

T.C.
AKDENİZ ÜNİVERSİTESİ



**BAZI TEK TİP VE KARMA-SPİN ISING ZİNCİRLERİ İÇİN RIEMANN
SKALER EĞRİLİK DİYAGRAMLARININ ELDE EDİLMESİ**

Fatma Hülya UĞURLU

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

FİZİK ANABİLİM DALI

YÜKSEK LİSANS TEZİ

HAZİRAN 2019

ANTALYA

T.C.
AKDENİZ ÜNİVERSİTESİ



**BAZI TEK TİP VE KARMA-SPİN ISING ZİNCİRLERİ İÇİN RIEMANN
SKALER EĞRİLİK DİYAGRAMLARININ ELDE EDİLMESİ**

Fatma Hülya UĞURLU

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

FİZİK ANABİLİM DALI

YÜKSEK LİSANS TEZİ

HAZİRAN 2019

ANTALYA

T.C.
AKDENİZ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

BAZI TEK TİP VE KARMA-SPİN ISING ZİNCİRLERİ İÇİN RIEMANN
SKALER EĞRİLİK DİYAGRAMLARININ ELDE EDİLMESİ

Fatma Hülya UĞURLU

ANABİLİM DALI

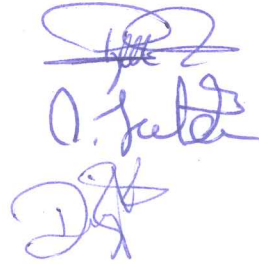
YÜKSEK LİSANS TEZİ

Bu tez 24/06/2019 tarihinde jüri tarafından Oybirliği/Oyçokluğu ile kabul edilmiştir.

Prof. Dr. Rıza ERDEM (Danışman)

Prof. Dr. Orhan YALÇIN

Dr. Öğr. Üyesi Deniz KAYA



ÖZET

BAZI TEK TİP VE KARMA-SPİN ISING ZİNCİRLERİ İÇİN RIEMANN SKALER EĞRİLİK DİYAGRAMLARININ ELDE EDİLMESİ

Fatma Hülya UĞURLU

Yüksek Lisans Tezi, Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Rıza ERDEM

Haziran 2019; 36 sayfa

Boyuna manyetik alan varlığında tek-boyutlu spin-1/2 Ising, spin-1 Blume-Capel ve karma-spin Ising modelleri Riemann geometrisi çerçevesinde incelendi. Önce, transfer matris metodu ile her bir zincirin tam çözümleri üzerinde duruldu ve Gibbs serbest enerji bağıntısı (G) verildi. G yardımıyla metrik tensör elemanları elde edildi ve bunların kısmi türevleri vasıtasıyla eğrilik skaleri (R) türetildi. Sonuçlar üç boyutlu R diyagramları şeklinde sunuldu.

ANAHTAR KELİMELER: Ising spin zincirleri, Metrik tensör, Riemann geometrisi, Skaler eğrilik.

JÜRİ: Prof. Dr. Rıza ERDEM

Prof. Dr. Orhan YALÇIN

Dr. Öğr. Üyesi Deniz KAYA

ABSTRACT

RIEMANNIAN SCALAR CURVATURE DIAGRAMS FOR SOME PURE AND MIXED-SPIN ISING CHAINS

Fatma Hülya UĞURLU

MSc Thesis in PHYSICS

Supervisor: Prof. Dr. Rıza ERDEM

June 2019; 36 pages

One-dimensional spin-1/2 Ising, spin-1 Blume-Capel and mixed-spin Ising models in the longitudinal magnetic field have been investigated within the framework of Riemannian geometry. Firstly, exact solutions of each chain using transfer matrix method and Gibbs free energy relation (G) are given. The metric tensor elements are obtained with the help of G and using their partial derivatives the curvature scalar (R) is derived. Results are presented as three-dimensional R - diagrams.

KEYWORDS: Ising spin chains, Metric tensor, Riemannian geometry, Scalar curvature

COMMITTEE: Prof. Dr. Rıza ERDEM

Prof. Dr. Orhan YALÇIN

Asst. Prof. Dr. Deniz KAYA

ÖNSÖZ

Tek-boyutlu Ising spin zincirleri manyetik faz geçişlerini modellemek amacıyla geliştirilen ilk ve basit sistemler olarak bilinir. İstatistik mekanikte tam olarak çözümlenebilen spin sistemleri genellikle bu sınıfta yer alır. Bu nedenle literatürde termodinamik metrik geometri açısından da ilk olarak ele alınan model manyetik sistemlerin başında tek-boyutlu Ising zincirleri gelmektedir. Çalışmamızda, hem bu zincirlerin tam çözümleri konusunda ileri düzeyde temel bilgi edinilmiş hem de termodinamik geometri yöntemlerini bazı Ising zincirlerine uygulayarak “eğrilik skaleri” veya “termodinamik eğrilik” olarak adlandırılan niceliğin parametre uzayındaki davranışı incelenmiştir. Buradaki “eğrilik” kelimesi spin sisteminin karmaşıklığının bir ölçüsü olup, bu niceliğin fonksiyonel ifadesinde tekillik olup olmadığı önemlidir. Şayet tekillik varsa bu tekillik faz geçişi ile ilişkilendirilir ve “skaler eğrilik diyagramları” olarak adlandırılan üç-boyutlu grafiksel görüntüler ile de doğrulanabilir. Elde ettiğimiz grafiklerden eğrilik yüzeylerinin pürüzsüz bir yapıda olduğu ve herhangi bir tekillik oluşmadığı anlaşılmıştır. Bu da tek-boyutlu spin sistemlerinde faz geçişi gözlenmediği gerçeği ile örtüşmektedir. Tezde yapılan geometrik analiz ışığında, tam olarak çözülebilen ve faz geçişi veren birçok spin sistemlerinin incelenmesi durumunda içerisinde tekilliklerin olduğu eğrilik diyagramları elde edilebilir.

Yüksek Lisans eğitimim boyunca ilminden faydalandığım, insani ve ahlaki değerleri ile de örnek edindiğim, tezimin planlanmasında, araştırılmasında ve oluşumunda ilgi ve desteğini esirgemeyen sayın danışman hocam Prof. Dr. Rıza ERDEM 'e, akedemisyen olma yolunda ilerleyen ve bu yolda yardımlarını esirgemeyen arkadaşlarımdan Tuna TOKSÖZ ve Gizem KELLER 'e, tezim için gerekli hesaplama ve grafik çizimlerinde bilgisine başvurduğum değerli hocam Dr. Öğr. Üyesi Yusuf KÜÇÜKAKÇA 'ya ve araştırma görevlisi arkadaşım Cavit TEKİNÇAY 'a, maddi ve manevi her türlü destek ve anlayışı gösteren değerli eşim Mustafa UĞURLU 'ya ve aileme teşekkürü bir borç biliyorum.

İÇİNDEKİLER

ÖZET	i
ABSTRACT	ii
ÖNSÖZ	iii
AKADEMİK BEYAN	v
SİMGELER VE KISALTMALAR	vi
ŞEKİLLER DİZİNİ	vii
1. GİRİŞ	1
2. KAYNAK TARAMASI	4
2.1. Boyuna manyetik alan varlığında spin-1/2 Ising zinciri	4
2.2. Boyuna manyetik alan varlığında spin-1 Blume-Capel zinciri	9
2.3. Boyuna manyetik alan varlığında karma-spin Ising zinciri	11
3. MATERYAL VE METOT	14
3.1. n -boyutlu termodinamik faz uzayının Riemann geometrisi ve eğrilik skaleri	14
3.2. İki-boyutlu termodinamik faz uzayının Riemann geometrisi ve eğrilik skaleri	15
3.3. Eğrilik skaleri ve R - diyagramları	15
4. BULGULAR VE TARTIŞMA	17
4.1. $S = 1/2$ Ising zinciri için eğrilik skalerinin türetilmesi ve R -diyagramları	17
4.2. $S = 1$ BC zinciri için eğrilik skalerinin türetilmesi ve R -diyagramları . .	23
4.3. Karma spin Ising zinciri için eğrilik skalerinin türetilmesi ve R -diyagramları	29
5. SONUÇLAR	33
6. KAYNAKLAR	35
ÖZGEÇMİŞ	

AKADEMİK BEYAN

Yüksek Lisans Tezi olarak sunduğum "Bazı Tek Tıp ve Karma-Spin Ising Zincirleri için Riemann Skaler Eğrilik Diyagramlarının Elde Edilmesi" adlı bu çalışmanın, akademik kurallar ve etik değerlere uygun olarak bulunduğunu belirtir, bu tez çalışmasında bana ait olmayan tüm bilgilerin kaynağını gösterdiğimi beyan ederim.

24/06/2019

Fatma Hülya UĞURLU



SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler:

$\mathcal{H}$	: Hamiltonyen enerjisi
N	: Örgü nokta sayısı
J	: Bilineer etkileşme sabiti
μ_B	: Bohr Manyetonu
h	: Manyetostatik Zeeman enerjisi
d	: Tek-iyon anizotropi sabiti
σ_i	: Spin-1/2 parçacığı için spin değişkeni
S_i	: Spin-1 parçacığı için spin değişkeni
Z	: Bölüşüm fonksiyonu
β	: Sıcaklık çarpanı
k_B	: Boltzmann sabiti
T	: Sıcaklık
$\mathcal{T}$	: Transfer matrisi
λ	: Özdeğer
G	: Gibbs serbest enerjisi
g_{ij}	: Metrik tensör elemanları
Γ_{jk}^i	: Christoffel Sembolleri
R_{jkl}^i	: Riemann tensörü
R_{ij}	: Ricci tensörü
R	: Eğrilik skaleri

Kısaltmalar:

TMM	: Transfer Matris Metodu
BC	: Blume-Capel

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 4.1	$S = 1/2$ Ising zinciri için $J > 0$ seçilerek elde edilen R 'nin h/T ile değişimi	19
Şekil 4.2	$S = 1/2$ Ising zinciri için $J < 0$ olduğunda R 'nin h/T ile değişimi	19
Şekil 4.3	$S = 1/2$ Ising zinciri için $J > 0$ seçilerek elde edilen R 'nin T ile değişimi	20
Şekil 4.4	$S = 1/2$ Ising zinciri için $J < 0$ seçilerek elde edilen R 'nin T ile değişimi	20
Şekil 4.5	$S = 1/2$ Ising zinciri için üç boyutlu R diyagramı	21
Şekil 4.6	$S = 1$ BC zinciri için $J > 0$ seçilerek elde edilen R 'nin d/T ile değişimi	26
Şekil 4.7	$S = 1$ BC zinciri için $J < 0$ seçilerek elde edilen R 'nin d/T ile değişimi	26
Şekil 4.8	$S = 1$ BC zinciri için $d > 0$ seçilerek elde edilen R 'nin J/T ile değişimi	27
Şekil 4.9	$S = 1$ BC zinciri için $d < 0$ seçilerek elde edilen R 'nin J/T ile değişimi	27
Şekil 4.10	$S = 1$ BC zinciri için üç boyutlu R diyagramı	28
Şekil 4.11	Karma spin $S = 1/2$ ve $S = 1$ Ising zinciri için $h_A/T = 0.003$ seçilerek elde edilen üç boyutlu R diyagramı	31
Şekil 4.12	Karma spin $S = 1/2$ ve $S = 1$ Ising zinciri için $h_A/T = 0.005$ seçilerek elde edilen üç boyutlu R diyagramı	31
Şekil 4.13	Karma spin $S = 1/2$ ve $S = 1$ Ising zinciri için $h_A/T = 0.007$ seçilerek elde edilen üç boyutlu R diyagramı	32

