutları aynıdır. Buradan hareketle kendiliğinden mıknatıslanma aşağıdaki gibi verilir.

$$[M/V]=L^{(2-d-\eta)/2} \quad (2.11)$$

Manyetik alınganlığın boyutu

$$[kT\chi]=L^{2-\eta} \quad (2.12)$$

şeklinde verilir.

Yukarıdaki ifadelerdeki L uzunluğu yerine ξ korelasyon uzunluğu konulup, korelasyon uzunluğu için $\xi \sim \epsilon^{-\nu}$ bağıntısı kullanılırsa tüm kritik üsleri tanımlamak mümkün olur. Örnek olarak serbest enerji için $f \sim \xi^{-d} \sim \epsilon^{\nu d}$ ilişkisi kullanılarak özısıya bakılacak olursa,

$$C = -T \frac{\partial^2 f}{\partial T^2} \quad (2.13)$$

Özısının kritik sıcaklık civarındaki davranışı aşağıda verilen kuvvet kanununa uyar.

$$C \sim \epsilon^{\nu d - 2} \quad (2.14)$$

Burada α özısı kritik üssüdür.

Kritik üsler arasındaki ilişkiler aşağıdaki eşitliklerle verilmektedir [19,20].

$$\alpha = 2 - \nu d \quad (2.15)$$

$$\gamma = \nu(2 - \eta) \quad (2.16)$$

$$\beta = -\nu(2 - d - \eta)/2 \quad (2.17)$$

$$\partial\beta = \nu(2 + d - \eta)/2 \quad (2.18)$$

Bu ifadeler yardımı ile kritik üs değerlerini birbirleri cinsinden hesaplamak mümkündür.

2.2.2 Termodinamik nicelikler için sonlu örgü ölçekleme bağıntıları

Kritik sıcaklık T_c civarında termodinamik niceliklerin davranışı aşağıda tanımlanmış olan indirgenmiş sıcaklık ε 'a bağlı olarak incelenmektedir

$$\varepsilon = \frac{T - T_c}{T_c} \quad (2.19)$$

Daha önce belirtildiği üzere ölçekleme teorisi, korelasyon uzunluğunun $\varepsilon=0$ komşuluğundaki bir sistem için tek karakteristik uzunluk olduğunu kabul etmektedir. Korelasyon uzunluğu deneysel olarak $\varepsilon=0$ değerinde yani kritik sıcaklıkta ıraksamaktadır. Bu sonuca göre sistemin kritik sıcaklıkta karakteristik bir uzunluğa sahip olmadığı ve korelasyon uzunluğunun ölçekleme dönüşümü altında değişmez olduğu görülür. Öte yandan sistemin kendisi orijinal sistem kadar büyütüldüğünde orijinal sistem ile büyütülmüş sistem arasında bir fark görülüyorsa sistem ölçek dönüşümü altında değişmezdir. Daha kesin olarak termodinamik fonksiyonların, $\varepsilon=0$ 'da korelasyon fonksiyonuna benzer olarak, homojen fonksiyonlar oldukları “ölçek değişmez” bir sistem tanımlamak mümkündür.

İki boyutlu ($L \times L$) kare örgü için sonlu örgü ölçekleme teorisi için serbest enerji fonksiyonu aşağıdaki ifade ile verilmektedir [19,20].

$$f(h, \varepsilon) = L^{(\alpha-2)/\nu} f(L^{\delta\beta/\nu} h, L^{1/\nu} \varepsilon) \quad (2.20)$$

İndirgenmiş sıcaklık ε 'nın

$$\varepsilon = \frac{T - T_c(\infty)}{T_c(\infty)} \quad (2.21)$$

Olduğu hatırlanırsa sonsuz ve sonlu örgünün kritik sıcaklıkları arasındaki fark,

$$\square \varepsilon = \frac{T_c(\infty) - T_c(L)}{T_c(\infty)} \propto aL^{-1} \quad L \rightarrow \infty \quad (2.22)$$

Olarak tanımlanmaktadır. Ölçekleme bağıntısındaki L örgünün kenar uzunluğu, kritik üsler ise sonsuz örgü için kritik üslerdir. Diğer tüm termodinamik nicelikler için sonlu örgü ölçekleme bağıntıları, serbest enerji için verilen sonlu örgü ölçekleme bağıntısından elde edilebilir. Dış manyetik alanın varlığında kendiliğinden mıknatıslanma için sonlu örgü ölçekleme bağıntısı

$$M(h, \varepsilon) = L^{-\beta/v} X^o(L^{\delta\beta/v} h, L^{1/v} \varepsilon) \quad (2.23)$$

şeklinde verilmektedir[19,20]. Bu ifade dış manyetik alanın olmadığı ($h=0$) durumunda,

$$M = L^{-\beta/v} X^o(L^{1/v} \varepsilon) \quad (2.24)$$

ifadesine indirgenmektedir. Öte yandan manyetik alınganlık ve öz ısı için sonlu örgü ölçekleme bağıntıları

$$kT\chi = L^{\gamma/v} Y^o(L^{1/v} \varepsilon) \quad (2.25)$$

$$C = L^{\alpha/v} Z^o(L^{1/v} \varepsilon) \quad (2.26)$$

$$g(r, \varepsilon) = L^{-2\beta/v} G^o(L^{-1} r, L^{1/v} \varepsilon) \quad (2.27)$$

eşitlikleri ile verilmektedir. Burada β , γ , α ve v sonsuz örgü için mıknatıslanma, manyetik alınganlık, özısı ve korelasyon uzunluğu için statik kritik üslerdir. Sonlu örgü teorisinin sonucu olarak buraya kadar verilmiş olan eşitlikler iki boyutlu Ising modeller için termodinamik niceliklerin sonlu örgülerdeki davranışlarından sonsuz örgü davranışlarını belirleme imkânı vermektedir. İkinci derece faz geçişleri sistemin kritik sıcaklıktaki

davranışlarını karakterize eden kritik üsler ile sınıflandırılır ve bu kritik üslerin değerleri iki boyutlu Ising model için $\alpha=0$, $\beta=0.125$, $\gamma=1.75$ ve $\nu=1$ olarak kesin olarak bilinmektedir [19,20].

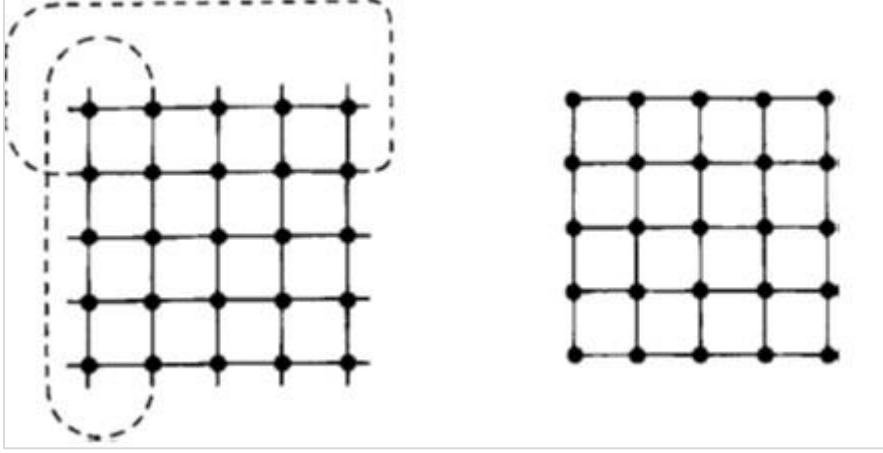
2.3. Periyodik Sınır Koşulu

Simülasyonlar sonlu sistemlerde yapıldığından, ortaya çıkan önemli bir soru, örgünün kenarlarının veya sınırlarının nasıl ele alınacağıdır. Bu sınırlar, d boyutlu örgünün $(d + 1)$ boyutlu bir torus üzerine sarılmasıyla etkili bir şekilde elimine edilebilir. Bu sınır koşulu, "periyodik sınır koşulu" olarak adlandırılır, böylece bir satırdaki ilk spin, satırdaki son spin en yakın komşu olarak görür ve tam tersi de geçerlidir. Aynı durum, bir sütunun tepesindeki ve en altındaki spinler için de geçerlidir. Şekil 2.4'te kare örgü için bu prosedür gösterilmektedir. Bu prosedür, sınır etkilerini etkili bir şekilde ortadan kaldırır, ancak korelasyon uzunluğunun maksimum değeri $L = 2$ ile sınırlandırıldığından ve sistemin sonuçta ortaya çıkan özellikleri, karşılık gelen sonsuz örgünün özelliklerinden farklı olduğundan, sistem hala sonlu örgü boyutu L ile karakterize edilir [21].

2.4. Serbest Kenar Sınır Koşulu

Bu sınır türü, bir satırın sonu ile örgü üzerindeki diğer herhangi bir satır arasında herhangi bir bağlantı içermez. Bunun yerine, bir satırın sonundaki spinler, o yönde hiçbir komşu görmez (Şekil 2.4). Bu serbest kenar sınırı sadece sonlu boyutta lekelenme sağlamakla kalmaz, aynı zamanda kenarlardaki “sarkan bağlar” nedeniyle yüzey ve köşe efektleri sunar. (Yüzeylerin yakınında çok güçlü değişiklikler meydana gelebilir ve sistemin davranışı homojen değildir.) Bazı durumlarda, yüzey ve köşe davranışı kendileri çalışma konusu haline gelir. Bazı durumlarda serbest kenar sınırları daha gerçekçi olabilir; süper paramanyetik parçacıkların veya taneciklerin davranışının modellenmesinde, ancak serbest kenar sınırları olan sistemlerin özellikleri genellikle, belirli bir periyodik sınırın kullanılmasından çok daha büyük bir miktarla karşılık gelen sonsuz sistemin özelliklerinden farklıdır. İnce filmlerin modellenmesi için, filme paralel yönlerde periyodik sınır şartı ve filmin normali yönünde ise serbest kenar sınır koşulları kullanılır. Serbest kenar sınır koşulunun bir sistemin bir fiziksel serbest yüzeyini modellediği düşünülen bu gibi durumlarda, ayrıca yüzey alanları, değiştirilmiş yüzey kat etkileşimleri vb. İçerilmesi de uygun olabilir. Bu şekilde ıslanma, arayüz lokalizasyonu-yer değiştirme geçişleri, yüzey

kaynaklı sıralama ve düzensizlik, vb. Gibi olaylar incelenebilir. Bu serbest kenar sınır koşulu, örgü dışı problemler için de çok yaygındır [22].



Şekil 2.4. İki boyutlu Ising Model için sınır şartlarının uygulaması: (solda) periyodik sınır şartı; (sağda) serbest kenar sınır şartı

3. MODEL

3.1. Cellular Automaton

Cellular Automatonlar, uzay ve zamanın ayrık olduğu ve fiziksel büyüklüklerin sonlu bir ayrık değerler kümesini aldığı fiziksel sistemlerin matematiksel idealleştirmeleridir. Bir Cellular Automaton (CA), her bir bölgesinde (hücresinde) ayrık bir değişken olan, genellikle sınırsız, düzenli muntazam bir örgüden oluşur. Cellular Automatonun durumu, her bir bölgedeki değişkenlerin değerleri ile tamamen belirtilir. Cellular Automaton, ayrık zaman adımlarında gelişir; bir bölgedeki değişken değeri, önceki zaman aşamasındaki "komşuluğundaki" bölgelerdeki değişkenlerin değerlerinden etkilenir. Bir kümenin komşuluğu tipik olarak kümenin kendisi ve hemen bitişiğindeki tüm kümeler olarak alınır. Her bir bölgedeki değişkenler, önceki zaman adımlarındaki komşuluklarındaki değişkenlerin değerlerine ve belirli bir "yerel kurallar" kümesine göre eşzamanlı olarak güncellenir [23].

Fiziksel bir sistem, Cellular Automaton ile modellenirken;

- i. Sistemin yapısına bağlı olarak, iki boyutta kare, üçgen, üç boyutta küp gibi düzenli bir örgü seçilir
- ii. Örgüyü oluşturan hücrelerin durumlarına karşılık gelen değişken veya değişkenler belirlenir.
- iii. Hücrelerin etkileşimini tanımlayan bölgesel bir kural oluşturulur [19,24].

1986 yılında Creutz, biri spinine, uzay-zaman paritesi ve spine eşlenik momentuma ikili bit olmak üzere dört değişken bulunduran deterministik bir Cellular Automaton algoritması geliştirmiştir [25].

Bu algoritma kullanılarak dış manyetik alanın yokluğunda iki, üç, dört ve daha yüksek boyutlarda en yakın komşu etkileşimler için yapılan Spin-1/2 Ising model hesaplamaları, Creutz Cellular Automaton (CCA)'ın Ising modeli simüle etmekte oldukça başarılı olduğunu göstermiştir [26-32, 33, 34].

3.2. Creutz Cellular Automaton

Her bir hücreye dört ikili “bit” karşılık getirilen bu modelde, hücre değişkenlerinin alacağı değerler o değişkenin bir önceki zaman adımındaki kendi değerleri ile en yakın komşu değerlerinden aşağıdaki kurala göre elde edilmektedir. Bu modeldeki dört ikili bittin ilki “0” veya “1” değerlerini alabilen B_i Ising spinidir. Ising spin enerjisi H_I ;

$$S_i = 2B_i - 1 \quad (3.1)$$

olmak şartıyla aşağıdaki şekilde tanımlanır.

$$H_I = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad (3.2)$$

Yukarıdaki eşitlikteki $\langle ij \rangle$ değeri bütün en yakın komşu çiftleri üzerinden toplamdır. İkinci değişken her hücredeki spine eşlik eden momentuma (demon) karşılık gelmektedir. Bu değişken 0, 1, 2 ve 3 şeklinde bir tamsayı kümesi oluşturulmakta ve momentum değişkenine karşılık gelen H_K kinetik enerji değeri bu tamsayıların dört katı değerleri alabilmektedir. Kinetik enerjinin aldığı bu değerlerle bir spin değişiminde Ising enerjide oluşan maksimum enerji değişimi karşılanabilmektedir. Toplam enerji H bu şartlar altında

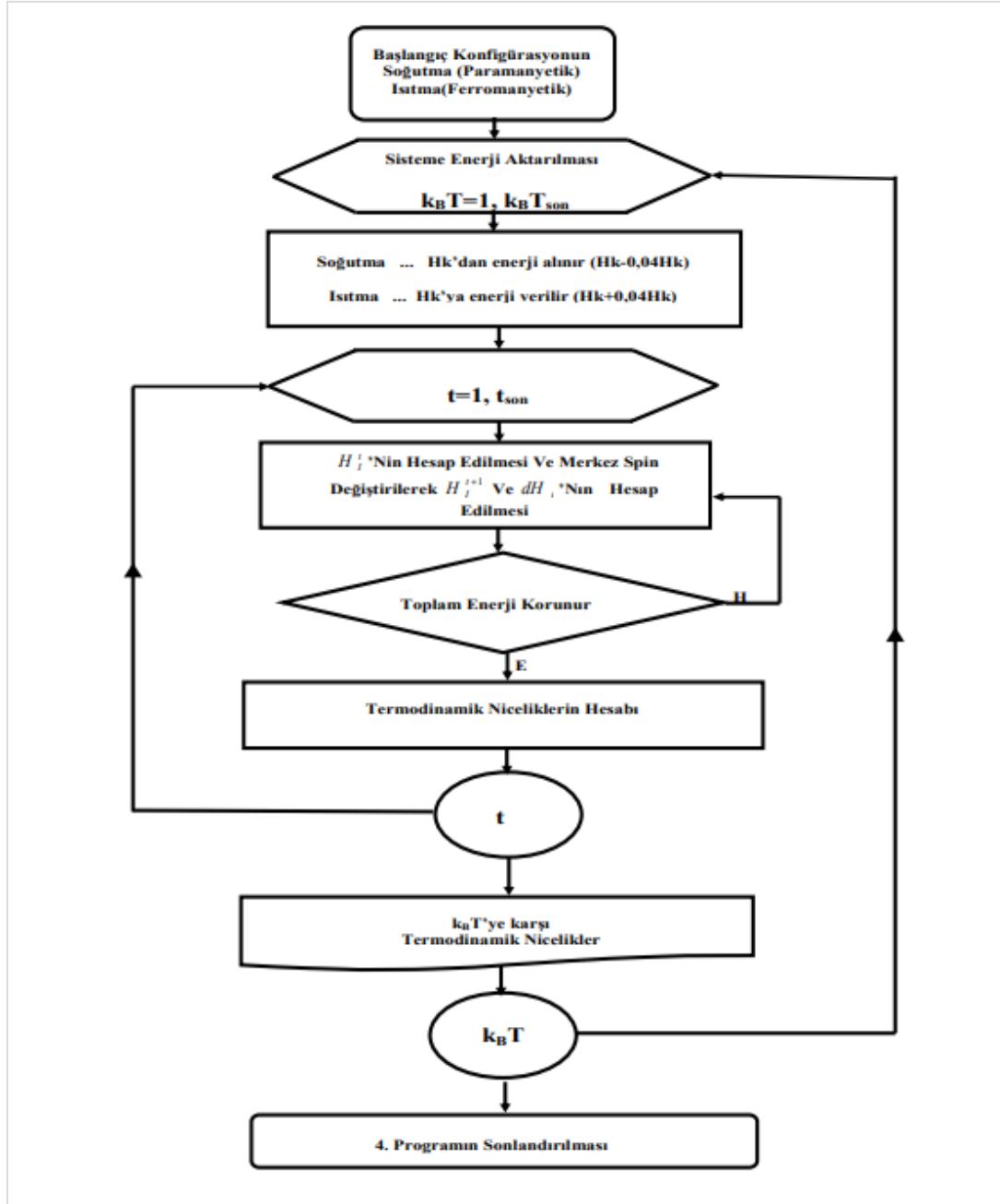
$$H = H_I + H_K \quad (3.4)$$

simülasyon boyunca korunmaktadır. Üçüncü bit ise Cellular Automaton’un gelişimini dama tahtası düzeninde sağlayan, parite “bit”dir. Bu değişken Ising modelin CA ile simülasyonunu mümkün hale getirmektedir. Bu değişkenin “1” değerleri dama tahtasının siyah “0” değerleri beyaz hücrelerine karşılık gelir

Simülasyonun gelişimi süresince paritesi 1 olan hücrelere kural uygulanarak parite değeri “0” çevrilir. Paritesi “0” olan hücrelerin ise sadece paritesi “1” ’e çevrilir. Paritesi “0” ‘a çevrilen “1” pariteli hücrelerin spin yönelimi değiştirilerek Ising enerjide oluşan dH_I değişimi hesaplanır. Kinetik enerji ve iç enerjinin toplamına karşılık gelen H , korunuyor ve sistemin iç enerjisindeki değişim bu hücreye ait momentum değişkenine aktarılabilir veya bu değişkenden alınabilir ise spin değişimi yapılır. Aksi halde spin yönü ve momentumu değiştirilmez [19].

3.2.1 Isıtma algoritması

Bu algoritma başlangıç prosedürü ve ölçümlerin alınması olmak üzere iki temel bölümden oluşmaktadır. Şekil 3.3, ısıtma algoritmasının akış şemasıdır. Başlangıç prosedüründe, önce örgü üzerindeki spinler modelin mutlak sıfırda sahip olduğu taban durumda alınır. İkinci adımda hücre başına düşen kinetik enerji, örgü noktalarının bir kısmına ikinci değişken yoluyla rastgele dağıtılır. Bu konfigürasyon 10 000 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. Isıtma işlemi boyunca spin sistemine ikinci değişken (demon) yardımıyla enerji verilir. Demon tarafından H_k kinetik enerjili hücreye verilen enerji miktarı (ısıtma hızı $\times H_k$) 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. Her bir sonuç konfigürasyonu bir sonraki adım için başlangıç konfigürasyonu olarak alınır. Taban durumun doğru seçilmesi ve sisteme aktarılacak enerjinin seçimi önemlidir [35-39].



Şekil 3.1. Cellular Automaton ısıtma algoritması akış şeması

3.3 Creutz Cellular Automaton'da Termodinamik Niceliklerin Hesabı

Bu model toplam enerjinin korunumu bakımından mikrokanoniktir. Kinetik enerji ve iç enerji ise simülasyon süresince dalgalanmakta kanonik bir davranış sergilemektedir. Sistemde $T=1/\beta$ sıcaklığında E_i kinetik enerjili konfigürasyona rastlama ihtimali Boltzmann ağırlıklı üstel bir dağılıma uymaktadır.

$$P(E_i) \sim \exp(-\beta E_i) \quad (3.5)$$

Burada $4E_i = H_k$ dır ve bu dağılıma uygun olarak kinetik enerjinin beklenen değeri aşağıdaki gibi ifade edilir:

$$\langle E_i \rangle = \left(\sum_{n=0}^3 n e^{-4n\beta} \right) / \left(\sum_{n=0}^3 e^{-4n\beta} \right) \quad (3.6)$$

Eş. 3.6 da verilen kinetik enerjinin beklenen değeri ile $T=1/\beta$ eşitliği kullanılarak sistemin sıcaklığı belirlenebilmektedir.

Her bir sıcaklık değeri için manyetizasyon (M) değeri aşağıdaki ifade kullanılarak hesaplanır.

$$M = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i \quad (3.7)$$

Manyetik alınganlık χ , iç enerji H_1 ve özısı C niceliklerinin değerlerini hesaplamak için aşağıda verilen ifadeler kullanılmaktadır.

$$H_1 = -\frac{1}{2N} \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad (3.8)$$

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} = L^2 \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{kT} \quad (3.9)$$

$$\frac{C}{k} = \frac{\partial H_1}{\partial M} = L^2 \frac{\langle H_1^2 \rangle - \langle H_1 \rangle^2}{(kT)^2} \quad (3.10)$$

(3.7) ve (3.8) eşitliklerinde $N=L \times L$ kare örgüdeki hücre sayısıdır ve $\langle \rangle$ zaman üzerinden ortalama, M ve H_1 başına ortalama değerlere karşılık gelmektedir. Bu çalışmada dış manyetik alanın sıfıra eşit olduğu durum göz önüne alınmaktadır. Bu tezde adı geçen bütün büyüklüklerin beklenen değerleri basit aritmetik ortalamalar alınarak hesaplanmıştır [24].

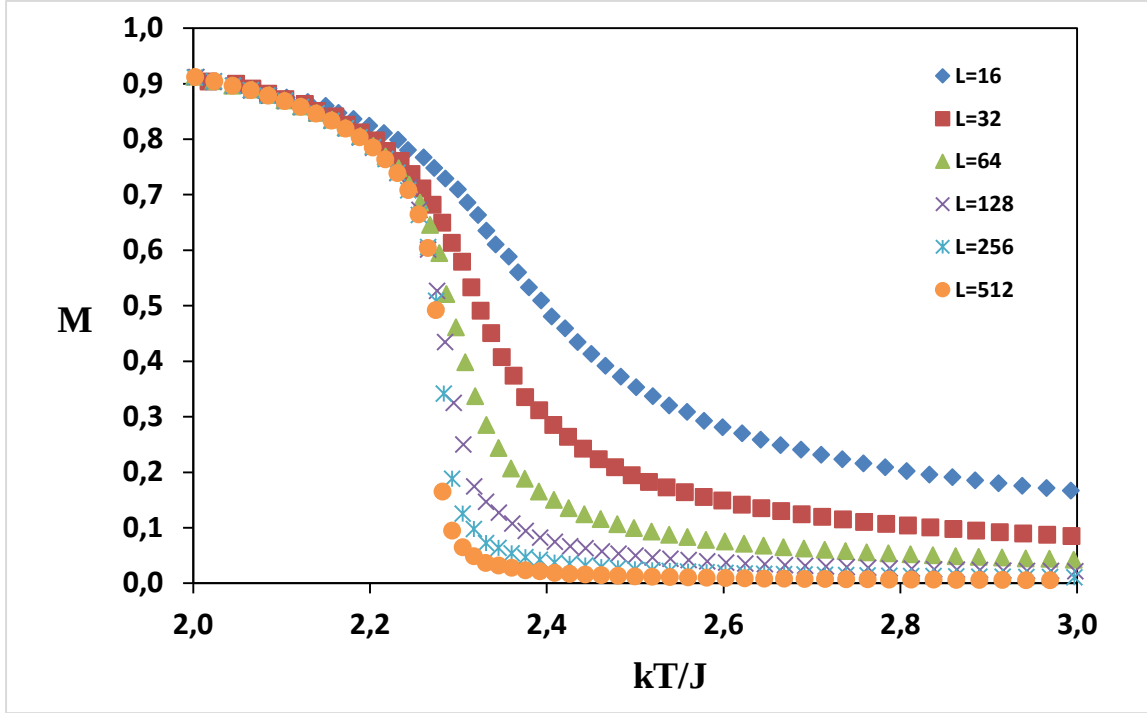
4. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu çalışmada, kare ve dikdörtgen örgülerde kritik davranışın örgü kenar uzunluğuna ve sınır şartlarına bağlı değişimini belirlemek amacı ile ilk olarak termodinamik niceliklerin sıcaklığa davranışları hesaplandı. Elde edilen sonuçlar sınır şartları için kendi içerisinde ve birbirleri ile kıyaslanarak düşük boyut davranışları belirlendi. Bilindiği gibi iki boyutlu bir spin sisteminin kritik davranışı evrensel Ising kritik davranış ile uyumlu ise, termodinamik niceliklerle ilgili kritik üslerinin $\alpha=0$, $\beta=0.125$, $\gamma=1.75$ ve $\nu=1$ değerlerine ve kritik sıcaklığın ise $kT_C/J=2,269$ değerine sahip olması gerekir