1. GİRİŞ

Spin zincirleri manyetik atomların (spin ya da manyetik moment olarak ta adlandırılır) tek boyutlu bir örgü üzerinde dizilmesinden oluşur. Her bir spin (S) için iki adet yönelim söz konusudur. Uygulanan bir dış manyetik alana spinler ya paralel konumda ya da anti paralel durumda bulunabilirler. Böyle bir sistem 1925 yılında Lenz'in doktora öğrencisi Alman fizikçi Ernst Ising tarafından ferromanyetizma problemi için önerildi (Ising 1925). Bu nedenle, model önceleri "Lenz-Ising modeli" daha sonrasında da sadece " $S = 1/2$ Ising modeli" adıyla anıldı. Yapılan analitik çözüm sonucunda modelin tek-boyutta faz dönüşümü vermediği anlaşıldı. İlerleyen yıllarda "Transfer Matris Metodu" (TMM) olarak bilinen farklı bir çözüm yöntemi ile Ising modelinin tam çözümleri gerçekleştirildi. Çözüm sonuçlarına göre, yine dimerleşmemiş iki-boyutlu örgü dışında faz geçişi gözlenmedi (Kramers ve Wannier 1941; Onsager 1944). Ancak, 1980 'li yıllarda matris metodunun tek-boyutlu dimerleşmiş örgü üzerinde tanımlanan Ising zincirlerine uygulanmasıyla tek-boyutta homojen ve dimer fazları arasında faz dönüşümleri tespit edildi (Mijatovic ve Milosevic 1981). Bütün bu temel çalışmalar, transfer matris metodunun birçok farklı spin zincirlerine uygulanmasında öncülük etmiştir (Albayrak ve Keskin 2000; Fireman vd 2003; Ghulghazaryan vd 2007; Martínez-Garcilazo vd 2009). Literatürde $S = 1/2$ Ising modelinden başka tek-boyutlu örgü üzerinde tanımlanan ve TMM ile tam olarak çözümlenebilen bazı basit spin sistemleri şu şekilde özetlenebilir (Strečka ve Jascur 2015):

Blume-Capel (BC) modeli, yukarıda belirtilen $S = 1/2$ Ising modelinden farklı olarak, üç durumlu ve iki düzen parametrelili bir $S = 1$ Ising sistemidir. Hamiltonyeninde spin-spin etkileşme ve kristal alan terimleri bulunur. İlk olarak M. Blume ve H. W. Capel tarafından birbirinden bağımsız olarak ${}^3\text{He}-{}^4\text{He}$ karışımlarının termodinamik davranışını incelemek için geliştirildi (Blume 1966; Capel 1966). Daha sonra aynı model birçok fiziksel kooperatif olayın incelenmesi için kullanıldı. Örneğin basit ve ikili sıvıların yoğunlaşması ve katılaşması, ikili ve üçlü akışkanlarda üçlü kritik noktaların incelenmesi, re-entrant olaylar, donma, manyetik düzenlilik, düzenli ve düzensiz geçişler, ikili ve üçlü akışkanların incelenmesi, yarı kararlı ve kararsız durumlar gibi birçok fiziksel kooperatif olayın termodinamik özelliklerinin açıklanması bu model kullanılarak yapıldı. $S = 1$ BC

modelinin dengeli durum davranışı TMM gibi tam çözümü netice veren etkili bir teknik dışında birçok farklı yaklaşık yöntemle de incelendi. Kullanılan bu yaklaşımlardan bazıları: kapalı form yaklaşım metotları, Bragg-Williams yaklaşımı, ortalama (moleküler) alan teorisi, Bethe-Peierls yaklaşımı, sabit-çiftlenim yaklaşımı, kümesel değişim metodu, Monte-Carlo simülasyonu, renormalizasyon grup teorisi, etkin alan teorisi, seriye açma metodu ve lineer zincir yaklaşımı şeklinde sıralanabilir.

Ising modellerinin gelişmesiyle birlikte BC modeli gibi tek tip spin sistemlerinin yanı sıra karma spin sistemlerini içeren çalışmalar da artmaya başladı. Son zamanlarda iki alt örgülü karma spin sistemleri, tek tip spinli sistemlerle karşılaştırıldığında daha az yer değiştirme simetrisine sahip olmasından dolayı tek spin sistemlerine göre çok daha ilgi çekicidir ve tek tip spin sistemlerinde gözlemlenmeyen bir çok fiziksel olayı sergilemektedirler (Fu vd 2006). Ayrıca tek spin sistemlerine göre çok daha zengin faz diyagramları vermektedirler. Karma spin sistemleri üzerine sadece teorik amaçla değil, moleküler temelli manyetik malzemeleri incelemek amacıyla deneysel olarak da çalışılmıştır. Karma spinli Ising modelleri, akademik araştırmalara yaptığı katkı kadar, teknolojik gelişmeler için önemli özelliklere ve yarara sahip olan ferrimanyetik maddelerin incelenmesinde de önemli bir rol oynar. Yarım sayılı ve tam sayılı spin sistemlerini içeren karma spin Ising modelleri yoğun olarak çalışılmıştır. Bunlara örnek olarak karma $S = 1/2$ ve $S = 1$ Ising sistemi (Zukovic ve Bobak 2015), karma $S = 1$ ve $S = 3/2$ Ising sistemi (Jabar vd 2017) verilebilir.

Yukarıda kısaca açıklanan $S = 1/2$ Ising, $S = 1$ BC ve karma-spin Ising modelleri istatistiksel mekanikte bilinen birçok çözümleme tekniği ile incelendiği halde bu modellere ait termodinamik parametre uzayının Riemann tipi (Öklit dışı) metrik yapısı tam olarak araştırılmamıştır. Bu modeller dışında, eğrilik bağıntısının tam formülünden (Janyszek ve Mrugala 1989) ilhamla Ising modeli ve bunların birçok değişik varyasyonları yakın zamanda geometrik açıdan yeniden ele alınmıştır (Brody ve Rivier 1995; Brody ve Ritz 2003; Janke vd 2004; Heidari ve Ghorbani 2012; Dey vd 2013; Mirza ve Talaei 2013; Ruppeiner ve Bellucci 2015; Erdem 2018a; Erdem 2018b; Erdem 2019). Ancak bunların hiçbirinde skaler eğrilik diyagramları ve bunların yüzey yapısı hakkında yeterli bilgi sunulmamıştır.

Bu tezde ise öncelikle yukarıda detaylı olarak açıklanan herbir spin zinciri için Strečka ve Jascur (2015) tarafından TMM kullanılarak türetilmiş olan Gibbs serbest enerjisi yardımıyla birer metrik tensör elde edildi. Daha sonra, metrik tensör elemanları kullanılarak bu zincirlere ait parametre uzayının Riemann eğrilik skaleri türetildi. Özellikle eğrilik diyagramları elde edilerek bunların analizi yapıldı.

Bu giriş bilgilerinden sonra, ikinci bölüm’de TMM ile tezde çalışılacak olan spin zincirleri ve bunların tam çözümleri Strečka ve Jascur ’un (2015) derleme çalışması ışığında incelendi. Üçüncü bölüm’de kullanılan geometrik yöntem tanıtıldı ve metrik elemanları ile eğrilik skalerinin nasıl türetildiği üzerinde duruldu. Dördüncü bölüm’de ise herbir spin zinciri için eğrilik skaleri elde edildi ve bu niceliğin bağlı olduğu değişkenlere göre fonksiyonel davranışı grafiksel olarak sunuldu. Yine bu bölümde eğrilik skalerinin üç boyutlu yüzey yapısı (eğrilik diyagramları) görüntülendi ve bu yapıda pik’lerin olup olmadığına bakıldı. Son olarak, beşinci bölümde konu ile ilgili sonuç ve yorum verilerek gelecekte konuyu ilgilendiren düşünceler paylaşıldı.

2. KAYNAK TARAMASI

Bu bölümde istatistik mekanikte en çok çalışılan bazı Ising spin zincirleri hakkında detaylı bilgi verilecek ve bunların kesin çözümleri üzerinde durulacaktır. Transfer matris metodunun sözkonusu spin zincirlerine uygulanması yakın zamanda Strecka ve Jascur (2015) tarafından yayınlanan bir değerlendirme çalışmasında ele alınmıştır. Biz aşağıdaki alt bölümlerde bu çalışmanın notasyonuna bağlı kalarak tezde çalışılacak olan spin zincirlerini ayrıntı ile açıklayacağız.

Tek-boyutlu Ising spin zincirleri literatürde transfer-matris metodu ile tam olarak çözülebilen spin sistemlerinin başında gelmektedir. Bu sistemler, iki-boyutlu spin sistemlerinden farklı olarak sonlu sıcaklıklarda kritik davranış sergilemezler. Aşağıda manyetik alan varlığında tek tip ve karma spin zincirlerinden 3 tanesi anlatılmıştır.

2.1. Boyuna manyetik alan varlığında spin-1/2 Ising zinciri

Tek boyutlu spin-1/2 Ising modeli, her bir spinin en yakın komşusuyla ve bir dış manyetik alan ile etkileştiği N spinli bir zincirdir. Model kısaca

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - h \sum_{i=1}^N \sigma_i, \quad (2.1)$$

Hamiltoniyeni ile ifade edilir. Burada $\sigma_i = \pm 1/2$ i 'ninci örgü noktasına yerleşmiş olan Ising spini için spin değişkeni olarak adlandırılır. J parametresi zincir içerisinde bulunan en yakın komşu spinler arasındaki değiş-tokuş etkileşme enerji sabitidir. h parametresi ise manyetostatik Zeeman enerjisiyle ilgili bir sabit olup $h = -g\mu_B H$ (g elektronik g faktörü, μ_B Bohr manyetonu, H dış manyetik alan) şeklinde tanımlanır. Zincirin topolojisi bir daire olarak düşünülürse $\sigma_{N+1} = \sigma_1$ şeklinde bir periyodik sınır şartı ortaya çıkar.

Bir manyetik alanda spin-1/2 Ising zincirinin tam çözümü, Kramer ve Wannier tarafından geliştirilen Transfer Matris Metodu ile kolayca bulunmuştur (Kramer ve Wannier 1941). Çözüm, kesim (2.2) ve (2.3) 'deki spin zincirlerine taban oluşturması bakımından burada detaylı olarak verilecektir. Metoda göre ilk olarak toplam Hamiltonyen aşağıdaki

gibi en simetrik formda yeniden yazılır:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_i, \quad \mathcal{H}_i = -J\sigma_i\sigma_{i+1} - \frac{h}{2}(\sigma_i + \sigma_{i+1}). \quad (2.2)$$

Bölüşüm fonksiyonu ise

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_{i=1}^N \exp(-\beta\mathcal{H}_i) = \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_{i=1}^N \exp\left[\beta J\sigma_i\sigma_{i+1} + \frac{\beta h}{2}(\sigma_i + \sigma_{i+1})\right], \quad (2.3)$$

şeklinde. Burada $\beta = 1/k_B T$. Şimdi elemanları en yakın iki komşu spine (σ_i ve σ_{i+1}) bağlı fonksiyon olan $\mathcal{T}(\sigma_i, \sigma_{i+1})$ şeklinde bir matris tanımlıyoruz. Bu matrisin elemanları

$$\mathcal{T}(\sigma_i, \sigma_{i+1}) = \exp\left[\beta J\sigma_i\sigma_{i+1} + \frac{\beta h}{2}(\sigma_i + \sigma_{i+1})\right], \quad (2.4)$$

şeklinde olup "Transfer Matris" olarak adlandırılır. (2.4) ifadesindeki σ_i ve σ_{i+1} birbirinden bağımsız olarak $\pm 1/2$ değerini alır. Bölüşüm fonksiyonu içindeki üstel terim en yakın komşu spin çiftlerini içeren terimler cinsinden açılırsa