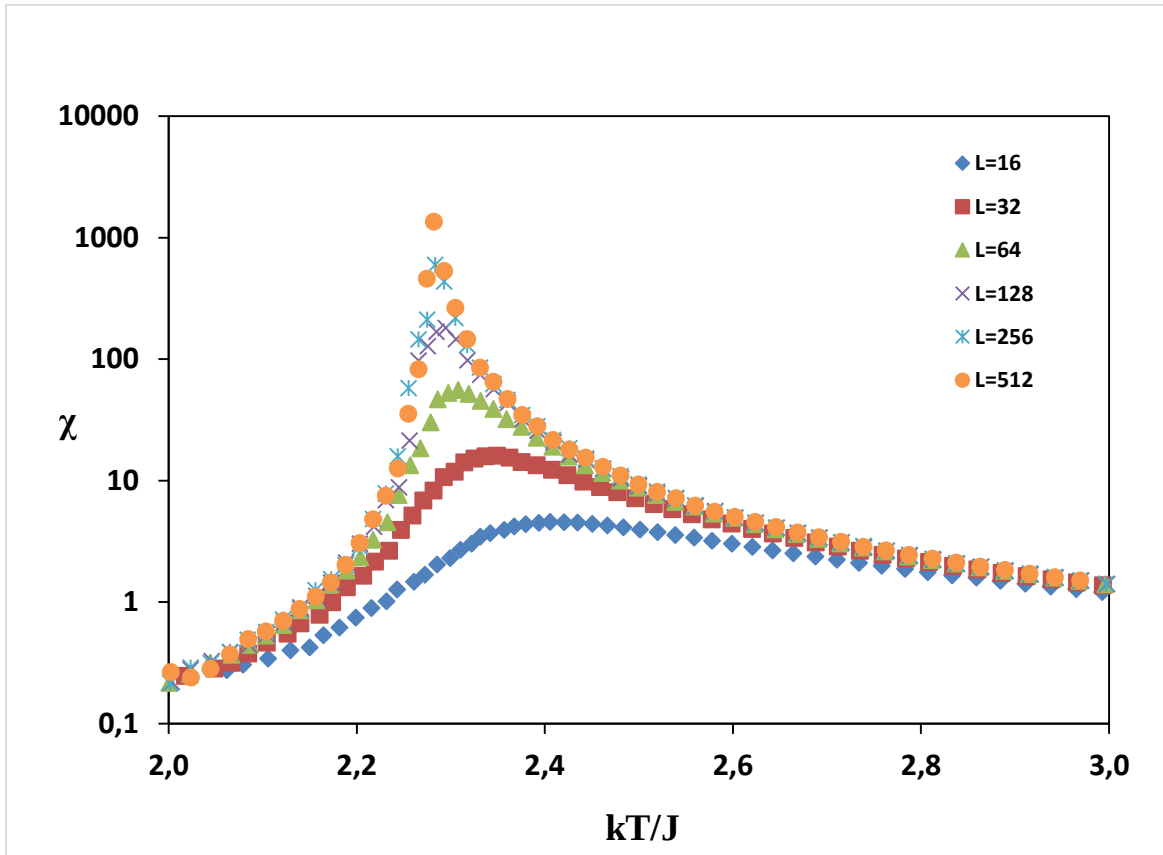
4.1. Kare Örgülerde Termodinamik Niceliklerin Periyodik Sınır Şartı İçin Sıcaklıkla Değişimleri

$L=16, 32, 64, 128, 256, 512$ kenar uzunluklarına sahip $L \times L$ kare örgüler için mıknatıslanma, manyetik alınganlık, iç enerji ve öz ısı niceliklerinin sıcaklıkla değişimleri Şekil 4.1-4.4 de periyodik sınır şartı için verildi. Bu grafikler incelendiğinde, periyodik sınır şartı için termodinamik niceliklerin sıcaklığa bağlı değişimlerinin karakteristik ikinci derece faz geçişi davranışına fonksiyonel olarak uyduğu görülmektedir.

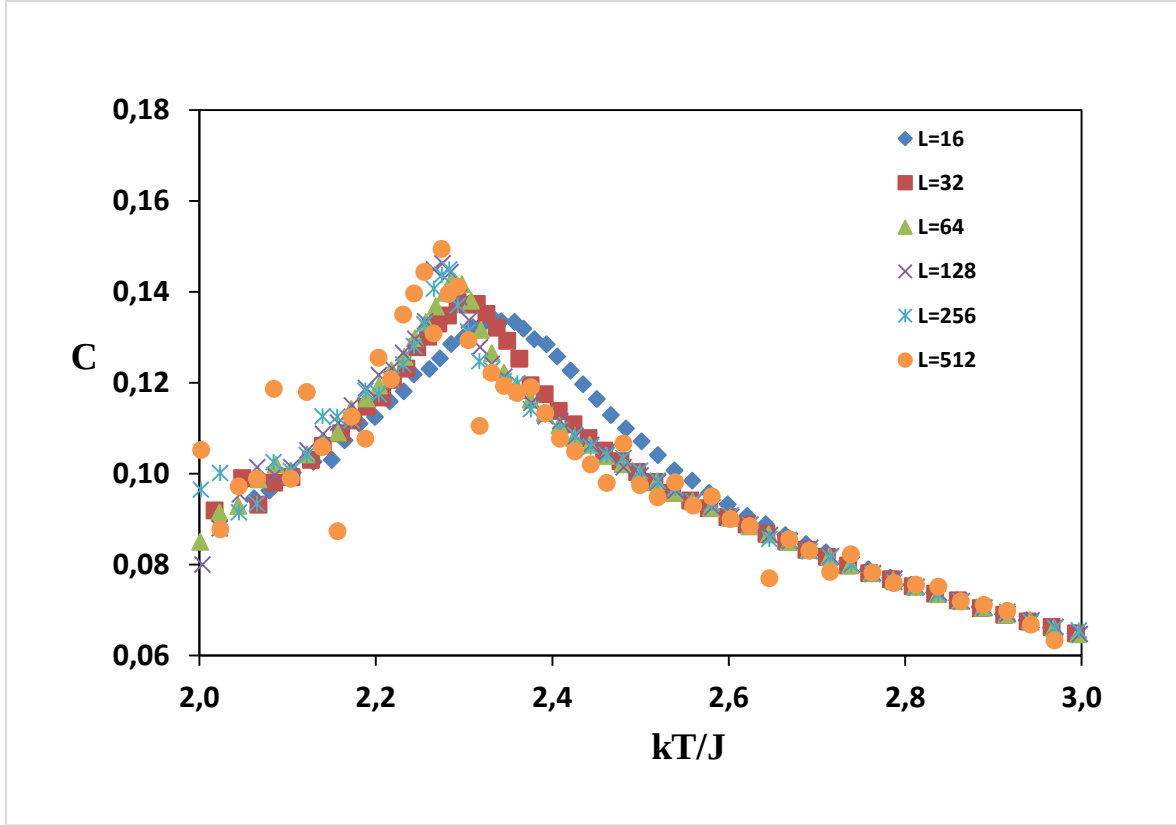
Mıknatıslanmanın sıcaklıkla değişimi örgü büyüdükçe beklendiği gibi kritik bir sıcaklık değeri için sıfıra hızlı bir şekilde yaklaşmaktadır. Buna bağlı olarak manyetik alınganlık örgü büyüdükçe aynı sıcaklık değerinde hızla sonsuza ıraksamaktadır. Öz ısının sıcaklıkla değişimi de alınganlık davranışına benzer olarak aynı sıcaklık değerinde belirgin bir pik oluşturmaktadır.



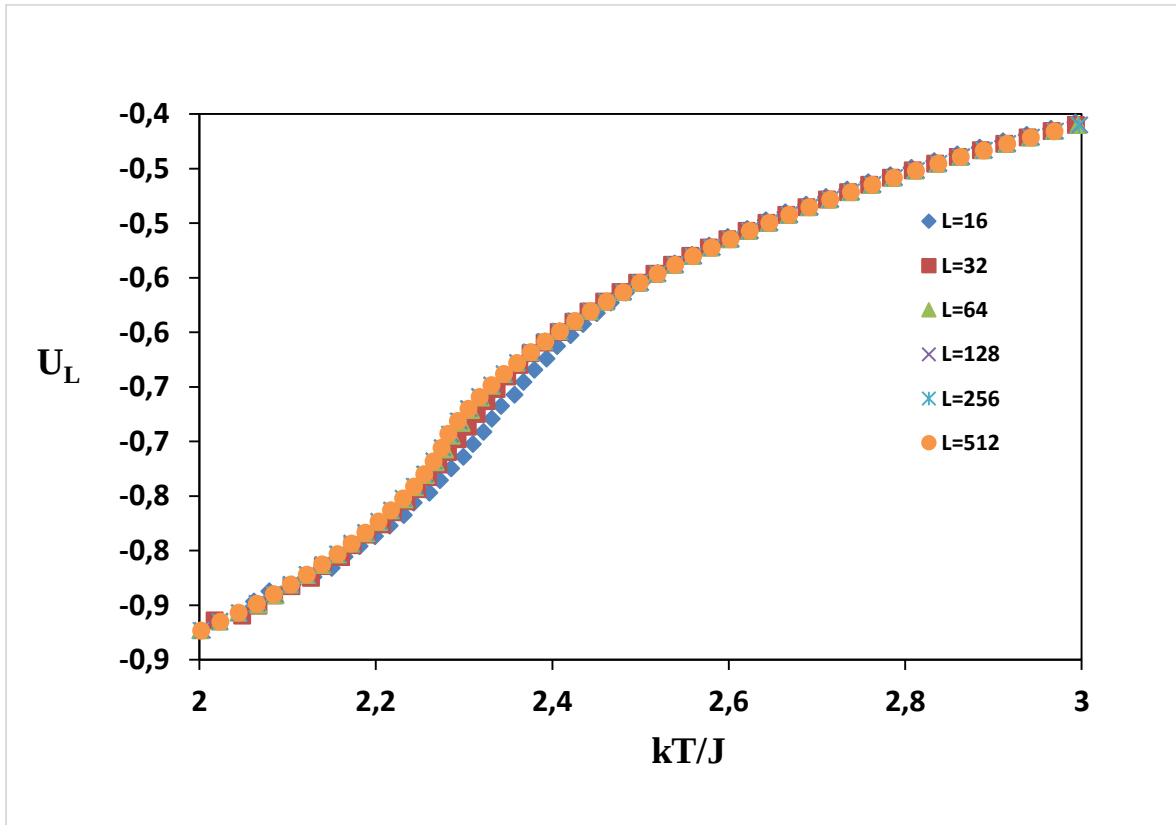
Şekil 4.1. Periyodik sınır şartına sahip kare örgülerde manyetizasyonun sıcaklığa bağlı değişimi



Şekil 4.2. Periyodik sınır şartına sahip kare örgülerde manyetik alınganlığın sıcaklığa göre değişimi

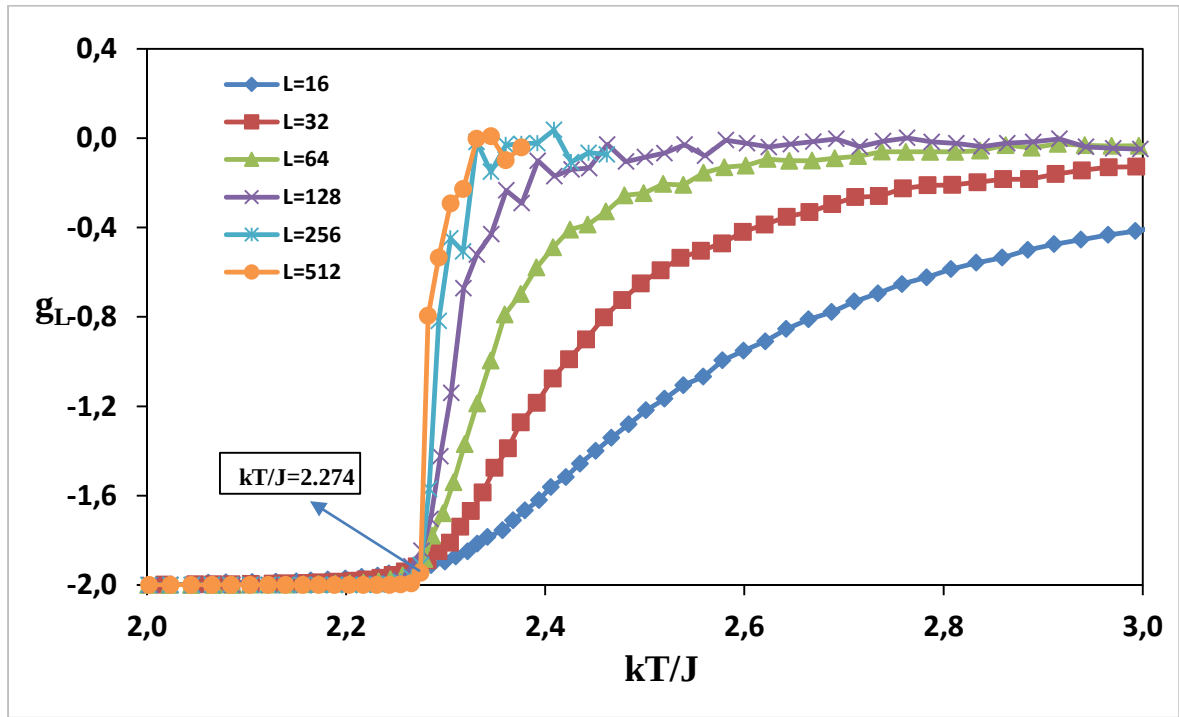


Şekil 4.3. Periyodik sınır şartına sahip kare örgülerde özısının sıcaklığa göre değişimi

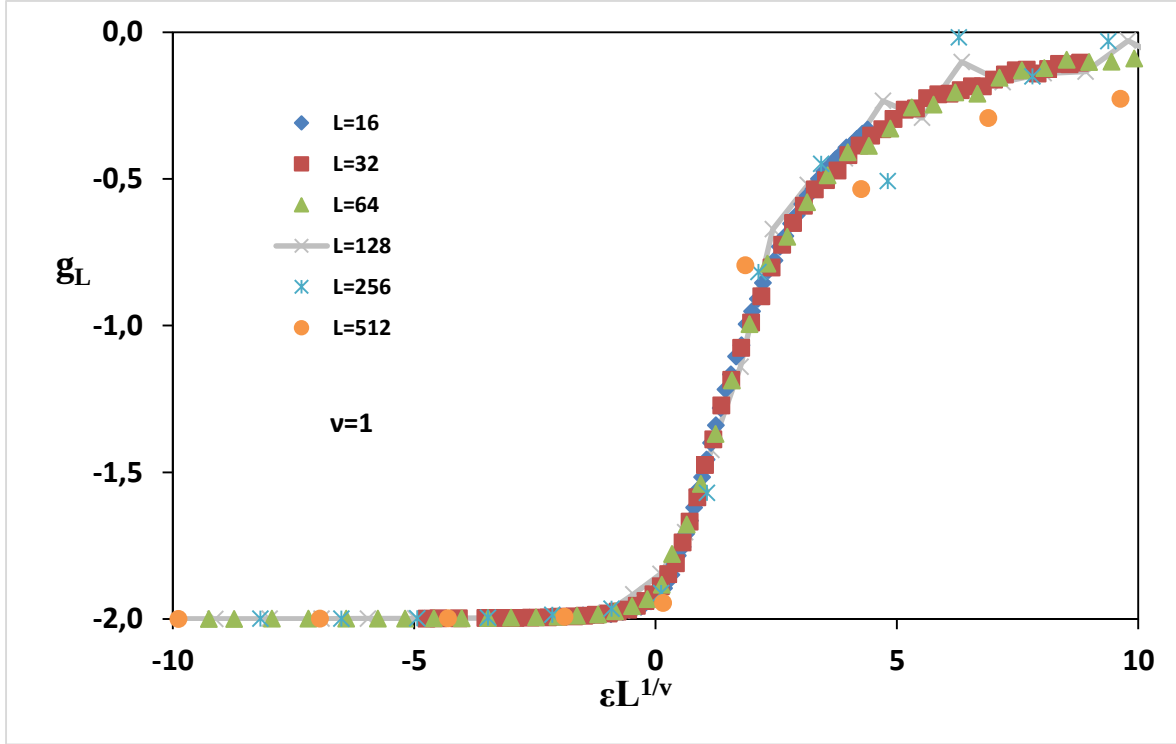


Şekil 4.4. Periyodik sınır şartına sahip kare örgülerde iç enerjinin sıcaklığa göre değişimi

$L=16, 32, 64, 128, 256, 512$ kenar uzunluklarına sahip periyodik sınır şartlı kare örgüler için Binder kümülanının sıcaklığa bağlı değişimi Şekil 4.5 te çizildi ve farklı örgüler için elde edilen eğrilerin kesişim noktasından sonsuz örgü kritik sıcaklığı $kT(\infty)/J$ değeri 2.274 olarak belilendi. Elde edilen bu sıcaklık değerinin bugüne kadar Monte Carlo metodu kullanana simülasyonlardan elde edilen sonuçlarla uyumlu olduğu görüldü [40,41]. Binder kümülanının farklı örgüleri için elde edilen sıcaklık değişim verilerinin sonlu örgü ölçekleme teorisi bağıntıları kullanılarak Log-Log grafikleri çizildiğinde $\nu=1$ için bir eğriye uyduğu görülmektedir.

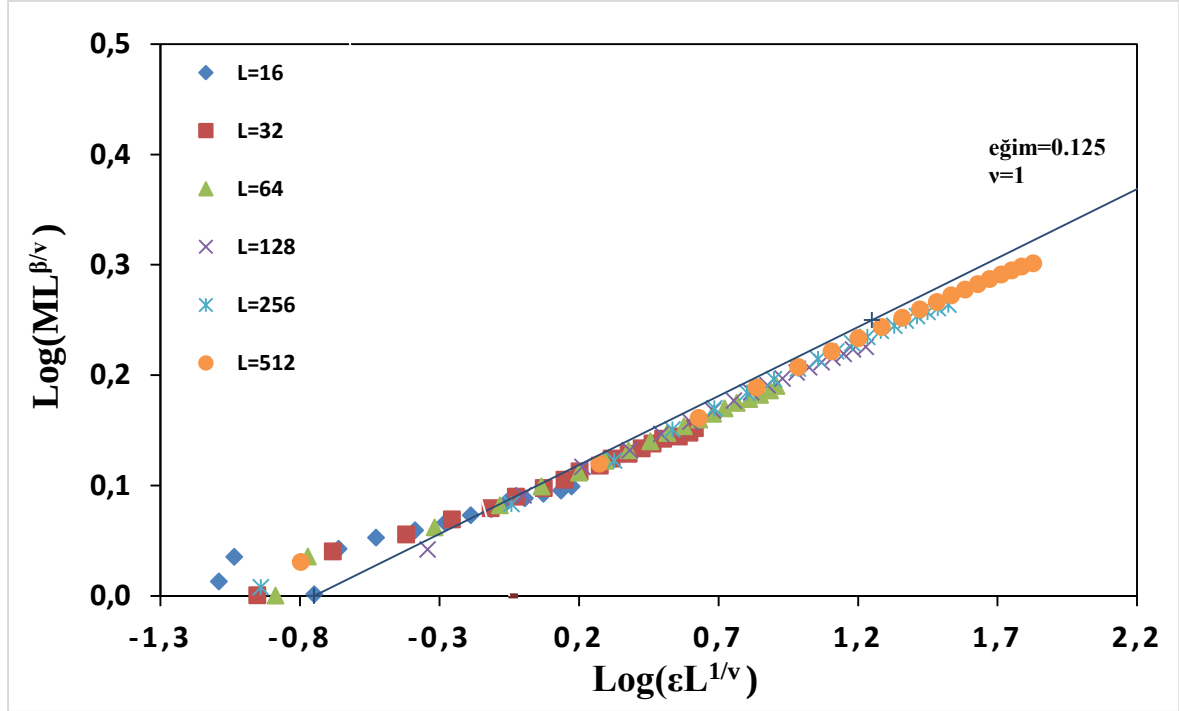


Şekil 4.5. Periyodik sınır şartına sahip kare örgülerde g_L nin sıcaklığa göre değişimi

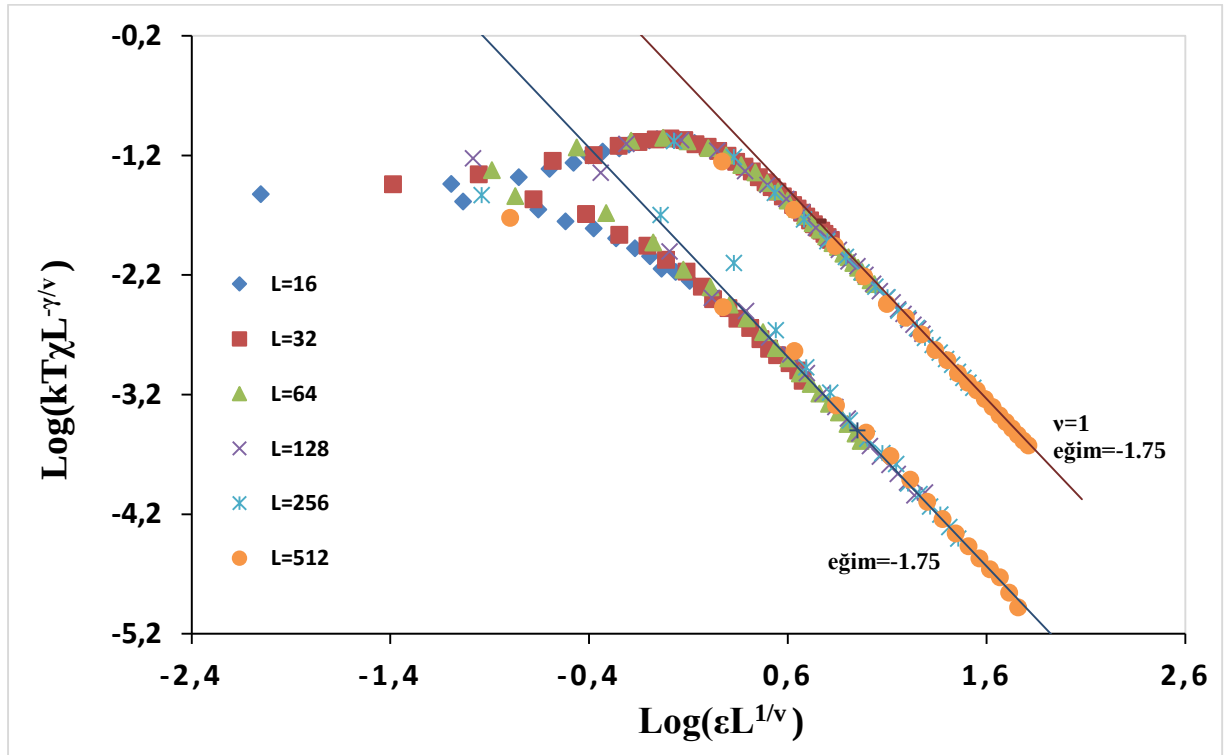


Şekil 4.6. Periyodik sınır şartına sahip kare örgülerde g_L nin $\varepsilon L^{1/\nu}$ göre değişimi

Sonlu örgü ölçekleme teorisine göre $L=16, 32, 64, 128, 256, 512$ kenar uzunluklarına sahip kare örgülerde hesaplanan manyetizasyon ve manyetik alınganlığın sıcaklıkla değişim datalarının ilgili sonlu örgü ölçekleme bağıntıları kullanıldığında tek bir eğriye uyması beklenmektedir. Manyetizasyon için verilen sonlu örgü ölçekleme bağıntısının Log-Log grafiği şekil 4.7 de çizildi. Bu grafik incelendiğinde $T < T_c(\infty)$ için dataların $\beta=0.125$ eğimli bir doğruya, $T > T_c(\infty)$ için $\beta'=-0.875$ eğimli bir doğruya uymaktadır. Diğer taraftan manyetik alınganlık için şekil 4.8 de çizilen sonlu örgü ölçekleme grafiğindeki datalar da $T < T_c(\infty)$ için ve $T > T_c(\infty)$ için $\gamma=-1.75$ eğimli doğrulara uymaktadır. Sonuç olarak CCA ısıtma algoritması kullanılarak iki boyutlu Ising Model için elde edilen termodinamik niceliklerin krtik davranışının evrensel Ising davranışına uyduğu görülmektedir.



Şekil 4.7. Periyodik sınır şartına sahip kare örgülerde manyetizasyon için sonlu örgü ölçekleme grafiği



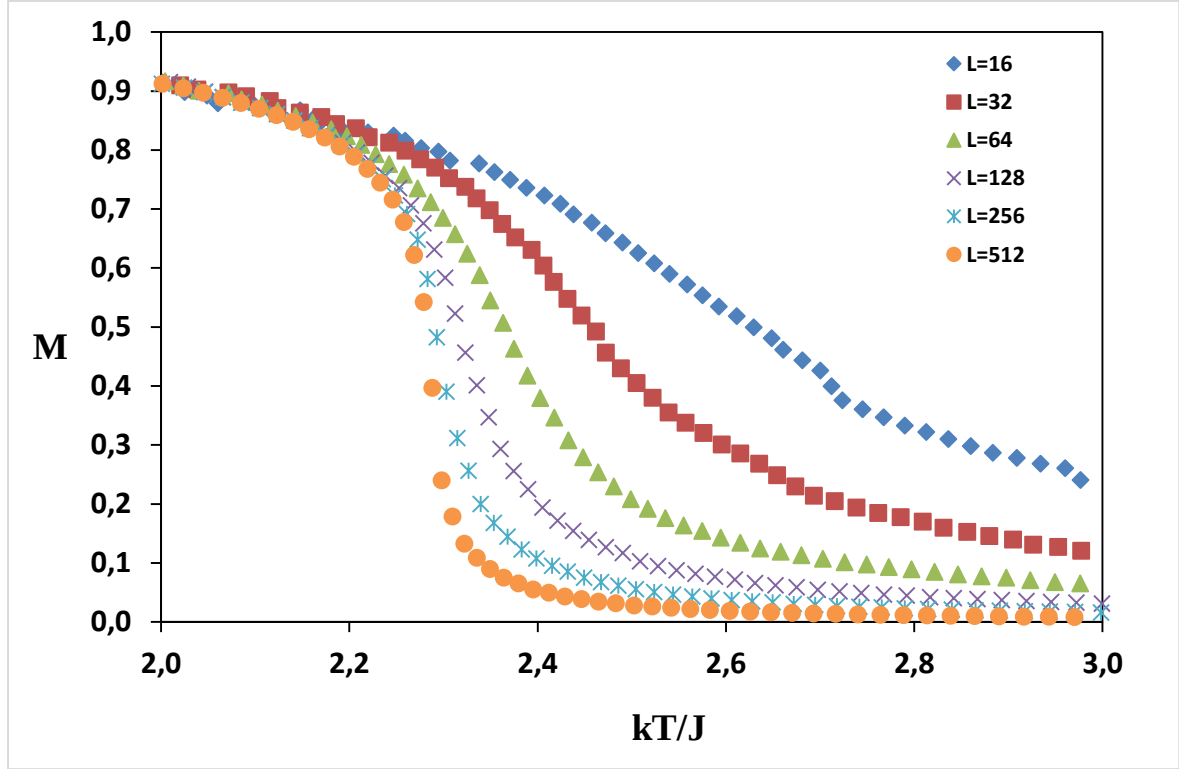
Şekil 4.8. Periyodik sınır şartına sahip kare örgülerde manyetik alınganlık için sonlu örgü ölçekleme grafiği