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1/2} \sum_{\sigma_2=\pm 1/2} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1/2} \mathcal{T}(\sigma_1, \sigma_2) \mathcal{T}(\sigma_2, \sigma_3) \dots \mathcal{T}(\sigma_i, \sigma_{i+1}) \dots \mathcal{T}(\sigma_N, \sigma_1), \quad (2.5)$$

formunda bir açılım elde edilir. (2.4) 'deki $\mathcal{T}(\sigma_i, \sigma_{i+1})$ fonksiyonu için spin değişimi adı altında

$$\mathcal{T}(\sigma_i, \sigma_{i+1}) = \mathcal{T}(\sigma_{i+1}, \sigma_i), \quad (2.6)$$

simetrisi geçerlidir ve bu simetri periyodik sınır koşuluyla sağlanan çeviri simetrisi ile uyumludur. Şimdi (2.4) 'deki matris elemanlarının özünü ortaya koyan bir hesaplama yapalım. Ising spin σ_2 'yi hatırlarsak $\mathcal{T}(\sigma_1, \sigma_2)$ ve $\mathcal{T}(\sigma_2, \sigma_3)$ ifadeleri sadece (2.5) denkleminde yan yana ve bundan dolayı, bu ürün ile ortaya çıkan ifadelerden bağımsız olarak Ising spin σ_2 'nin mevcut iki durumu üzerinden toplam yapıldıktan sonra sonuç olarak aşağıdaki Boltzman ağırlığı elde edilir:

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma_2=\pm 1/2} \mathcal{T}(\sigma_1, \sigma_2) \mathcal{T}(\sigma_2, \sigma_3) &= \exp\left[\beta J\sigma_2(\sigma_1 + \sigma_3) + \frac{\beta h}{2}(\sigma_1 + 2\sigma_2 + \sigma_3)\right] \\ &= \exp\left[\frac{\beta h}{2}(\sigma_1 + \sigma_3)\right] \left\{ \exp\left[\frac{\beta J}{2}(\sigma_1 + \sigma_3) + \frac{\beta h}{2}\right] \right. \\ &\quad \left. + \exp\left[\frac{-\beta J}{2}(\sigma_1 + \sigma_3) - \frac{\beta h}{2}\right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Şimdi (2.4) ifadesi ile verilen matris elemanlarını oluşturalım:

$$\begin{aligned}\mathcal{T}(\sigma_{+1/2}, \sigma_{+1/2}) &= e^{\frac{\beta J}{4} + \frac{\beta h}{2}}, \\ \mathcal{T}(\sigma_{+1/2}, \sigma_{-1/2}) &= e^{-\frac{\beta J}{4}}, \\ \mathcal{T}(\sigma_{-1/2}, \sigma_{+1/2}) &= e^{-\frac{\beta J}{4}}, \\ \mathcal{T}(\sigma_{-1/2}, \sigma_{-1/2}) &= e^{\frac{\beta J}{4} - \frac{\beta h}{2}}.\end{aligned}\quad (2.8)$$

Bu matris elemanları uygun şekilde yerleştirilerek aşağıdaki 2×2 'lik kare matris elde edilir:

$$\mathcal{T} = \begin{pmatrix} \mathcal{T}(+, +) & \mathcal{T}(+, -) \\ \mathcal{T}(-, +) & \mathcal{T}(-, -) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\frac{\beta J}{4} + \frac{\beta h}{2}} & e^{-\frac{\beta J}{4}} \\ e^{-\frac{\beta J}{4}} & e^{\frac{\beta J}{4} - \frac{\beta h}{2}} \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

(2.9) σ_i ve σ_{i+1} iki en yakın Ising spininin 4 olası konfigürasyonu ile ilgilidir. $\mathcal{T}(+, -)$ matris elemanı, $\sigma_i = +1/2$, $\sigma_{i+1} = -1/2$ spin konfigürasyonunu hesaba katarak (2.4) tanımından elde edilen Boltzmann faktörü yani önceki spin σ_i 'nin spin konumları için hesap yaptırır. Başka bir ifadeyle, σ_i yerine geçen izdir. $\mathcal{T}(\sigma_i, \sigma_{i+1})$ matrisinde her sıra bir spin ile yer değiştiriyor. Her sütun sonraki spin σ_{i+1} 'in spin durumlarını ifade eder. $\mathcal{T}(\sigma_1, \sigma_2)$ ifadesinde ilk olarak σ_2 spin değişkenine, sonraki spin olduğu için $\mathcal{T}(\sigma_2, \sigma_3)$ ifadesinde ise önceki spin olduğu için dikkat edilmelidir. $\mathcal{T}(\sigma_1, \sigma_2)$ ilk ifadesinde spin σ_2 'nin hesaba katılan spin durumları, 1×2 satır matrisi ve ikinci $\mathcal{T}(\sigma_2, \sigma_3)$ ifadesinde 2×1 sütun matrisi olarak değişir. Sonuç olarak, Ising spin σ_2 'nin spin konfigürasyonları üzerindeki toplamı, satır matrisi $\mathcal{T}(\sigma_1, \sigma_2)$ ve sütun matrisi $\mathcal{T}(\sigma_2, \sigma_3)$ arasındaki bir matris çarpımına eşdeğerdir:

$$\begin{aligned}\sum_{\sigma_2 = \pm \frac{1}{2}} \mathcal{T}(\sigma_1, \sigma_2) \mathcal{T}(\sigma_2, \sigma_3) &= \left(\exp \left[\frac{\beta J}{2} \sigma_1 + \frac{\beta h}{2} \left(\sigma_1 + \frac{1}{2} \right) \right] \exp \left[-\frac{\beta J}{2} \sigma_1 + \frac{\beta h}{2} \left(\sigma_1 - \frac{1}{2} \right) \right] \right) \\ &\quad \begin{pmatrix} \exp \left[\frac{\beta J}{2} \sigma_3 + \frac{\beta h}{2} \left(\sigma_3 + \frac{1}{2} \right) \right] \\ \exp \left[-\frac{\beta J}{2} \sigma_3 + \frac{\beta h}{2} \left(\sigma_3 - \frac{1}{2} \right) \right] \end{pmatrix} \\ &= \exp \left[\frac{\beta h}{2} (\sigma_1 + \sigma_3) \right] \left\{ \exp \left[\frac{\beta J}{2} (\sigma_1 + \sigma_3) + \frac{\beta h}{2} \right] \right. \\ &\quad \left. + \exp \left[-\frac{\beta J}{2} (\sigma_1 + \sigma_3) - \frac{\beta h}{2} \right] \right\}.\end{aligned}\quad (2.10)$$

Dikkat edilirse (2.10) ifadesi yani (matris üzerinden elde edilen sonuç) ile (2.7) denkleminde elde edilen sonuç aynıdır. Yani daha önce σ_2 spin değişkeninin spin durumları üzerindeki basit bir toplama ile elde edilmiş sonuçtur. Ek olarak ilgili matrisin çarpımından sonra elde edilen son ifade (2.10) tanımına göre σ_1 ve σ_3 Ising spinlerine dayalı unsurlar olarak 2×2 'lik $\mathcal{T}^2(\sigma_2, \sigma_3)$ matrisi dikkate alınmalıdır:

$$\sum_{\sigma_2=\pm\frac{1}{2}} \mathcal{T}(\sigma_1, \sigma_2) \mathcal{T}(\sigma_2, \sigma_3) = \mathcal{T}^2(\sigma_1, \sigma_3). \quad (2.11)$$

Ising spinleri kümesinin $\{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots, \sigma_N\}$ spin durumları üzerindeki toplamalar, sonuçta elde edilen matris çarpımları olarak kabul edilebilir. Böylece (2.5) bölüşüm fonksiyonu

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\sigma_1=\pm\frac{1}{2}} \sum_{\sigma_2=\pm\frac{1}{2}} \dots \sum_{\sigma_N=\pm\frac{1}{2}} \mathcal{T}(\sigma_1, \sigma_2) \mathcal{T}(\sigma_2, \sigma_3) \dots \mathcal{T}(\sigma_i, \sigma_{i+1}) \dots \mathcal{T}(\sigma_N, \sigma_1) \\ &= \sum_{\sigma_1=\pm\frac{1}{2}} \sum_{\sigma_3=\pm\frac{1}{2}} \dots \sum_{\sigma_N=\pm\frac{1}{2}} \mathcal{T}^2(\sigma_1, \sigma_3) \dots \mathcal{T}(\sigma_i, \sigma_{i+1}) \dots \mathcal{T}(\sigma_N, \sigma_1) = \sum_{\sigma_1=\pm\frac{1}{2}} \mathcal{T}^N(\sigma_1, \sigma_1) \\ &= \mathcal{T}^N(+, +) + \mathcal{T}^N(-, -) = \text{Tr} \mathcal{T}^N, \end{aligned} \quad (2.12)$$

şeklinde yazılabilir. Bu prosedürün her adımında $\mathcal{T}$ matris çarpımı, daha çok spinlerden biri ile ilgili konfigürasyonların toplamına karşılık gelir. Bu yüzden $\mathcal{T}$ matrisi transfer matrisi olarak adlandırılır. Yani bir spinden başka bir (komşu) spine bağımlılığını transfer eder. Ayrıca ilk spin σ_1 'in spin durumları üzerinden gerçekleştirilen son toplamaların $\mathcal{T}^N$ matrisinin bir izinin (trace) alınmasına eşdeğer olması da denklem (2.12) 'den kolayca anlaşılabilir. Çünkü ana köşegeninde $\mathcal{T}^N$ matrisinin elemanları üzerinde bir toplama yapılıyor. Boyuna bir manyetik alanda spin-1/2 Ising zinciri için kesin çözümü bulma problemi periyodik sınır koşulu sağlandığında şimdiye kadar bilinmeyen $\mathcal{T}^N$ matrisinin bir izinin hesaplamasına indirgenir. Bu aşamada $\mathcal{T}^N$ matrisinin bir izini hesaplamak için ürünün döngüsel bir permütasyonuna göre izin değişmezliğinin kullanılması çok uygundur (kare matrisin 3 elemanı A, B, C). Örneğin dairesel permütasyonların izleri aynıdır: $\text{Tr}(ABC) = \text{Tr}(BCA) = \text{Tr}(CAB)$. Bu düşünceyle üniter matris U ve onun tersi U^{-1} , $\mathcal{T}$ transfer matrisini diagonal forma dönüştürmek için kullanılabilir:

$$U^{-1} \mathcal{T} U = \Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix}, \quad (2.13)$$

(2.12) denkleminde bu ürünleri yerleştirdikten sonra bölüşüm fonksiyonu

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} \mathcal{T}^N = \text{Tr}(\mathcal{T} \mathcal{T} \dots \mathcal{T}) = \text{Tr}(U U^{-1} \mathcal{T} U U^{-1} \mathcal{T} U \dots U^{-1} \mathcal{T}) \\ &= \text{Tr}(U^{-1} \mathcal{T} U U^{-1} \mathcal{T} U \dots U^{-1} \mathcal{T} U) = \text{Tr}(\Lambda \Lambda \dots \Lambda) \\ &= \text{Tr} \Lambda^N, \end{aligned} \quad (2.14)$$

şeklinde tekrar elde edilir. Bu sonuç benzerlik değişmezliği değil $\mathcal{T}^N$ ve Λ^N matrislerinin aynı ize sahip olduğu anlamına gelir (İz belirli bir üs seçimine bağlı değildir). Matris Λ^N , denklem (2.13) 'deki diagonal matrisin N 'inci kuvvetidir ve dolayısıyla diagonal elemanları Λ matrisinin köşegen elemanlarının basitçe N 'inci kuvvetidir.

$$\Lambda^N = \begin{pmatrix} \lambda_+^N & 0 \\ 0 & \lambda_-^N \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