4.2. Kare Örgülerde Termodinamik Niceliklerin Serbest Kenar Sınır Şartı İçin Sıcaklıkla Değişimleri

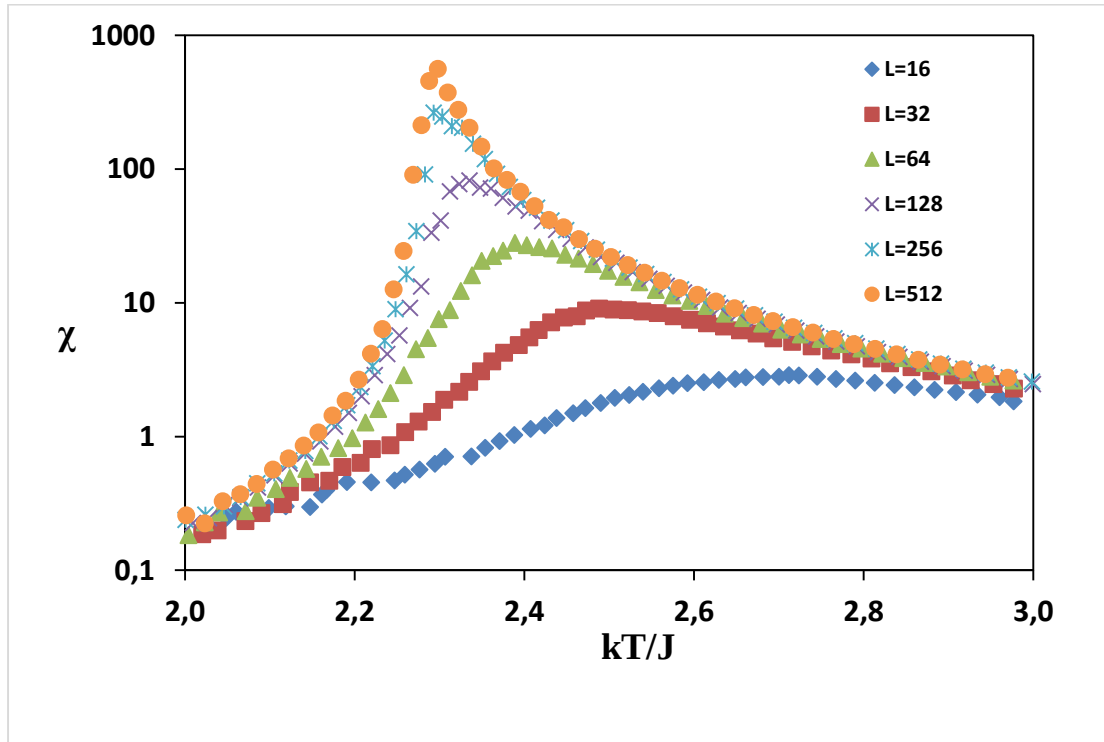
$L=16, 32, 64, 128, 256, 512$ kenar uzunluklarına sahip kare örgüler için mıknatıslanma, manyetik alınganlık, iç enerji ve öz ısı niceliklerinin sıcaklıkla değişimleri Şekil 4.9 - 4.12 de serbest kenar sınır şartı için verildi. Bu grafikler incelendiğinde, serbest kenar sınır şartı için termodinamik niceliklerin sıcaklığa bağlı değişimlerinin karakteristik ikinci derece faz geçişi davranışına, büyük örgülerde fonksiyonel olarak uyduğu fakat kenar uzunlukları $L \leq 32$ olan örgülerde farklılık gösterdiği görülmektedir.

Kenar uzunlukları $L > 32$ olan örgülerde manyetizasyonun sıcaklıkla değişimleri beklendiği gibi örgü büyüdükçe kritik bir sıcaklık değeri için sıfıra hızlı bir şekilde yaklaşmaktadır. Buna bağlı olarak, manyetik alınganlık örgü büyüdükçe aynı sıcaklık değerinde hızla sonsuza ıraksamaktadır. Öz ısının sıcaklıkla değişimi de manyetik alınganlık davranışına benzer olarak, aynı sıcaklık değerinde belirgin bir pik oluşturmaktadır. Fakat, kenar uzunluğu $L \leq 32$ olan kare örgüler için Şekil 4.9 dan görülebileceği gibi manyetizasyonun sıcaklıkla değişim eğrilerinde, belirli sıcaklık civarında sıfıra gitme eğilimi görülmemektedir. Bu davranış büyük örgülere göre bariz farklılıklar göstermektedir. Buna bağlı olarak, Şekil 4.10 ve Şekil 4.11 den görülebileceği gibi manyetik alınganlık ve öz ısının sıcaklıkla değişimlerinde kritik sıcaklık civarında görünen pik davranışı bozulmakta ve keskin pik davranışı yerine yaygın bir pik davranışı görülmektedir

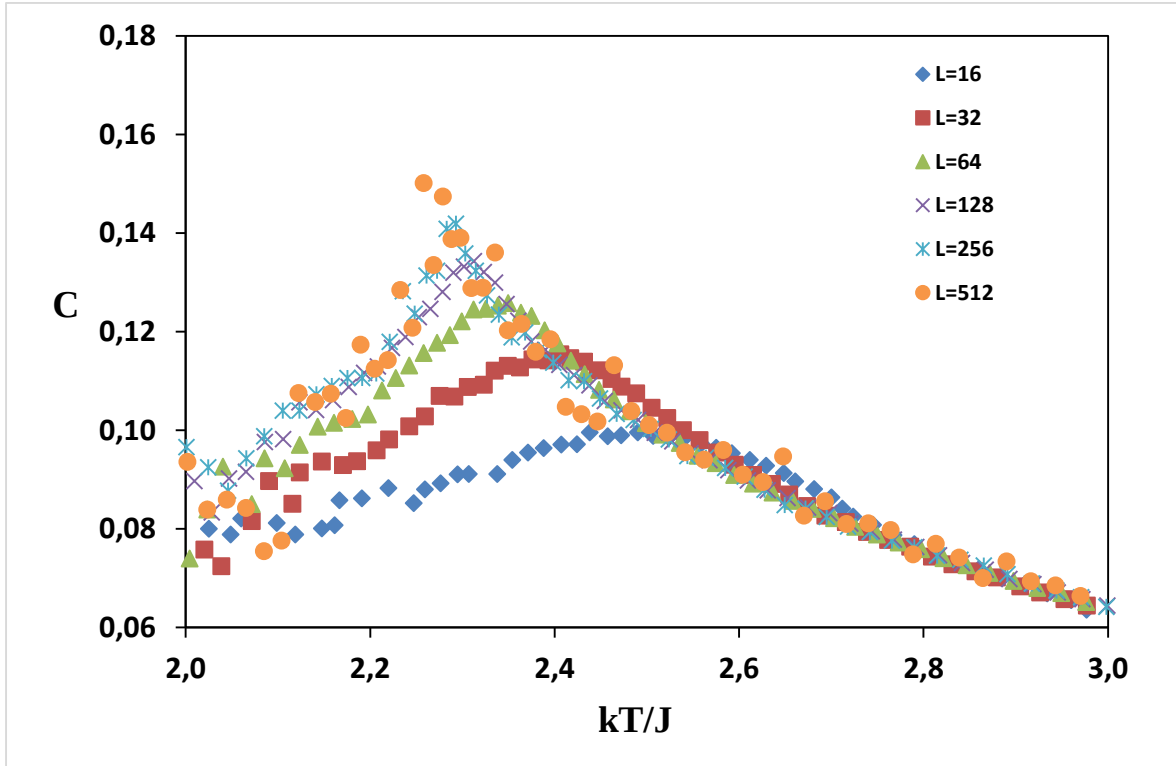
$L=16, 32, 64, 128, 256, 512$ kenar uzunluklarına sahip serbest kenar sınır şartlı kare örgüler için Binder kümülanının sıcaklığa bağlı değişimi şekil 4.13 te çizildi ve farklı örgüler için elde edilen eğrilerin kesişim noktasından sonsuz örgü kritik sıcaklığı $kTJ(\infty)/J = 2.279$ olarak belirlendi. Elde edilen bu sıcaklık değerinin bugüne kadar Monte Carlo metodlarından elde edilen sonuçlarla uyumlu olduğu görüldü[40,41].



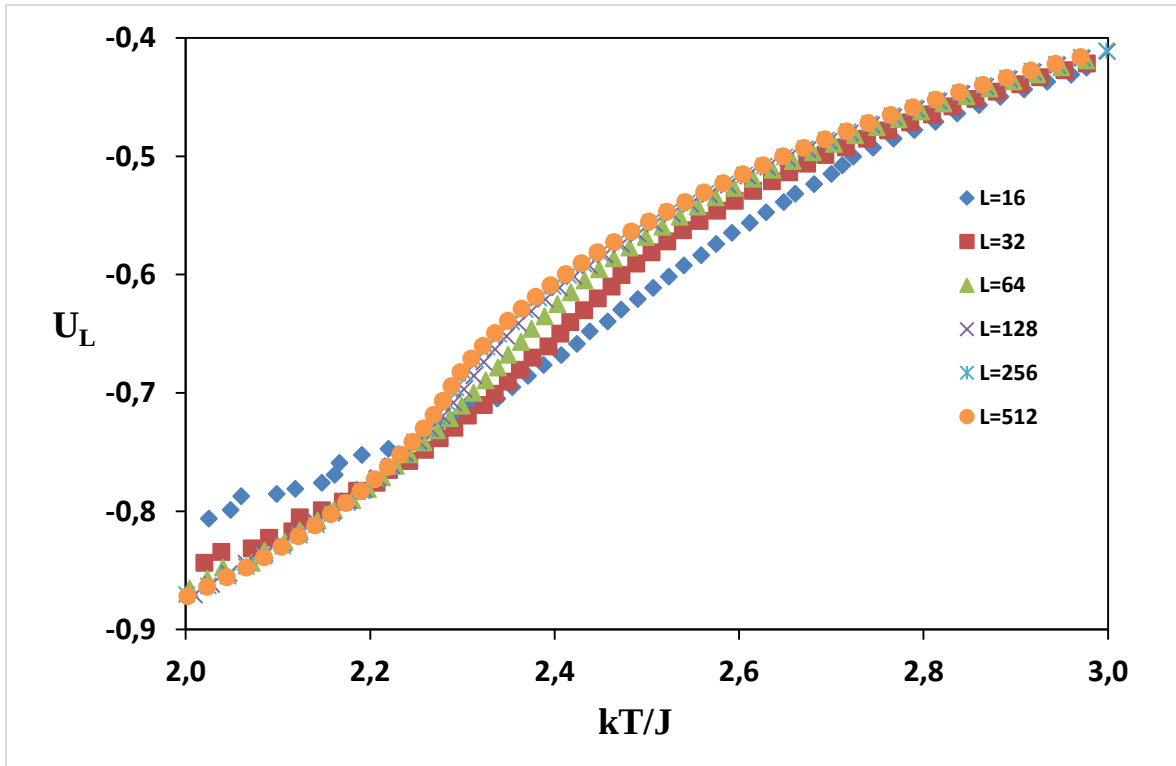
Şekil 4.9. Serbest kenar sınır şartına sahip kare örgülerde manyetizasyonun sıcaklığa bağlı değişimi