Bu nedenle, $\text{Tr} \mathcal{T}^N = \text{Tr} \Lambda^N = \lambda_+^N + \lambda_-^N$ istenen izini hesaplamak için Λ diagonal matrisinin elemanlarını bulmak yeterlidir. Bu özdeğer problemi, $\mathcal{T} U = U \Lambda$ üniter dönüşümün yardımıyla aşılabılır. Matris gösterimi

$$\begin{pmatrix} \mathcal{T}(+, +) & \mathcal{T}(+, -) \\ \mathcal{T}(-, +) & \mathcal{T}(-, -) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_+ & a_- \\ b_+ & b_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_+ & a_- \\ b_+ & b_- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix}. \quad (2.16)$$

Daha sonra karakteristik denklemin çözülmesi sağlanır.

$$\mathcal{T} V_{\pm} = \lambda_{\pm} V_{\pm} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} \mathcal{T}(+, +) & \mathcal{T}(+, -) \\ \mathcal{T}(-, +) & \mathcal{T}(-, -) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\pm} \\ b_{\pm} \end{pmatrix} = \lambda_{\pm} \begin{pmatrix} a_{\pm} \\ b_{\pm} \end{pmatrix}. \quad (2.17)$$

Burada $V_{\pm}$, $\mathcal{T}$ transfer matrisinin özvektörlerini ve $\lambda_{\pm}$ özdeğerlerini belirtir. Her ikisi sürekli denklemler aslında yalnızca determinantın sıfır olması durumunda önemsiz olmayan bir çözüme sahip olan homojen lineer denklem sistemidir.

$$|\mathcal{T} - \lambda_i I| = 0. \quad (i \in \{\pm\}) \quad (2.18)$$

Burada I birim matristir. Bu yol ile $\mathcal{T}$ matrisinin özdeğerlerini, $V_{\pm}$ özvektörlerine karşılık gelen açık formu bilmeden hesaplayabiliriz. Her iki özdeğer

$$\begin{vmatrix} e^{\frac{\beta J}{4} + \frac{\beta h}{2}} - \lambda_i & e^{-\frac{\beta J}{4}} \\ e^{-\frac{\beta J}{4}} & e^{\frac{\beta J}{4} - \frac{\beta h}{2}} - \lambda_i \end{vmatrix} = 0, \quad (2.19)$$

determinantı sayesinde

$$\lambda_{\pm} = e^{\frac{\beta J}{4}} \left[\cosh\left(\frac{\beta h}{2}\right) \pm \sqrt{\sinh^2\left(\frac{\beta h}{2}\right) + e^{-\beta J}} \right], \quad (2.20)$$

şeklinde elde edilir. Bu ifadeden açıkça görüleceği gibi $\lambda_+ > \lambda_-$ dir. Sonuç olarak $N \rightarrow \infty$ limitinde, $\lambda_-/\lambda_+ \rightarrow 0$ olacaktır. Böylece sadece λ_+ yani “büyük özdeğer” sistemin bölüşüm fonksiyonunu belirler. Sonuçta (2.10) ve (2.13) denklemlerinden “ termodinamik limit ” $N \rightarrow \infty$ iken;

$$Z = \text{Tr} \mathcal{T}^N = \text{Tr} \Lambda^N = \lambda_+^N + \lambda_-^N, \quad (2.21)$$

olur. Böylece spin başına düşen serbest enerji

$$\begin{aligned} G &= -k_B T \frac{1}{N} \lim_{N \rightarrow \infty} \ln Z = -k_B T \frac{1}{N} \lim_{N \rightarrow \infty} \ln \left(\lambda_+^N + \lambda_-^N \right) \\ &= -k_B T \frac{1}{N} \lim_{N \rightarrow \infty} \ln \left(\lambda_+^N \left[1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right] \right) \\ &= -k_B T \ln \lambda_+, \end{aligned} \quad (2.22)$$

şeklinde türetilir. (2.22) 'ye göre Gibbs serbest enerjisi $T = 0$ hariç tüm sıcaklıklarda pürüzsüz bir şekilde sıcaklığın bir analitik fonksiyonudur. Dolayısıyla, Ising zincirinin TMM ile yapılan tam çözümü sonucu sistemde sonlu sıcaklıklarda faz geçişi olmadığı anlaşılır. Daha açık olarak bu sıcaklıklarda zincir kendiliğinden mıknatıslanma (m) vermez. Böylece m - h düzleminde ortaya çıkan tüm izoterm eğrileri orijinden geçer. Termodinamik bilgimize göre $m = -\frac{\partial G}{\partial h}$ bağıntısından türetilen mıknatıslanma niceliği için elde edilen grafiksel sonuçlar temel düzeydeki birçok referansta ele alınmıştır (Pathria 1996; Huang 1987).

2.2. Boyuna manyetik alan varlığında spin-1 Blume-Capel zinciri

Bu kesimde boyuna manyetik alan varlığında spin-1 Blume-Capel zincirine ait aşağıdaki Hamiltonyeni dikkate alarak transfer matris yaklaşımının bir uygulamasını daha göstereceğiz:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} - d \sum_{i=1}^N S_i^2 - h \sum_{i=1}^N S_i. \quad (2.23)$$

(2.23) eşitliği i inci örgü noktasında üç değerli $S_i = \pm 1, 0$ Ising spin değişkeni içerir. Hamiltonyen denklemindeki etkileşim terimlerinin belirgin bir anlamı vardır. J en yakın

komşu etkileşimi, d tek iyon anisotropisi ve h boyuna manyetik alanı temsil eder. Burada da $S_{N+1} = S_1$ dögüsöl sınır koşulu uygulanır. Spin-1 Blume-Capel zincirinin bölüşüm fonksiyonu için tam çözüm, spin -1/2 Ising zinciri için tanımlanan prosedürü takip eder. Biz bu titiz hesaplamanın yalnızca birkaç adımını göstereceğiz. İlk olarak Hamiltonyen denklemleri (2.23) aşğıdaki gibi simetrik formda tekrar yazılır:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_i, \quad \mathcal{H}_i = -JS_i S_{i+1} - d(S_i^2 + S_{i+1}^2) - \frac{h}{2}(S_i + S_{i+1}), \quad (2.24)$$

ve sonrasında, spin-1 BC zincirinin bölüşüm fonksiyonu aşğıdaki gibi çarpanlara ayrılır:

$$Z = \sum_{S_1=\pm 1,0} \sum_{S_2=\pm 1,0} \dots \sum_{S_N=\pm 1,0} \prod_{i=1}^N \mathcal{T}(S_i, S_{i+1}). \quad (2.25)$$

Burada $\mathcal{T}(S_i, S_{i+1})$ ifadesi

$$\mathcal{T}(S_i, S_{i+1}) = \exp(-\beta \mathcal{H}_i) = \exp \left[\beta JS_i S_{i+1} + \frac{\beta d}{2}(S_i^2 + S_{i+1}^2) + \frac{\beta h}{2}(S_i + S_{i+1}) \right]. \quad (2.26)$$

şeklindedir. Görünüşe göre (2.26) ile 3×3 'lük bir matrisin elemanları belirlenir:

$$\mathcal{T}(S_i, S_{i+1}) = \begin{pmatrix} \mathcal{T}(1, 1) & \mathcal{T}(1, 0) & \mathcal{T}(1, -1) \\ \mathcal{T}(0, 1) & \mathcal{T}(0, 0) & \mathcal{T}(0, -1) \\ \mathcal{T}(-1, 1) & \mathcal{T}(-1, 0) & \mathcal{T}(-1, -1) \end{pmatrix}. \quad (2.27)$$

Spin-1 BC zincirinin bölüşüm fonksiyonu için türetilmiş olan (2.25) 'deki spin durumları üzerinde sıralı bir toplamın ilgili transfer matrislerinin bir çarpımına tekabül edeceği açıktır. Bu gerçek sayesinde bölüşüm fonksiyonu, (2.27) matrisinin λ_i özdeğerlerinden kolayca hesaplanabilir:

$$Z = \sum_{S_1=\pm 1,0} \mathcal{T}^N(S_1, S_1) = \text{Tr} \mathcal{T}^N = \sum_{i=1}^N \lambda_i^N. \quad (2.28)$$

(2.26) ve (2.27) ile tanımlanan transfer matrisin 3 özdeğerinin son ifadelerini gösterelim:

$$\lambda_i = r + 2\text{sgn}(q)\sqrt{p}\cos \left[\psi + (i-1)\frac{2\pi}{3} \right], \quad (2.29)$$

burada

$$\text{sgn}(q) = \begin{cases} -1, & q < 0 \\ 1, & q \geq 0 \end{cases}, \quad (2.30)$$

ve r, p ve q parametreleri aşağıda gösterildiği gibidir:

$$\begin{aligned}
 r &= \frac{1}{3}[1 + 2\exp(\beta J + \beta d)\cos(\beta h)], \\
 p &= \frac{1}{4}(r - 1)^2 + \frac{1}{3}\exp(2\beta J + 2\beta d)\sinh^2(\beta h) \\
 &\quad + \frac{1}{3}\exp(-2\beta J + 2\beta d) + \frac{2}{3}\exp(\beta d)\cos(\beta h), \\
 q &= r^3 - \exp(\beta J + 2\beta d) + \exp(-\beta J + 2\beta d) \\
 &\quad + r\exp(\beta d)\cos(\beta h) + (1 - r)\exp(2\beta d)\sinh(2\beta J) \\
 &\quad - r\exp(\beta J + \beta d)\cos(\beta h), \\
 \psi &= \frac{1}{3}\arctan\left(\frac{\sqrt{p^3 - q^2}}{q}\right). \tag{2.31}
 \end{aligned}$$

$N \rightarrow \infty$ termodinamik limitinde, spin-1 BC zinciri için spin başına Gibbs serbest enerji, bölüşüm fonksiyonu veya transfer matrisin en büyük özdeğeri $\lambda_{max} = \max(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$ cinsinden basitçe şöyle verilir:

$$G = -k_B T \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z = -k_B T \ln \lambda_{max}. \tag{2.32}$$

Dış alanın yokluğunda ($h = 0$) transfer matris özdeğerlerinden en büyüğünün analitik formülü aşağıdaki çok daha basit forma indirgenir:

$$\lambda_{max} = \frac{1}{2}[1 + 2\exp(\beta d)\cos(\beta J) + \sqrt{[1 - 2\exp(\beta d)\cosh(\beta J)]^2 + 8\exp(\beta d)}]. \tag{2.33}$$

Açıkcası en büyük transfer matris özdeğeri olan (2.33) bağıntısı ve ayrıca bunun türevlerinden herhangi biri sıcaklığın oldukça basit bir analitik fonksiyonudur. İlgili Gibbs serbest enerjisi için de durum aynıdır. Bu sonuç, aynen spin-1/2 Ising zinciri için daha önce belirtmiş olduğumuz gibi, spin-1 BC zincirinde de sıcaklık faz geçişinin olmadığı hakkında son derece iyi bir kanıt sağlar.