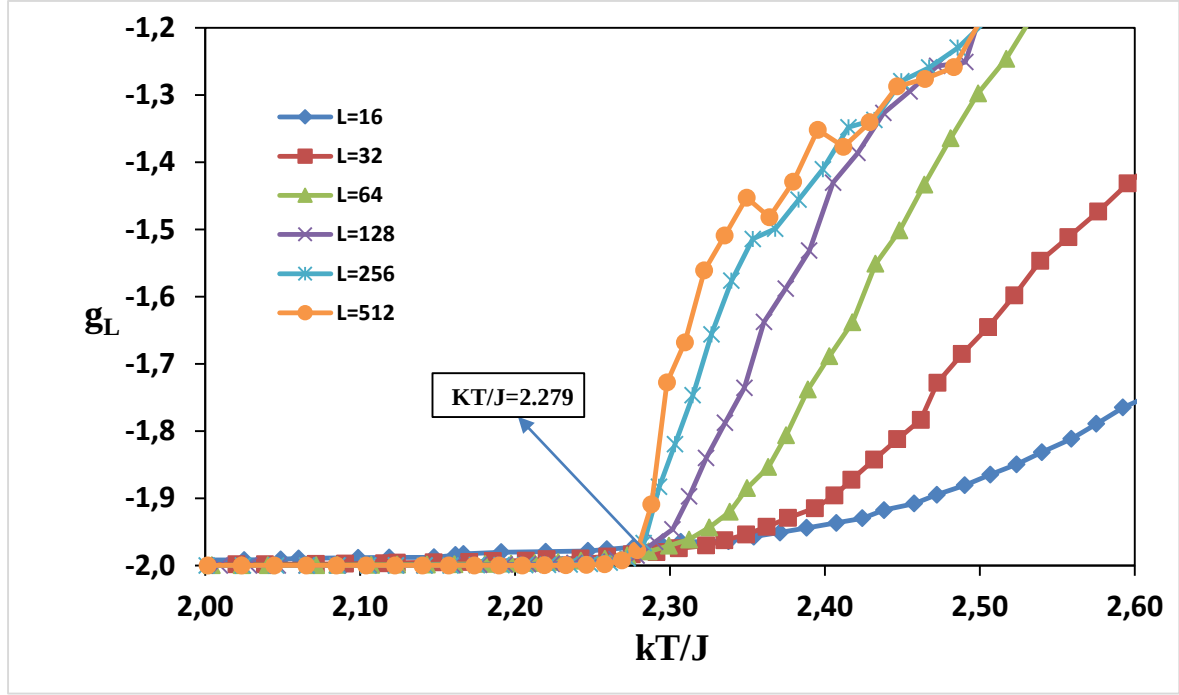
Şekil 4.10. Serbest kenar sınır şartına sahip kare örgülerde manyetik alınganlığın sıcaklığa göre değişimi



Şekil 4.11. Serbest kenar sınır şartına sahip kare örgülerde özısının sıcaklığa göre değişimi



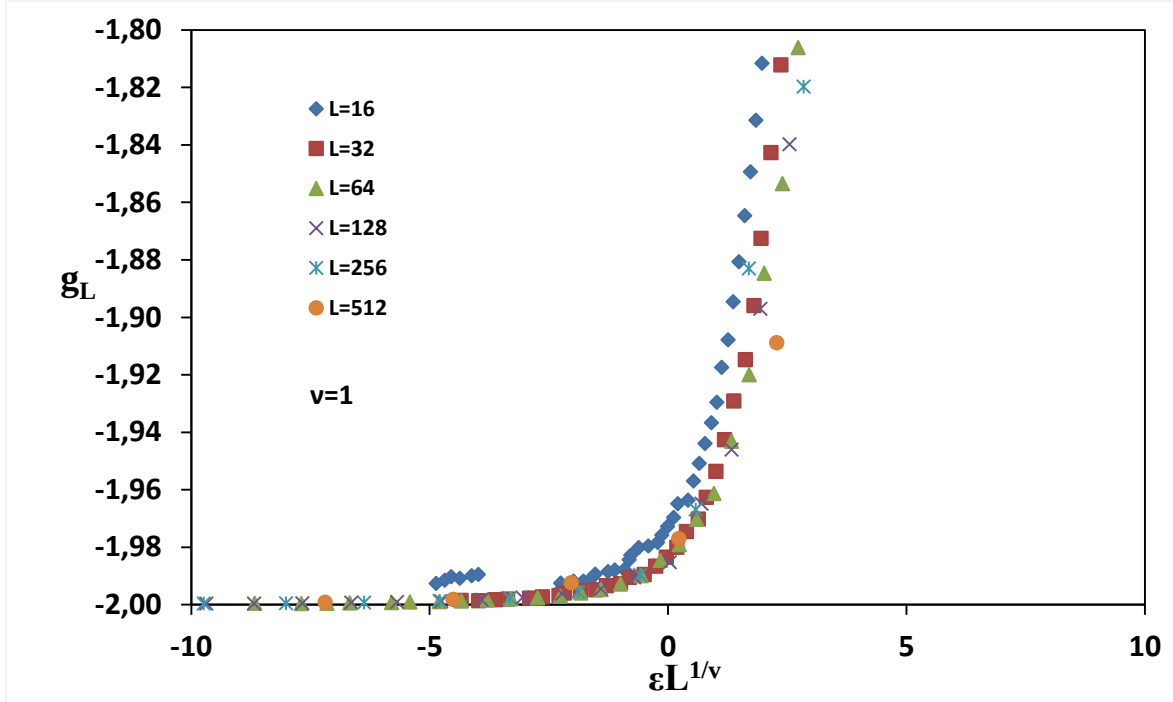
Şekil 4.12. Serbest kenar sınır şartına sahip kare örgülerde iç enerjinin sıcaklığa göre değişimi



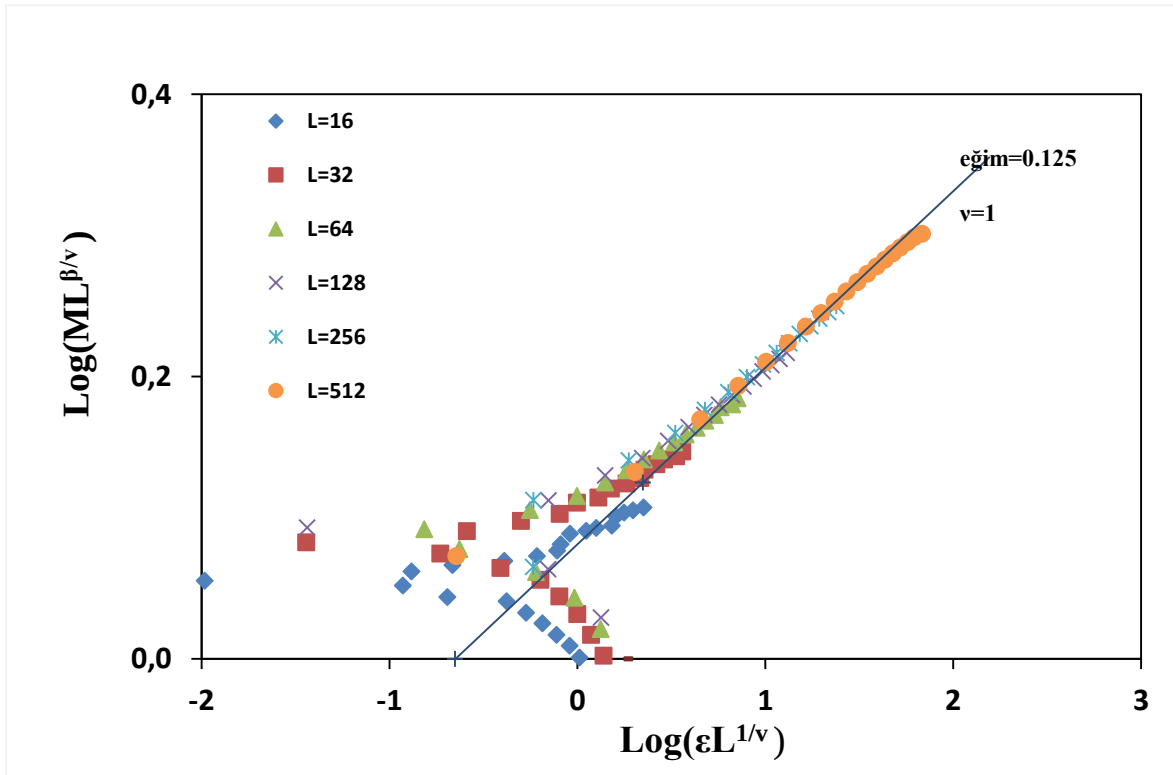
Şekil 4.13. Serbest kenar sınır şartına sahip kare örgülerde g_L nin sıcaklığa göre değişimi

Sonlu örgü ölçekleme teorisine göre $L=16, 32, 64, 128, 256, 512$ kenar uzunluklarına sahip kare örgülerde hesaplanan Binder kümülanı, manyetizasyon ve manyetik alınganlık niceliklerinin sıcaklığa bağlı değişimlerinin, ilgili sonlu örgü ölçekleme bağıntıları kullanıldığında tek bir eğriye uyması beklenmektedir.

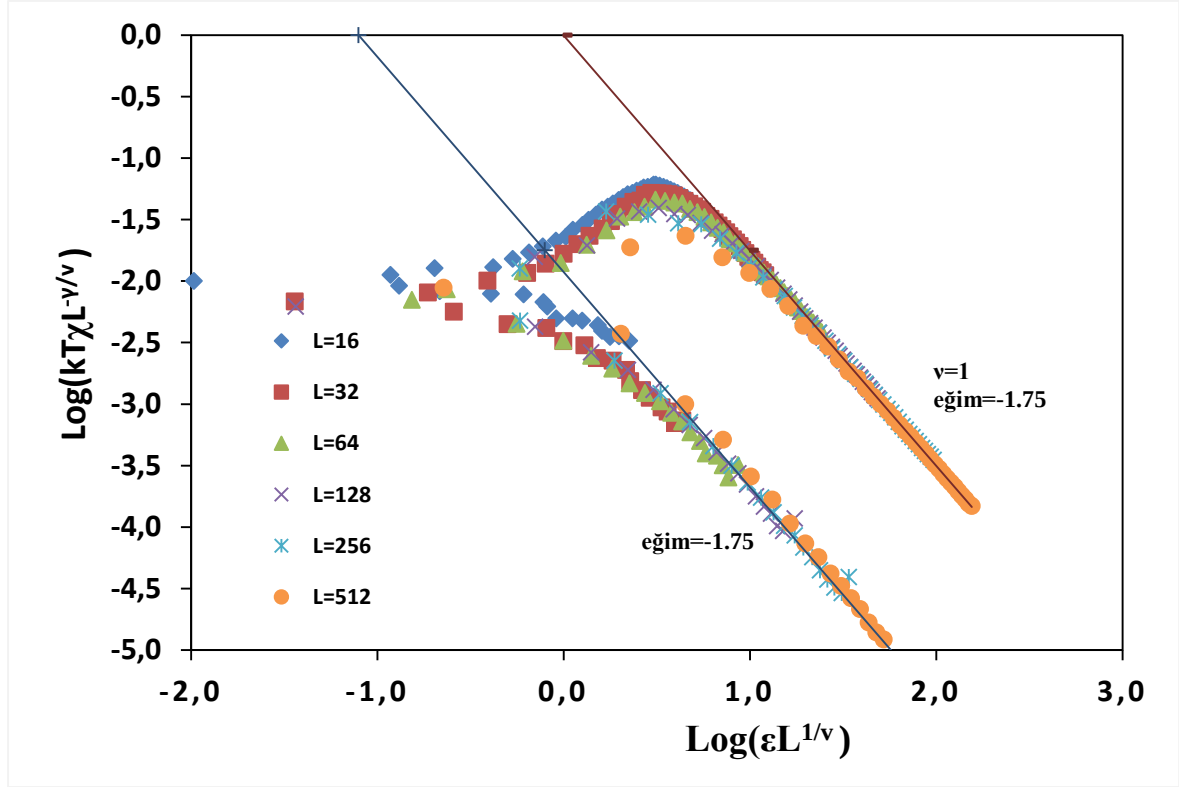
Eşitlik 2.27de de verilen Binder kümülanı için ölçekleme bağıntısı kullanarak çizilen Şekil 4.14 teki grafik incelendiğinde $L > 32$ örgüler için dataların örgü büyüdükçe tek bir eğriye yaklaştığı görülmektedir. Ancak $L \leq 32$ örgüler için ise datalar bu eğriye bariz olarak uymamaktadır. Manyetizasyon için verilen sonlu örgü ölçekleme bağıntısının Log-Log grafiği şekil 4.15 de çizildi. Bu grafik incelendiğinde $L > 32$ olan kare örgüler için dataların $T < T_c(\infty)$ bölgesinde $\beta=0.125$ eğimli bir doğruya uyduğu görülmektedir. Diğer taraftan manyetik alınganlık için şekil 4.16 da çizilen sonlu örgü ölçekleme grafiğindeki dataların da kenar uzunlukları $L > 32$ olan örgüler için $T < T_c(\infty)$ ve $T > T_c(\infty)$ bölgelerinde $\gamma=-1.75$ eğimli doğrulara uydukları görülmektedir. Fakat, kenar uzunluğu $L \leq 32$ olan örgüler $T < T_c(\infty)$ için bu doğruya tam olarak uymamaktadır.