2.3. Boyuna manyetik alan varlığında karma-spin Ising zinciri

Son olarak karma spin-1/2 ve spin-1 Ising zincirini, transfer matris yönteminin sunduğu genel şema ile tam olarak çözülebilen tek boyutlu bir spin modelinin son örneği olarak ele alacağız. Tek eksen, tek iyon anizotropili karma spin-1/2 ve spin-1 Ising zinciri için Hamiltonyen boyuna manyetik alan varlığında şöyle tanımlanır:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N S_i(\sigma_i + \sigma_{i+1}) - d \sum_{j=1}^N S_j^2 - h_A \sum_{i=1}^N \sigma_i - h_B \sum_{j=1}^N S_j. \tag{2.34}$$

Burada $\sigma_i = \pm 1/2$ ve $S_j = \pm 1, 0$ sırasıyla i 'inci ve j 'inci örgü noktalarında bulunan spin-1/2 ve spin-1 parçacıkları için spin değişkenleridir. İlk toplam, en yakın komşu spin-1/2 ve spin-1 parçacıkları arasındaki J etkileşimini hesaba katar. ikinci toplam spin-1 parçacıklarına etki eden tek eksen-tek iyonlu anisotropiyi (d) dikkate alırken, üçüncü ve dördüncü toplamlar sırasıyla h_A ve h_B boyuna manyetik alanlarda spin-1/2 ve spin-1 parçacıklarının Zeeman enerjisini hesaplar. Ayrıca Hamiltonyen (2.34) ile tanımlanan karma spin zincirinin zincir eksenini boyunca düzenli olarak değişen iki farklı spin (biri spin-1/2 parçacığı ve diğeri spin-1 parçacığı) içerdiği, bununla birlikte periyodik sınır koşulunun $\sigma_{N+1} = \sigma_1$ geçerli olduğu görülür. Şimdi Hamiltonyen toplamını önceki zincirler gibi simetrik formda gösterelim:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_i,$$

$$\mathcal{H} = -JS_i(\sigma_i + \sigma_{i+1}) - d(S_i^2 + S_{i+1}^2) - \frac{h_A}{2}(\sigma_i + \sigma_{i+1}) - h_B S_i. \quad (2.35)$$

Bu gösterim bize karma spin-1/2 ve spin-1 Ising zincirinin bölüşüm fonksiyonunu çarpanlarına ayrılmış formda yazmamıza olanak sağlar. Yani

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1/2} \sum_{\sigma_2=\pm 1/2} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1/2} \prod_{i=1}^N \sum_{S_i=\pm 1,0} \exp(-\beta \mathcal{H}_i)$$

$$= \sum_{\sigma_1=\pm 1/2} \sum_{\sigma_2=\pm 1/2} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1/2} \prod_{i=1}^N \mathcal{T}(\sigma_i, \sigma_{i+1}). \quad (2.36)$$

Yukarıda spin-1 parçacıklarının spin serbestlik derecelerini spin-1/2 parçacıklarının spin serbestlik dereceleri üzerinde bir toplama yapmadan önce birbirinden bağımsız olarak ele aldık. Sonuç olarak, spin-1 değişkeninin spin durumları üzerindeki basit toplama işlemi, 2×2 transfer matrisinin fiziksel anlamı olan etkili Boltzmann ağırlığına yol açar:

$$\mathcal{T}(\sigma_i, \sigma_{i+1}) = \sum_{S_i=\pm 1,0} \exp(-\beta \mathcal{H}_i)$$

$$= \exp\left[\frac{\beta h_A}{2}(\sigma_i + \sigma_{i+1})\right] \left[1 + 2\exp(\beta d)\cosh[\beta J(\sigma_i + \sigma_{i+1})]\right]. \quad (2.37)$$

Sol-sağ simetri sayesinde (2.37) matrisi sadece üç farklı elemandan oluşur:

$$\mathcal{T}(\sigma_i, \sigma_{i+1}) = \begin{pmatrix} \mathcal{T}(+, +) & \mathcal{T}(+, -) \\ \mathcal{T}(-, +) & \mathcal{T}(-, -) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_1 & V_3 \\ V_3 & V_2 \end{pmatrix}. \quad (2.38)$$

yazılır. Burada

$$\begin{aligned} V_1 &= \mathcal{T}(+, +) = \exp\left(\frac{\beta h_A}{2}\right) \left[1 + 2\exp(\beta d) \cosh(\beta J)\right], \\ V_2 &= \mathcal{T}(-, -) = \exp\left(\frac{-\beta h_A}{2}\right) \left[1 + 2\exp(\beta d) \cosh(\beta J)\right], \\ V_3 &= \mathcal{T}(+, -) = \mathcal{T}(-, +) = 1 + 2\exp(\beta d), \end{aligned} \quad (2.39)$$

şeklindedir. Şimdi denklem (2.37) 'deki spin-1/2 parçacıklarının spin serbestlik dereceleri üzerinden alınan ardışık toplama işlemi ile devam edelim. Bu işlem, bölüşüm fonksiyonunun (2.36) matrisine ait iki özdeğeri cinsinden ifade edilmesine olanak sağlar.

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\sigma_1=\pm 1/2} \sum_{\sigma_2=\pm 1/2} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1/2} \prod_{i=1}^N \mathcal{T}(\sigma_i, \sigma_{i+1}) \\ &= \sum_{\sigma_1=\pm 1/2} \mathcal{T}^N(\sigma_1, \sigma_1) = \text{Tr} \mathcal{T}^N = \lambda_+^N + \lambda_-^N. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Bölüşüm fonksiyonu (2.40) içerisinde bulunan iki özdeğer $\lambda_{\pm}$ sırasıyla (2.38) matrisine ait özdeğer problemi çözülerek hesaplanabilir:

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2} \left[V_1 + V_2 \pm \sqrt{(V_1 - V_2)^2 + 4V_3^2} \right]. \quad (2.41)$$

Termodinamik limit'de, $N \rightarrow \infty$, spin başına düşen Gibbs serbest enerjisi yalnızca en büyük transfer matris özdeğeri (λ_+) cinsinden ifade edilebilir:

$$G = -k_B T \frac{1}{N} \lim_{N \rightarrow \infty} \ln Z = -k_B T \ln \lambda_+. \quad (2.42)$$

(2.42) bağıntısı ve onun sıcaklık türevlerinden hiçbirisi sonlu sıcaklıklarda tekillik göstermez. Bu spin zincirinde faz geçişinin olmadığına tekrar işaret eder.

3. MATERYAL VE METOT

3.1. n -boyutlu termodinamik faz uzayının Riemann geometrisi ve eğrilik skaleri

Herhangi bir fiziksel sistemin n -boyutlu termodinamik durum uzayı (veya Riemann manifold'u) birbirinden bağımsız n tane termodinamik değişkenlerden oluşan bir parametre takımı ($q^1, q^2, \dots, q^n$) ile temsil edilir. Termodinamik metrik geometride, parametre uzayındaki sonsuz küçük çizgi (veya yay) uzunluğu, g_{ij} kovaryant metrik tensörü yardımıyla tanımlanır:

$$dl^2 = g_{ij} dq^i dq^j. \quad (3.43)$$

Ruppeiner'e (1995) göre, metrik tensör elemanları

$$g_{ij} = -\beta \partial_i \partial_j \phi, \quad (3.44)$$

bağıntısından hesaplanır. Burada $\beta = 1/k_B T$, $\partial_i = \partial/\partial q^i$ ve ϕ spin başına termodinamik potansiyel şeklinde tanımlanır. İlgili uzaya ait eğrilik skalerini bulmak için öncelikle verilen yay elemanını oluşturan g_{ij} metrik elemanlarından yararlanarak

$$\Gamma_{jk}^i = \frac{1}{2} g^{il} (\partial_k g_{lj} + \partial_j g_{lk} - \partial_l g_{jk}), \quad (3.45)$$

formülü ile ifade edilen Christoffel sembolleri (bağlantı katsayıları) hesaplanır. Burada g^{il} kontravaryant metrik tensör bileşenleridir. Γ_{jk}^i sembollerinden yararlanarak

$$R_{jkl}^i = \partial_k \Gamma_{jl}^i - \partial_l \Gamma_{jk}^i + \Gamma_{mk}^i \Gamma_{jl}^m - \Gamma_{ml}^i \Gamma_{jk}^m, \quad (3.46)$$

Riemann tensörü bulunur. Bu dördüncü ranktan tensörün kontraksiyonu yolu ile ikinci ranktan Ricci tensörü elde edilir:

$$R_{ij} = R_{inj}^n. \quad (3.47)$$

Daha sonra tekrar bir kontraksiyon işlemi ile eğrilik skaleri bulunur:

$$R = g^{ij} R_{ij} = R_i^i. \quad (3.48)$$

(3.48) skalerine "Ricci Skaleri" de denir ve ilgili termodinamik faz uzayının eğriliğinin bir ölçüsüdür. Bu ölçüyü incelemek amacıyla bazı klasik ve kuantum spin sistemleri için Ricci skaleri yukarıda verilen basamaklar kullanılarak türetilmiştir (Kaviani ve Dalafi-Rezaie 1999; Erdem 2018a; Erdem 2018b; Erdem 2019).

3.2. İki-boyutlu termodinamik faz uzayının Riemann geometrisi ve eğrilik skaleri

Termodinamik faz uzayı iki-boyutlu bir uzay ($n = 2$) olarak seçilirse, bu uzayda sonsuz küçük yay uzunluğu (3.43) tanımından, $g_{12} = g_{21}$ özelliği kullanılarak

$$dl^2 = g_{11}(dq^1)^2 + 2g_{12}dq^1dq^2 + g_{22}(dq^2)^2, \quad (3.49)$$

şeklinde elde edilir. Eğrilik skaleri, diagonal metrikler için

$$R(q^1, q^2) = \frac{1}{\sqrt{g}} \left[\frac{\partial}{\partial q^1} \left(\frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial g_{22}}{\partial q^1} \right) + \frac{\partial}{\partial q^2} \left(\frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial g_{11}}{\partial q^2} \right) \right], \quad (3.50)$$

bağıntısından da hesaplanabilir. Şayet, metrik diagonal değilse eğrilik skaleri için

$$R(q^1, q^2) = -\frac{1}{\sqrt{g}} \left[\frac{\partial}{\partial q^1} \left(\frac{g_{12}}{g_{11}\sqrt{g}} \frac{\partial g_{11}}{\partial q^2} - \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial g_{22}}{\partial q^1} \right) + \frac{\partial}{\partial q^2} \left(\frac{2}{\sqrt{g}} \frac{\partial g_{12}}{\partial q^1} - \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial g_{11}}{\partial q^2} - \frac{g_{12}}{g_{11}\sqrt{g}} \frac{\partial g_{11}}{\partial q^1} \right) \right], \quad (3.51)$$

formülü kullanılır. Bu iki bağıntıda $g = g_{11}g_{22} - g_{12}^2$ şeklindedir (Ruppeiner 1995). (3.50) veya (3.51) ile yapılan eğrilik hesabı, genellikle iki parametrenin kullanıldığı akışkan sistemlerde daha yaygın olarak tercih edilen bir yöntemdir (May ve Mausbach 2012; Ruppeiner 2012; Ruppeiner vd 2012; May vd 2015; Ruppeiner vd 2015).

Tezde incelenen spin zincirleri için serbest enerji bağıntısı indirgenmiş enerji sabitleri cinsinden türetildiğinden termodinamik durum uzayı bu sabitler ile temsil edildi (Strečka ve Jaščur 2015). Seçilen Riemann manifoldu iki-boyutlu olmasından ve metrik elemanları diagonal olmamasından dolayı eğrilik skaleri (3.51) bağıntısı yardımıyla türetildi.

3.3. Eğrilik skaleri ve R - diyagramları

Eğrilik skaleri bir sistemin karmaşıklığının bir ölçüsü olarak düşünülür ve faz geçişlerine geometrik açıdan bakılmasında önemli bir rolü vardır. Bu bağlamda $R = 0$ durumu düz geometriye ve etkileşmesiz bir sisteme karşılık gelir. $R > 0$ veya $R < 0$ olduğunda ise metrik düz değildir ve fiziksel model etkileşmeli bir sistemdir. Diğer taraftan, skaler eğrilik diyagramları (R -diyagramları olarak ta adlandırılır) iki değişkenli bir $R(q^1, q^2)$ fonksiyonunun üç-boyutlu bir grafiksel gösterimidir. Bu gösterimde, R niceliğinin yüzey yapısı açıkça gözlenebilir ve bu vesile ile işareti açıkça tespit edilebilir.