Şekil 4.14. Serbest sınır şartına sahip kare örgülerde g_L nin $\varepsilon L^{1/v}$ göre değişimi

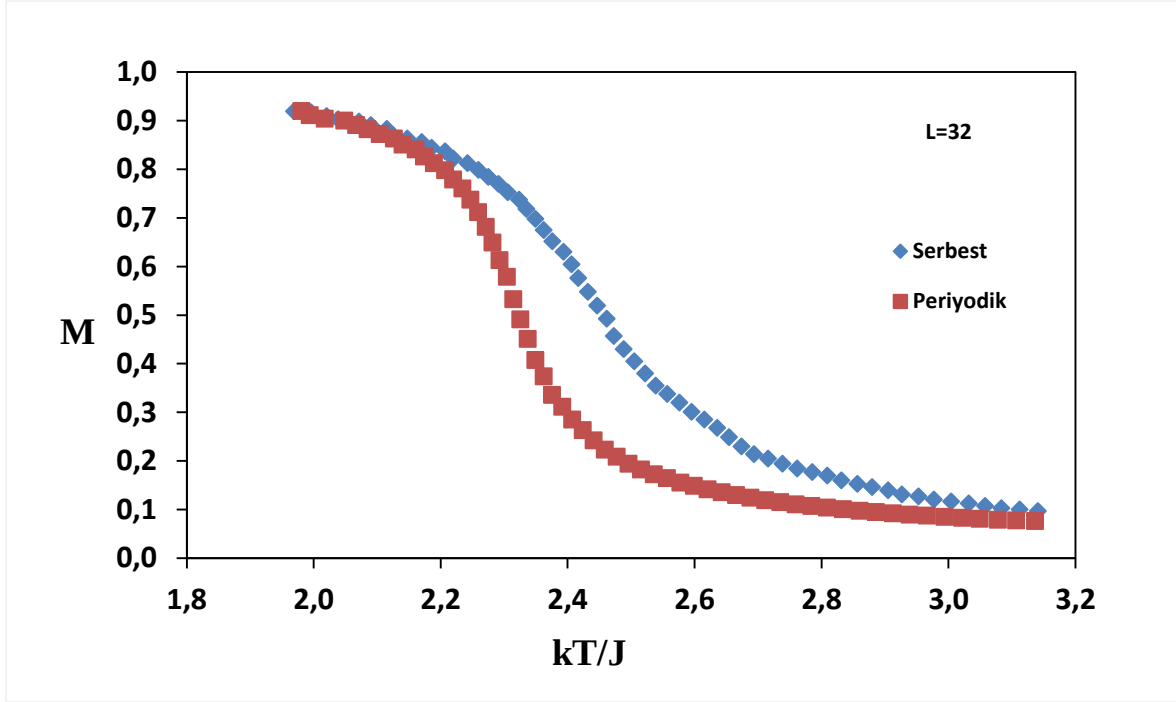


Şekil 4.15. Serbest kenar sınır şartına sahip kare örgülerde manyetizasyon için sonlu örgü ölçekleme grafiği

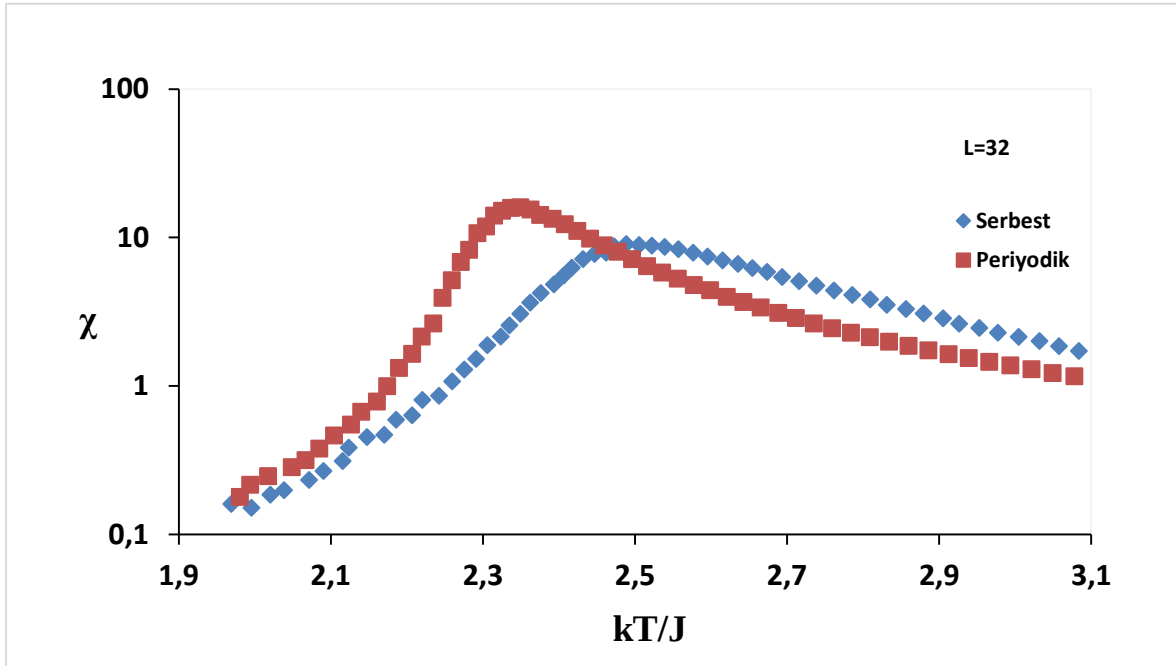


Şekil 4.16. Serbest kenar sınır şartına sahip kare örgülerde manyetik alınganlık için sonlu örgü ölçekleme grafiği

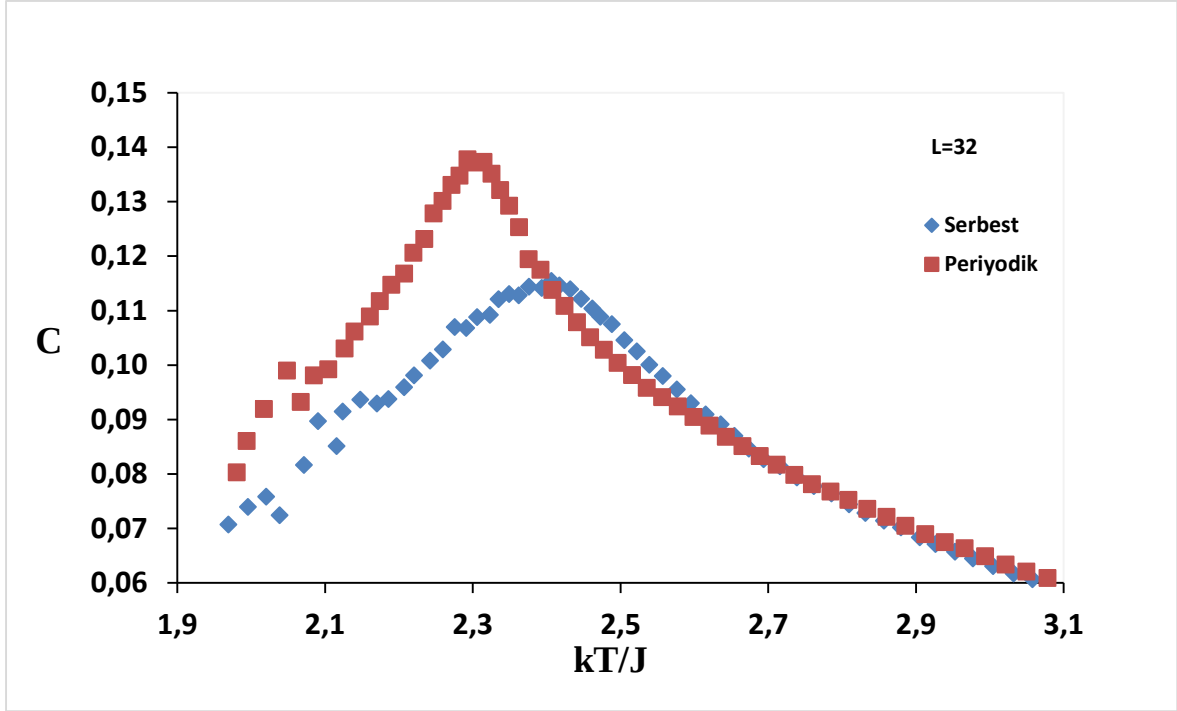
Şekil 4.17 ile şekil 4.22 arasında kenar uzunlukları $L = 32$ ve $L = 512$ olan kare örgülerde manyetizasyon, manyetik alınganlık ve öz ısı niceliklerinin serbest kenar ve periyodik sınır koşullarında sıcaklığa bağlı değişimlerinin grafikleri görülmektedir. Bu grafikler incelendiğinde, termodinamik niceliklerin sıcaklıkla değişimlerinin büyük örgüler için benzer oldukları görülmektedir. $L=32$ kenar uzunluklu örgü için termodinamik niceliklerin fonksiyonel davranışının ve kritik sıcaklık değerinin sınır şartına bağlı olarak değiştiği, ancak $L=512$ kenar uzunluklu örgü için değişmediği görülmektedir. Bu sonucu olarak, serbest sınır şartı için $L > 64$ örgülerin iki boyutlu davranışa uyduğu söylenebilir.



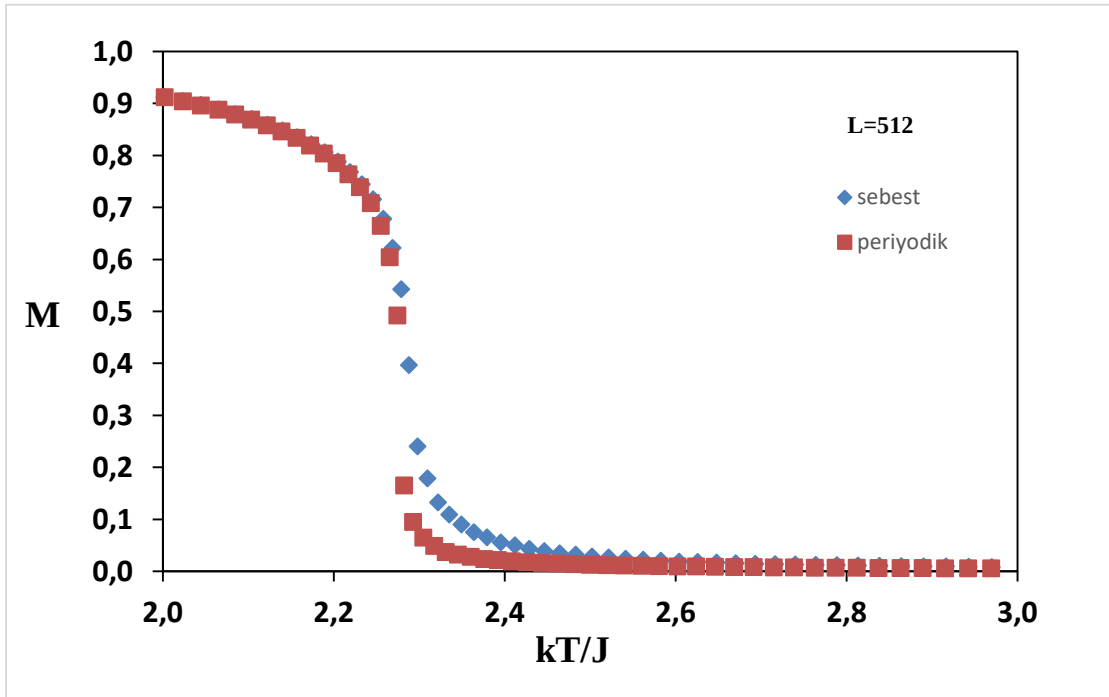
Şekil 4.17. Periyodik sınır şartı ve serbest sınır şartları için $L=32$ kenar uzunluklarına sahip örgülerin manyetizasyonlarının sıcaklığa göre değişimleri



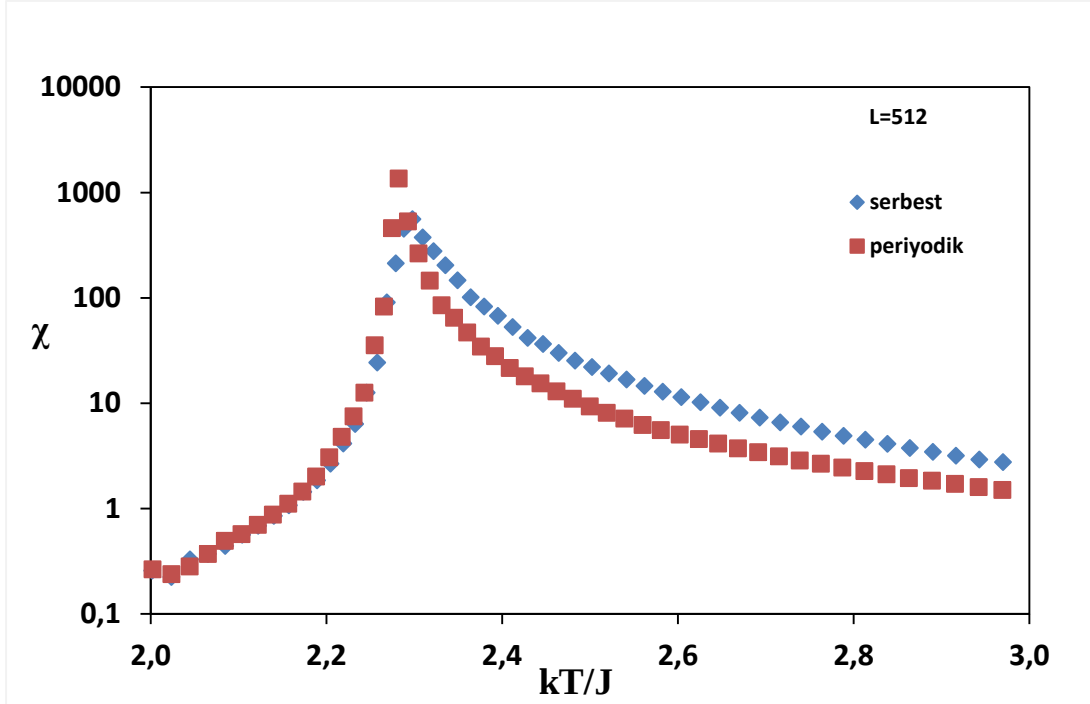
Şekil 4.18. Periyodik sınır şartı ve serbest sınır şartları için $L=32$ kenar uzunluklarına sahip örgülerin manyetik alınganlıklarının sıcaklığa göre değişimleri