Skaler eğriliğin işaretinin spinler arası etkileşmelerin cinsinin tespitinde önemli bir rolü vardır. $R = 0$ durumunda ideal bir spin sistemi sözkonusu olacaktır. Ayrıca, bu fonksiyon q^1 ve q^2 değişkenlerinin eksen seçilmesiyle iki-boyutta "kontur çizgileri" şeklinde de sunulabilir (Ruppeiner vd 2015).



4. BULGULAR VE TARTIŞMA

4.1. $S = 1/2$ Ising zinciri için eğrilik skalerinin türetilmesi ve R -diyagramları

Eğrilik skalerini türetebilmek amacıyla önce Ising zinciri için iki-boyutlu bir $(q^1, q^2) = (x, y)$ manifoldu tanımlanır. Burada $x = \beta J$ ve $y = \beta h$ şeklinde seçilir ve (2.20) 'deki λ_+ özdeğeri (dolayısıyla (2.22) 'deki Gibbs serbest enerji bağıntısı) bu iki değişken cinsinden yeniden yazılır. Bu değişikliğe bağlı olarak (3.44) eşitliğindeki metrik elemanları denklem (2.22) yardımıyla aşağıdaki gibi elde edilir:

$$\begin{aligned} g_{11} &= \frac{\partial^2 \ln \lambda_+}{\partial x^2} = \frac{1}{4} \left[\frac{e^{-x}(2b^3 - 2b + e^{-x}b + 2ab^2 - 2a)}{(b+a)^2(b^2 - 1 + e^{-x})^{3/2}} \right], \\ g_{12} &= \frac{\partial^2 \ln \lambda_+}{\partial x \partial y} = \frac{1}{4} \left[\frac{e^{-x}(1 - b^2)^{1/2}}{a^3} \right], \\ g_{22} &= \frac{\partial^2 \ln \lambda_+}{\partial y^2} = \frac{1}{4} \left[\frac{e^{-x}b}{a^3} \right]. \end{aligned} \quad (4.52)$$

Burada

$$\begin{aligned} a &= \sqrt{\cosh^2\left(\frac{y}{2}\right) - 1 + e^{-x}}, \\ b &= \cosh\left(\frac{y}{2}\right). \end{aligned} \quad (4.53)$$

(4.52) metrik bileşenlerinin (3.51) eşitliğinde kullanılması sonucu eğrilik skaleri için aşağıdaki bağıntı türetilir:

$$\begin{aligned} R &= \frac{1}{(2b^3 - 2b + e^{-x}b + 2ab^2 - 2a)^2} \left[(b+a)^2(b^2 - 1 + e^{-x})(-4 + 12e^{-x} - 44e^{-x}ab \right. \\ &\quad + 28e^{-2x}ab + 196e^{-x}b^3a - 83e^{-2x}ab^3 + 7b^3e^{-3x}a + 112b^7ae^{-x} \\ &\quad - 264e^{-x}b^5a - 4be^{-3x}a + 56e^{-2x}ab^5 + 396b^4e^{-x} - 408b^6e^{-x} + 144b^8e^{-x} \\ &\quad - 144b^2e^{-x} + 64b^9a - 208b^7a + 244b^5a - 120b^3a + 20ba + b^2e^{-4x} \\ &\quad - 26b^2e^{-3x} - 201e^{-2x}b^4 + 109e^{-2x}b^2 + 104e^{-2x}b^6 + 25e^{-3x}b^4 + 64b^{10} - 240b^8 \\ &\quad \left. + 340b^6 - 220b^4 + 4e^{-3x} - 12e^{-2x} + 60b^2) \right]. \end{aligned} \quad (4.54)$$

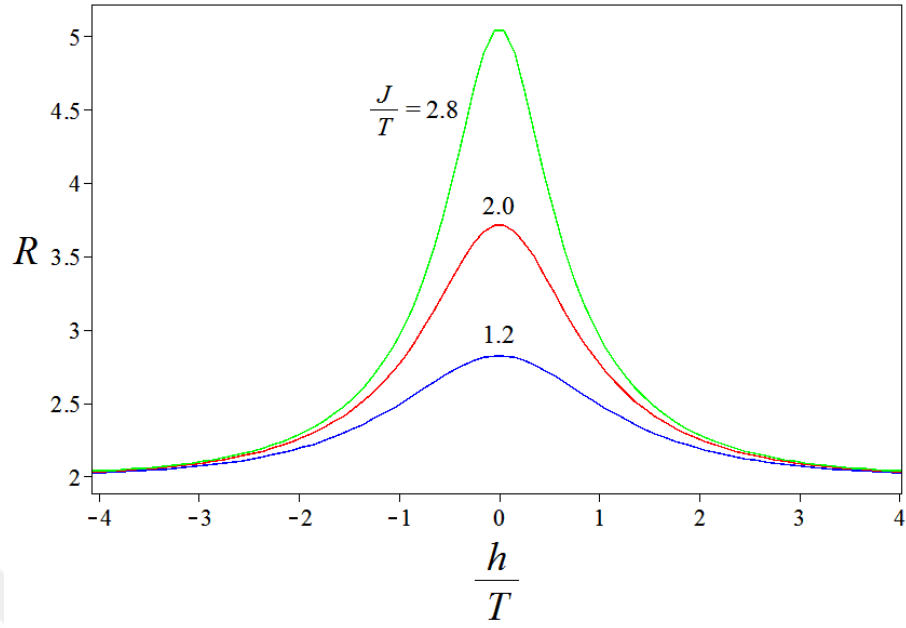
(4.54) bağıntısı ile açık olarak tanımladığımız eğrilik skaleri, daha önce tek-boyutlu Ising zincirini konu alan bir çok çalışmada sunulan sonuç ile karşılaştırıldığında daha uzun bir

görünüm içinde olduğu anlaşılır (Janyszek ve Mrugała (1989), Brody ve Ritz 2003, Heidari ve Ghorbani 2012, Dey vd 2013). Aşağıda da görüleceği gibi karşılaştırma amacıyla Janyszek ve Mrugała (1989) 'nın grafiksel sonuçları dikkate alınarak hesaplamalarımızı şekillendirdik. Hesaplamalarda kolaylık olması bakımından $k_B = 1$ olarak alındı.

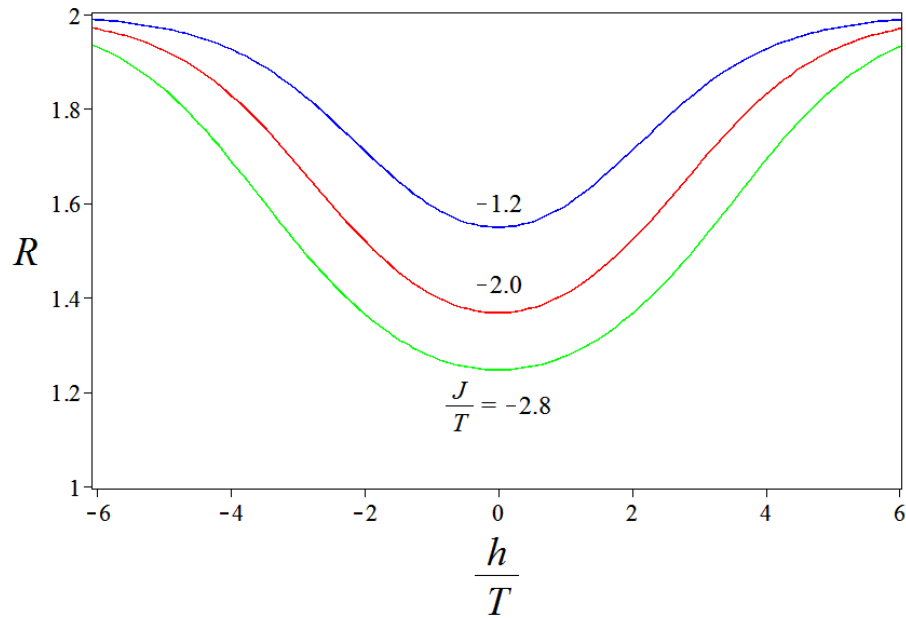
Bağıntı (4.54) 'de $x = J/T$ ve $y = h/T$ değişkenlerine bağlı bir fonksiyon şeklinde ifade edilen eğrilik skaleri ile R diyagramının çizimine başlanmadan önce pozitif x ($J > 0$, ferromagnetik etkileşme) ve negatif x ($J < 0$, antiferromagnetik etkileşme) değerleri için R 'nin h/T ile değişimi incelendi. R 'nin h/T 'ye bağlılığı önce $J/T = 1.2, 2.0$ ve 2.8 değerlerine karşılık gelen üç değişik renkteki eğri ile Şekil 4.1 'de gösterilmiştir. Daha sonra da $J/T = -1.2, -2.0$ ve -2.8 değerlerine karşılık gelen yine üç değişik renkteki eğri ile Şekil 4.2 'de gösterildi. Şekil 4.1 ve 4.2 'ye göre bu iki etkileşme türünde farklı davranışlar ortaya çıkar. Şekil 4.1 'de görüldüğü gibi, sıfır manyetik alanda tüm eğriler bir maksimum değere (yani bir tepeye) sahip olmakla birlikte J enerjisinin artmasıyla tepe değeri de büyür. Diğer taraftan, Şekil 4.2 'ye göre eğrilik skaleri $h = 0$ 'da minimum değere ulaşır. Tüm eğriler h 'ye göre daima pozitif değerler alır. Bu nedenle R manyetik alan h 'nin yöneliminden bağımsızdır ve $h = 0$ düşey doğrusunun her iki tarafında farklı yöne yönelmiş ancak aynı büyüklükteki manyetik alanlarda aynı değere sahiptir. Dolayısıyla R simetrik bir fonksiyon durumundadır. Bu sonuç kısaca $R(-h) = R(h)$ şeklinde ifade edilir.

Yukarıdaki analizlerden sonra, Şekil 4.3 ve 4.4 'te sırasıyla $J > 0$ ve $J < 0$ durumları için R 'nin sıcaklıkla değişimi verildi. Her iki şekilde sürekli, kesikli ve noktalı eğriler sırasıyla $h = 0, h = 0.1$ ve $h = 0.2$ durumlarına karşılık gelmektedir. $h = 0$ durumunda seçilen ve $J > 0$ şartını sağlayan tüm J sayılarında eğrilik skaleri, $T = 0$ yakınılarında sonsuza ıraksar. Diğer taraftan $h \neq 0$ durumlarında (kesikli ve noktalı eğriler) R skaleri T 'nin azalması sonucu ortaya çıkan küçük artıştan sonra bir tepe değerine ulaşır ve sonra hızlı bir şekilde azalarak negatif bölgeye geçer. $J < 0$ şartını sağlayan tüm J sayılarında ise R eğrilik skaleri, tüm T ve h değerleri için pozitif bölgede bulunur ve $T \rightarrow 0$ limitinde $R \rightarrow 1$ olur.

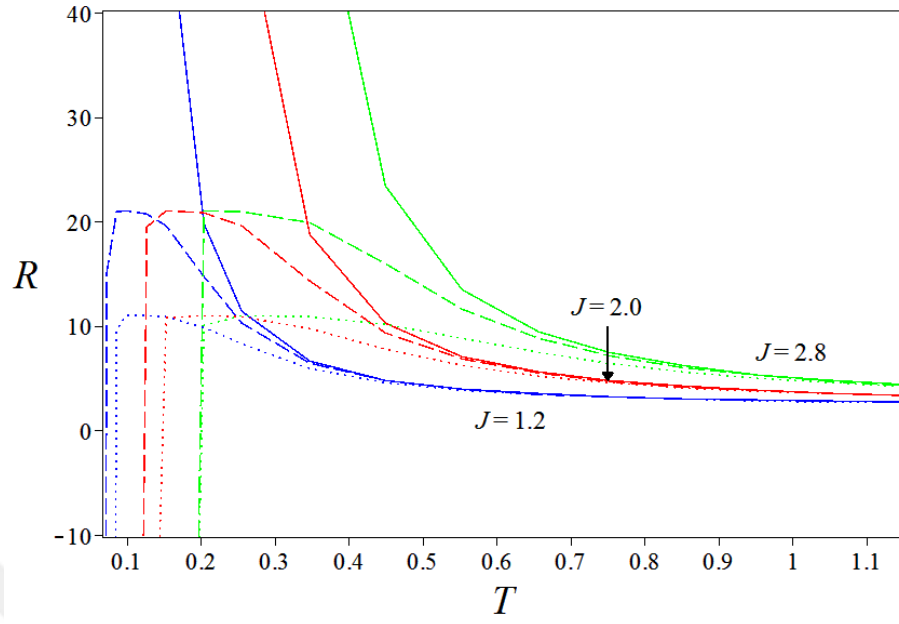
Daha sonra (4.54) bağıntısı kullanılarak skaler eğrilik diyagramının çizimi yapıldı. Çizim sonucunda spin-spin etkileşme enerjisi $-8 < J/T < 3$ aralığında ve manyetik alan



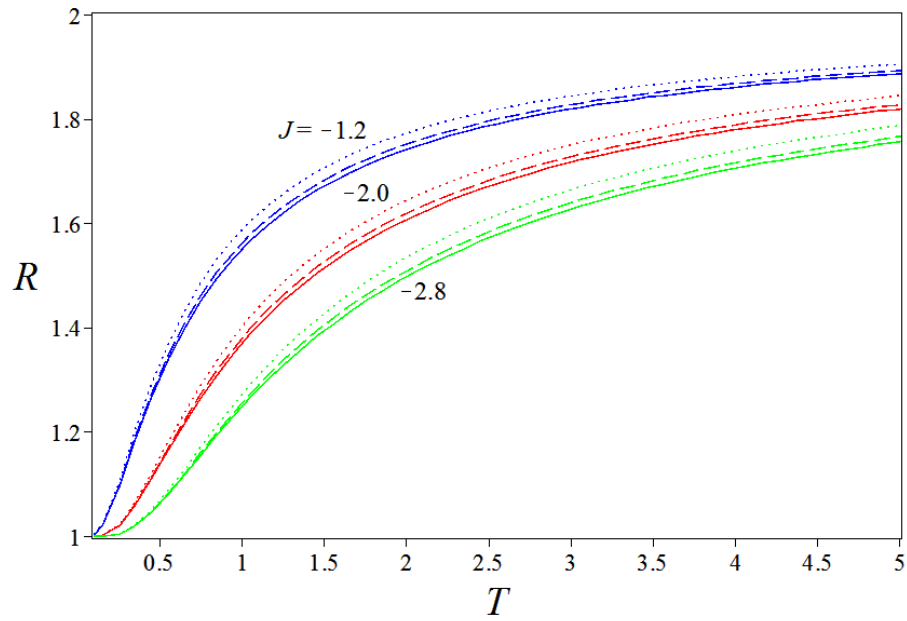
Şekil 4.1. $S = 1/2$ Ising zinciri için $J > 0$ seçilerek elde edilen R 'nin h/T ile değişimi



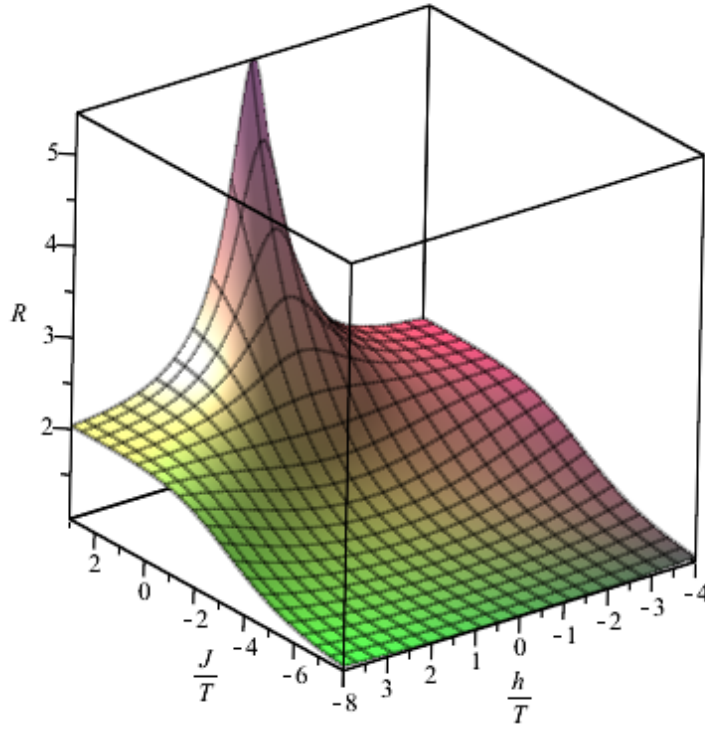
Şekil 4.2. $S = 1/2$ Ising zinciri için $J < 0$ olduğunda R 'nin h/T ile değişimi



Şekil 4.3. $S = 1/2$ Ising zinciri için $J > 0$ seçilerek elde edilen R 'nin T ile değişimi



Şekil 4.4. $S = 1/2$ Ising zinciri için $J < 0$ seçilerek elde edilen R 'nin T ile değişimi



Şekil 4.5. $S = 1/2$ Ising zinciri için üç boyutlu R diyagramı

değeri $-4 < h/T < 4$ aralığında seçildiğinde Şekil 4.5 'teki üç boyutlu yüzey elde ediliyor. R skalerinin yüzey yapısı incelendiğinde ilk iki şekilde elde edilen sonuçlar açıkça gözlenebiliyor. Buna göre, seçilen manyetik alan aralığında tüm ferromanyetik etkileşmeler ile düşük antiferromanyetik etkileşmelerde R niceliği daima pozitif değerler almakta olup ($R > 0$), ilgili faz uzayının eğri bir uzay olduğu anlaşılmaktadır. R 'nin en büyük (yani tepe) değeri sıfır alan çizgisi boyunca oluşarak J 'nin azalması ile küçüldüğü görülmektedir. Yüksek antiferromanyetik etkileşmeleri söz konusu olduğunda ise uzay daima düz ve eğrilik sıfır olmaktadır ($R = 0$). Bu sonuçlar aynı model için daha önce yayınlanan Heidari ve Ghorbani'nin (2012) bulguları ile uyumludur. Adı geçen bu çalışmada eğrilik skaleri daha kısa ve basit bir bağıntı ile ifade edilerek 4-durumlu karma spin modeli için bulunanlarla karşılaştırmalı olarak analizi yapılmıştır. Tezde türetilen (4.54) ifadesi ise daha uzun bir bağıntı olmasına rağmen bulunan nümerik sonuçlar önceki çalışmalarla uyumlu sonuçlar içermektedir.

4.2. $S = 1$ BC zinciri için eğrilik skalerinin türetilmesi ve R -diyagramları

Kesim 4.1 'deki Ising zincirinden farklı olarak bu kesimde BC zinciri için $y = \beta d$ şeklinde seçilir ve (2.33) 'deki λ_{max} özdeğeri (dolayısıyla (2.32) 'deki Gibbs serbest enerji bağıntısı) $x = \beta J$ ve $y = \beta d$ değişkenleri cinsinden yazılır. Bu değişikliğe bağlı olarak (3.44) metrik elemanları (2.33) yardımıyla aşağıdaki gibi hesaplanır:

$$\begin{aligned}
 g_{11} &= \frac{\partial^2 \ln \lambda_{max}}{\partial x^2} = \frac{1}{(4e^{2y}v^2 - 4e^yv + 8e^y + 1)^{3/2}(2e^yv + u + 1)^2} \left[(8e^{2y})(8e^{3y}v^3 \right. \\
 &\quad \left. + 16v^3e^{2y} + 4e^{2y}v^2u - 12e^{2y}v^2 + 8e^yv^2u + 8e^{2y}v - 4e^yv^2 \right. \\
 &\quad \left. - 4e^yvu + 22e^yv - 12e^y + 2v + u - 1) \right], \\
 g_{12} &= \frac{\partial^2 \ln \lambda_{max}}{\partial x \partial y} = \frac{1}{(4e^{2y}v^2 - 4e^yv + 8e^y + 1)^{3/2}(2e^yv + u + 1)^2} \left[(16e^{2y} \sinh(x)) \right. \\
 &\quad \left. (4e^{2y}v^2 + 2e^yvu + 4e^y + u + 1) \right], \\
 g_{22} &= \frac{\partial^2 \ln \lambda_{max}}{\partial y^2} = \frac{1}{(4e^{2y}v^2 - 4e^yv + 8e^y + 1)^{3/2}(2e^yv + u + 1)^2} \left[(4e^y)(8e^{3y}v^3 \right. \\
 &\quad \left. + 4e^{2y}v^2u + 8e^{2y}v + 4e^yvu + 4e^{2y}v^2 + 4e^{2y}v^2 + 2e^yv \right. \\
 &\quad \left. + 4e^y + u + 1) \right], \tag{4.55}
 \end{aligned}$$

burada

$$\begin{aligned}
 u &= \sqrt{4e^{2y} \cosh^2(x) - 4e^y \cosh(x) + 8e^y + 1}, \\
 v &= \cosh(x). \tag{4.56}
 \end{aligned}$$

(4.55) metrik bileşenlerinin (3.51) eşitliğinde kullanılması sonucu eğrilik skaleri için aşağıdaki bağıntı türetilir:

$$R = 32e^{-y} \left(\sum_{i=1}^5 A_i \right) \left(\prod_{j=1}^4 B_j \right)^{-1}. \tag{4.57}$$