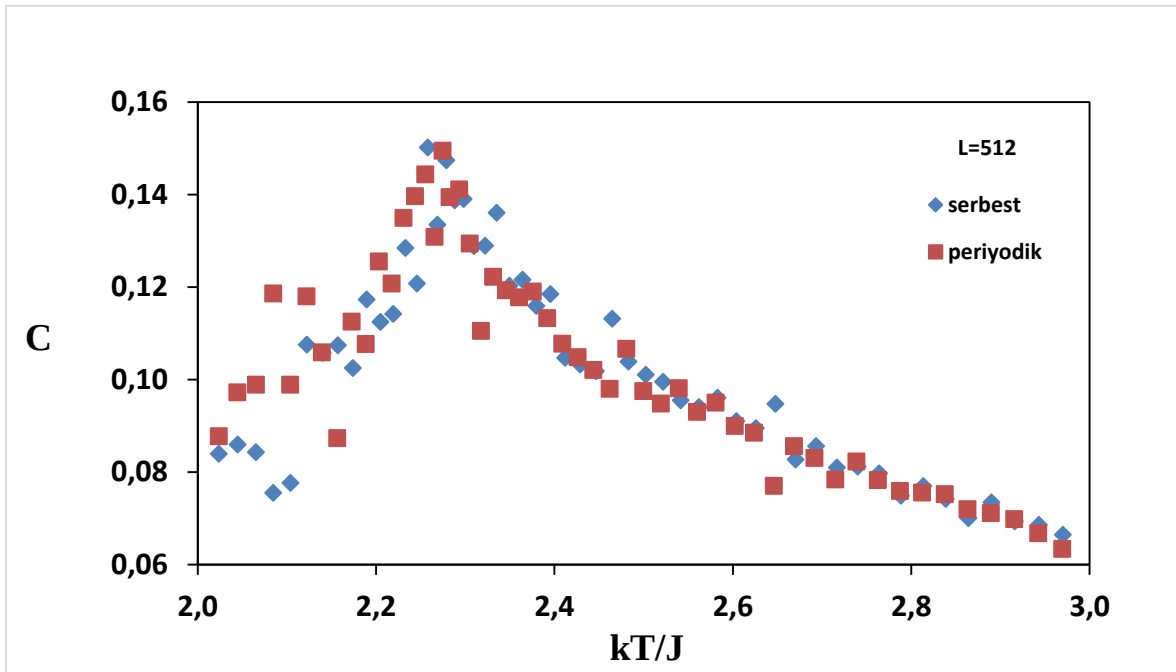
Şekil 4.19. Periyodik sınır şartı ve serbest sınır şartları için $L=32$ kenar uzunluklarına sahip örgülerin özısılarının sıcaklığa göre değişimleri



Şekil 4.20. Periyodik sınır şartı ve serbest sınır şartları için $L=512$ kenar uzunluklarına sahip kare örgülerde manyetizasyonun sıcaklığa göre değişimleri



Şekil 4.21. Periyodik sınır şartı ve serbest sınır şartları için $L=512$ kenar uzunluklarına sahip örgülerin manyetik alınganlıklarının sıcaklığa göre değişimleri



Şekil 4.22. Periyodik sınır şartı ve serbest sınır şartları için $L=512$ kenar uzunluklarına sahip örgülerin öz ısılarının sıcaklığa göre değişimleri

5. TARTIŞMA

Bu çalışmada periyodik sınır şartı ve serbest kenar sınır şartları için $L=16, 32, 64, 128, 256, 512$ kenar uzunluklarına sahip kare örgülerde termodinamik niceliklerin sıcaklıkla değişimleri oluşturuldu. Elde edilen sonuçlardan yüksek kenar uzunluklu kare örgüler için hesaplanan termodinamik niceliklerin sıcaklığa bağlı davranışlarının sınır koşulundan bağımsız olarak beklenen iki boyutlu kare örgü davranışları ile örtüştüğü görülmektedir. Ancak, serbest kenar sınır koşuluna sahip küçük kenar uzunluklu kare örgülerin termodinamik niceliklerinin sıcaklığa bağlı davranışları, beklenen davranışa uymamaktadır. Simülasyon sonuçları gösterdi ki, kenar uzunluğu $L \leq 32$ olan kare örgülerin kritik davranışları, serbest kenar sınır şartı için iki boyutlu sistemlerin kritik davranışından farklılaşmakta, bir boyutlu sistemlerdeki kritik davranışa benzer bir davranış sergilemektedir. Bu durum, $L \leq 32$ kenar uzunluklu serbest sınır şartına sahip örgülerin sonsuz örgü davranışına uyan sonlu iki boyutlu örgü olarak değil, iki boyutlu nano örgü olarak değerlendirilmesi ile açıklanabilir.

KAYNAKLAR

1. Yeomans, J. M. (1992). *Statistical mechanics of phase transitions*. Oxford: Clarendon Press, 16-36.
2. Skomski, R. (2003). Nanomagnetism. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 15(20), 841.
3. Dennis, C. L., Borges, R. P., Buda, L. D., Ebels, U., Gregg, J. F., Hehn, M. and Thornton, M. J. (2002). The defining length scales of mesomagnetism: a review. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 14(49), 1175.
4. Skomski, R. (2008). *Simple models of magnetism*. Oxford: Oxford University Press on Demand, 349
5. Ferry, D. K. (2012). Ohm's Law in a Quantum World. *Science*, 335(6064), 45-46.
6. Kawata, S., Sun, H. B., Tanaka, T. and Takada, K. (2001). Finer features for functional microdevices. *Nature*, 412(6848), 697.
7. Puentes, V. F., Krishnan, K. M. and Alivisatos, A. P. (2001). Colloidal nanocrystal shape and size control: the case of cobalt. *Science*, 291(5511), 2115-2117.
8. Yin, Y., Rioux, R. M., Erdonmez, C. K., Hughes, S., Somorjai, G. A. and Alivisatos, A. P. (2004). Formation of hollow nanocrystals through the nanoscale Kirkendall effect. *Science*, 304(5671), 711-714.
9. Ferdinand, A. E., Fisher, M. E. (1969). Bounded and inhomogeneous Ising models. I. Specific-heat anomaly of a finite lattice. *Physical Review*, 185(2), 832.
10. Onsager, L. (1944). Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition. *Physical Review*, 65(3-4), 117.
11. Kaufman, B. (1949). Crystal statistics. II. Partition function evaluated by spinor analysis. *Physical Review*, 76(8), 1232.
12. Au-Yang, H., Fisher, M. E. (1975). Bounded and inhomogeneous Ising models. II. Specific-heat scaling function for a strip. *Physical Review B*, 11(9), 3469.
13. Ivashkevich, E. V., Izmailian, N. S. and Hu, C. K. (2002). Kronecker's double series and exact asymptotic expansions for free models of statistical mechanics on torus. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 35(27), 5543.
14. Salas, J. (2002). Exact finite-size-scaling corrections to the critical two-dimensional Ising model on a torus: II. Triangular and hexagonal lattices. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 35(8), 1833.

15. Izmailian, N. S., Hu, C. K. (2007). Finite-size effects for the Ising model on helical tori. *Physical Review E*, 76(4), 1-17.
16. Izmailian, N. S., Oganessian, K. B. and Hu, C. K. (2002). Exact finite-size corrections for the square-lattice Ising model with Brascamp-Kunz boundary conditions. *Physical Review E*, 65(5), 1-11.
17. Janke, W., Kenna, R. (2002). Finite-size scaling and corrections in the Ising model with Brascamp-Kunz boundary conditions. *Physical Review B*, 65(6), 1-6.
18. Izmailian, N. S., Hu, C. K. (2001). Exact universal amplitude ratios for two-dimensional Ising models and a quantum spin chain. *Physical Review Letters*, 86(22), 5160-5163.
19. Kutlu, B. (1995). *İki Boyutlu Ising Modelin Creutz Cellular Automaton ile İncelenmesi*, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara.
20. Huang, K. (1987). *Statistical mechanics*. (2nd Edition), New York: John Wiley & Sons, Inc., 399-400.
21. Landau, D. P., Binder, K. (2014). *A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics*. Cambridge: Cambridge University Press, 74.
22. Landau, D. P., Binder, K. (2014). *A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics*. Cambridge: Cambridge University Press, 75-76.
23. Wolfram, S. (1983). Statistical mechanics of cellular automata. *Reviews of Modern Physics*, 55(3), 601,604.
24. Özkan, A. (2007). *Fcc Blume-Emery-Griffiths Modelin Faz Uzayı Üzerinde Dipol-Kuadrupol Etkileşiminin Etkisi*, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara.
25. Creutz, M. (1986). Deterministic ising dynamics. *Annals of Physics*, 167(1), 62-72.
26. Kutlu, B. (1997). Critical behavior of the two-dimensional Ising model with next-nearest-neighbor antiferromagnetic interaction on the Creutz cellular automaton. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 234(3-4), 807-818.
27. Kutlu, B., Aktekin, N. (1994). Computation of critical exponents for two-dimensional ising model on a cellular automaton. *Journal of Statistical Physics*, 75(3-4), 757-763.
28. Kutlu, B., Aktekin, N. (1994). Critical slowing down in Ising model for Creutz algorithm. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 208(3-4), 423-432.
29. Kutlu, B., Aktekin, N. (1995). Computation of correlation functions of the two dimensional Ising model. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 215(3), 370-377.

30. Kutlu, B. (1997). Critical exponents of the two-dimensional Ising model with next-nearest-neighbor and four-spin interactions on the Creutz cellular automaton. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 243(1-2), 199-212.
31. Aktekin, N. (1995). Simulation of the three-dimensional Ising model on the Creutz Cellular Automaton. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 219(3-4), 436-446.
32. Kutlu, B., Kasap, M. and Turan, S. (2000). The Simulation of the Two-Dimensional Ising Model in the Presence of an External Magnetic Field on the Creutz Cellular Automaton. *International Journal of Modern Physics C*, 11(03), 561-572.
33. Aktekin, N., Erkoç, Ş. (2000). The test of the finite-size scaling relations for the six-dimensional Ising model on the Creutz cellular automaton. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 284(1-4), 206-214.
34. Merdan, Z., Duran, A., Atille, D., Mülazimoğlu, G. and Günen, A. (2006). The test of the finite-size scaling relations of the Ising models in seven and eight dimensions on the Creutz cellular automaton. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 366, 265-272.
35. Seferoğlu, N., Kutlu, B. (2007). Critical behavior of the Blume-Emery-Griffiths model for a simple cubic lattice on the cellular automaton. *Journal of Statistical Physics*, 129(3), 453-468.
36. Seferoğlu, N., Kutlu, B. (2007). Critical exponents for the re-entrant phase transitions in the three-dimensional blume–emery–griffiths model on the cellular automaton. *Chinese Physics Letters*, 24(7), 2040.
37. Özkan, A., Kutlu, B. (2007). Phase diagrams of the fcc blume–emery–griffiths model on a cellular automaton. *International Journal of Modern Physics C*, 18(09), 1417-1427.
38. Özkan, A., Kutlu, B. (2007). Phase diagrams of the fcc blume–emery–griffiths model on a cellular automaton. *International Journal of Modern Physics C*, 18(09), 1417-1427.
39. Seferoğlu, N. (2007). *Üç boyutlu blume-emery-griffiths modelin faz geçişlerinin cellular automaton ile simülasyonu*, Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 1-103.
40. Preis, T., Virnau, P., Paul, W. and Schneider, J. J. (2009). GPU accelerated Monte Carlo simulation of the 2D and 3D Ising model. *Journal of Computational Physics*, 228(12), 4468-4477.
41. Alves, G. A., Vasconcelos, M. S. and Alves, T. F. A. (2016). Critical properties of a two-dimensional Ising magnet with quasiperiodic interactions. *Physical Review E*, 93(4), 042111.

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı, adı : ÜNLÜ, Hasan
Uyruğu : T.C.
Doğum tarihi ve yeri : 17.04.1978, Ludwigsburg
Medeni hali : Bekar
Telefon : 0 (505) 496 80 94
e-mail : hsn.unlu@hotmail.com.tr



Eğitim

Derece

Yüksek lisans

Lisans

Lise

Eğitim Birimi

Gazi Üniversitesi / Fizik

Abant İzzet Baysal Üniversitesi / Fizik

Özel Alanya Erkek Lisesi

Mezuniyet Tarihi

Devam ediyor

2002

1996

İş Deneyimi

-

Yabancı Dil

İngilizce, Almanca

Yayınlar

-

Hobiler

Koşu, bisiklet, müzik



GAZİ GELECEKTİR..