Bu bağıntıdaki A_i ve B_j katsayıları u , v ve y değişkenleri cinsinden aşağıdaki gibi belirlenmiştir:

$$\begin{aligned}
A_1 = & -4e^y + v - 15072e^{5y} - 14976e^{6y} - 6400e^{4y} - 116e^{2y} - 1264e^{3y} \\
& - 1536e^{8y} + 36e^yv - 587776e^{11y}v^6 + 4423680e^{13y}v^{10} + 30336e^{6y}v^6 \\
& + 13056e^{5y}v^5 + 38016e^{5y}v^4 + 4768v^4e^{4y} - 647168e^{10y}v^4 + 100v^3e^{2y} \\
& + 20e^{2y}v^2 + 704v^5e^{4y} + 532e^{2y}v + 360e^{3y}v^4 + 1072e^{3y}v^3 + 9728e^{4y}v^2 \\
& + 3760e^{3y}v + 1408e^{5y}v^6 + 1512e^{3y}v^2 + 200704e^{11y}v^5 + 802816e^{12y}v^7 \\
& - 120832e^{9y}v^2 + 2048e^{10y}v^2 - 14336e^{10y}v^3 + 1078272e^{11y}v^7 \\
& + 2370560e^{10y}v^5 + 2523136e^{15y}v^{12} + 457216e^{9y}v^4 + 802816e^{12y}v^6 \\
& + 100352e^{11y}v^4 + vu + 2408448e^{13y}v^8 + 1679360e^{12y}v^8 + 2393088e^{10y}v^6 \\
& + 3365888e^{9y}v^7 + 5652992e^{9y}v^6 + 121344e^{8y}v^8 + 483328e^{8y}v^7 \\
& + 1671168e^{8y}v^6 + 2882560e^{8y}v^5 + 1355776e^{8y}v^4 + 106752e^{6y}v^5 \\
& + 276416e^{6y}v^4 + 63488e^{7y}v^7 + 245248e^{7y}v^6, \tag{4.58}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
A_2 = & 737280e^{7y}v^5 + 1174272e^{7y}v^4 + 16465920e^{12y}v^9 + 688128e^{13y}v^9 + 489728e^{7y}v^3 \\
& + 466944e^{11y}v^{11} + 1159168e^{11y}v^{10} + 13565952e^{11y}v^9 + 372736e^{10y}v^{10} \\
& - 313344e^{11y}v^8 + 1073152e^{10y}v^9 + 6723584e^{10y}v^8 + 208896e^{9y}v^9 \\
& + 7607296v^7e^{10y} + 833536e^{9y}v^8 + 4145152v^{13} + 4161536e^{14y}v^{12} \\
& + 6963200d^{13}e^{13y} - 229376e^{14y}v^{11} - 5332992e^{13y}v^{12} + 11796480e^{13y}v^{11} \\
& - 2768896e^{12y}v^{12} + 13615104e^{12y}v^{11} + 3440640e^{14y}v^{10} - 5832704e^{12y}v^{10} \\
& + 2208768e^{9y}v^5 + 371136e^{6y}v^3 - 83456e^{8y}v^3 - 180224e^{9y}v^3 - 171520e^{8y}v^2 \\
& - 2048e^{9y}v + 131072e^{17y}v^{16} + 262144e^{16y}v^{16} - 131072e^{16y}v^{15} + 917504e^{16y}v^{14} \\
& + 720896e^{15y}v^{15} + 1736704e^{15y}v^{14} - 458752e^{15y}v^{13} - 1753088e^{14y}v^{14} + 4e^yv^3 \\
& - 2e^yv^2 + 8e^{2y}v^4 + 5632e^{7y}v^8 + 2816e^{6y}v^7, \tag{4.59}
\end{aligned}$$

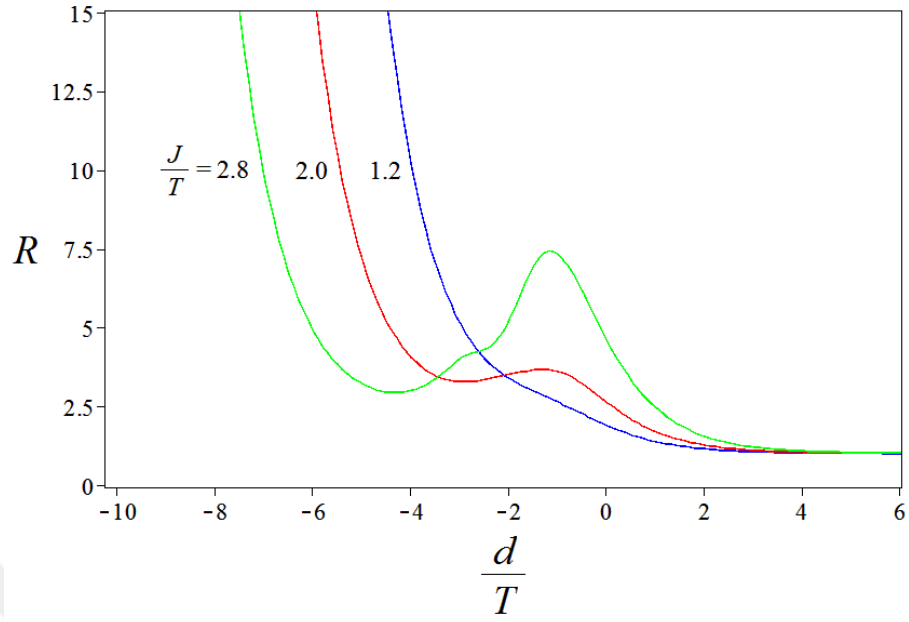
$$\begin{aligned}
A_3 = & 82912e^{5y}v^2 + 22528e^{9y}v^{10} + 11264e^{8y}v^9 - 32768e^{12y}v^{14} + 614400e^{12y}v^{13} \\
& + 75776e^{11y}v^{12} + 1024e^{10y}v^{12} + 82752e^{5y}v^3 + 32768e^{10y}v^{11} \\
& + 65536e^{16y}v^{17} + 131072e^{15y}v^{17} - 196608e^{15y}v^{16} - 245760e^{14y}v^{16} \\
& + 1622016e^{14y}v^{15} + 180224e^{13y}v^{15} - 1630208e^{13y}v^{14} + 10656e^{4y}v - 5056e^{5y}v \\
& - 135808e^{7y}v^2 - 83712e^{7y}v - 45568e^{8y}v + 89280e^{6y}v^2 - 69696e^{6y}v \\
& - 100e^{2y}u - 1408e^{7y}u - 4e^yu - 896e^{3y}u - 3488e^{4y}u - 5728e^{5y}u - 3712e^{6y}u \\
& - 6784e^{7y} - 3584e^{9y}v^2c + 393216e^{15y}v^{13}u - 438272e^{11y}v^9u + 2535424e^{12y}v^{12}u \\
& + 560640e^{7y}v^4u - 56832e^{8y}v^2u + 393216e^{14y}v^{14}u + 3444736e^{10y}v^8u \\
& - 183808e^{9y}v^9u - 69760e^{7y}v^2u + 606976e^{7y}v^5u - 11648e^{5y}vu \\
& - 1302528e^{12y}v^{11}u + 4096000e^{11y}v^{10}u + 983040e^{13y}v^9u + 162816e^{10y}v^{10}u,
\end{aligned} \tag{4.60}$$

$$\begin{aligned}
A_4 = & 65408e^{7y}v^3u + 720896e^{14y}v^{13}u + 4530176e^{12y}v^{10}u + 901120e^{14y}v^{11}u \\
& - 43008e^{11y}v^{11}u + 225536e^{8y}v^4 + u + 882688e^{9y}v^8c + 602624e^{9y}v^5u \\
& + 4741120e^{11y}v^8u + 1142784e^{12y}v^9u + 393216e^{12y}v^8u + 14336e^{10y}v^4u \\
& + 516096e^{12y}v^7u - 42240e^{8y}v^3 + 130048e^{9y}v^4u - 32768e^{14y}v^{12}u \\
& + 1602048e^{9y}v^6u + 2538496e^{9y}v^7u + 7168e^{10y}v^3u - 8448e^{8y}vu \\
& - 22272e^{7y}vu + 1409024e^{13y}v^{11}u + 200704e^{11y}v^6u65536e^{16y}v^{15}u \\
& + 6528e^{6y}v^7u + 34112e^{6y}v^6u + 2200e^{4y}v^3u + 485376e^{8y}v^7u + 256e^{6y}v^8u \\
& - 120832e^{9y}v^3u + 432e^{3y}v^4u + 1024e^{8y}v^{10}u + 180224e^{11y}v^7u + 2048e^{9y}v^{11}u \\
& + 13056e^{7y}v^8u + 128e^{5y}v^7u + 904e^{3y}v^3u + 1248e^{4y}v^5u + 512e^{7y}v^9u \\
& + 1808e^{3y}v^2u + 70272e^{7y}v^7u + 67584e^{10y}v^{11}u,
\end{aligned} \tag{4.61}$$

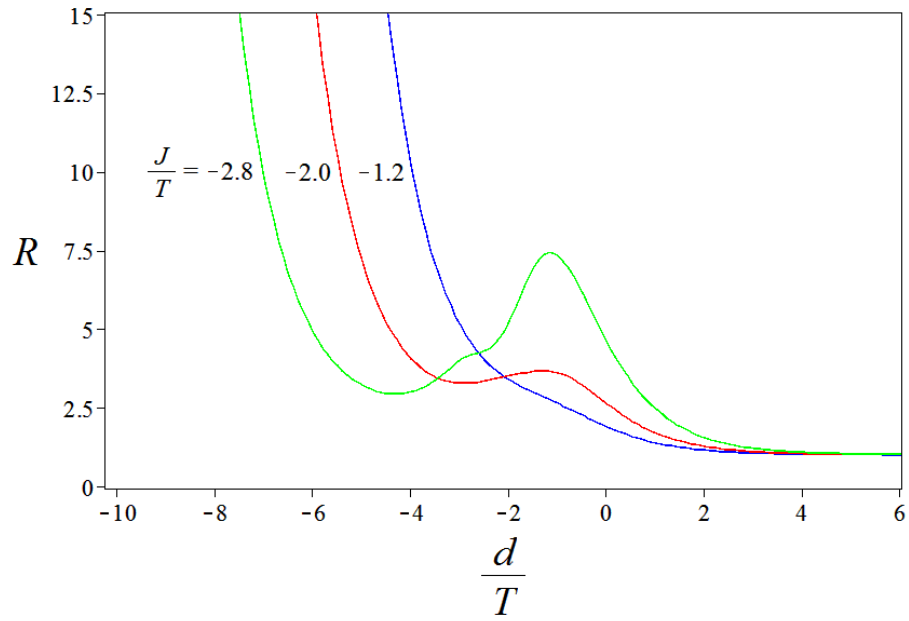
$$\begin{aligned}
A_5 = & 84e^{2y}v^3u + 24064e^{8y}v^9u + 1990656e^{13y}v^{12}u + 13920e^{5y}v^5u + 3008e^{5y}v^6u \\
& + 76e^{2y}v^2u + 3993e^{9y}v^{10}u + 32e^yv u + 3072e^{10y}v^{12}u + 88064e^{11y}v^{12}u \\
& + 6144e^{11y}v^{13}u - 405504e^{12y}v^{13}u + 704512e^{13y}v^{14}u - 90112e^{13y}v^{15}u \\
& - 81920e^{14y}v^{15}u + 65536e^{14y}v^{16}u + 32768e^{15y}v^{16}u + 4e^yv^3u + 3040e^{4y}vu \\
& + 14448e^{4y}v^2u + 16e^{2y}v^4u + 37856e^{5y}v^2u + 32e^{3y}v^5u + 66528e^{5y}v^3u \\
& + 35712e^{5y}v^4u + 64e^{4y}v^6u - 5184e^{6y}v^2u - 31360e^{6y}vu + 226304e^{6y}v^4u \\
& + 123648e^{8y}v^8u + 240896e^{7y}v^6u - 32768e^{15y}v^{14}u + 2021376e^{10y}v^6u \\
& + 204800e^{13y}v^{10}c + 114688e^{11y}v^5u + 1349120e^{8y}v^6u + 1193472e^{8y}v^5u \\
& + 182784e^{6y}v^3u + 131072e^{15y}v^{15}u + 1746944e^{10y}v^9u + 102784e^{6y}v^5u \\
& + 997376e^{10y}v^7u - 614400e^{13y}v^{13}u - 265216e^{10y}v^5u, \tag{4.62}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B_1 = & \sqrt{4e^{2y}v^2 - 4e^yv + 8e^y + 1}, \\
B_2 = & (2e^yv + u + 1)^4, \\
B_3 = & (16v^4e^{4y} + 8e^{3y}v^3u + 32e^{3y}v^2 + 4v^3e^{2y} + 4e^{2y}v^2u - 4e^{2y}v^2 + 8e^{2y}vu \\
& + 2e^yv^2u + 16e^{2y}v + 8e^{2y} + 4e^yv + 4e^yu + vu + 4e^y + v)^2, \\
B_4 = & 8e^{3y}v^3e^{4y} + 16v^3e^{2y} + 4e^{2y}v^2u - 12e^{2y}v^2 + 8e^yv^2u, \\
& + 8e^{2y}v - 4e^{2y}v - 4e^yv^2u - 4e^yvu + 22e^yv - 12e^y + 2v + u - 1. \tag{4.63}
\end{aligned}$$

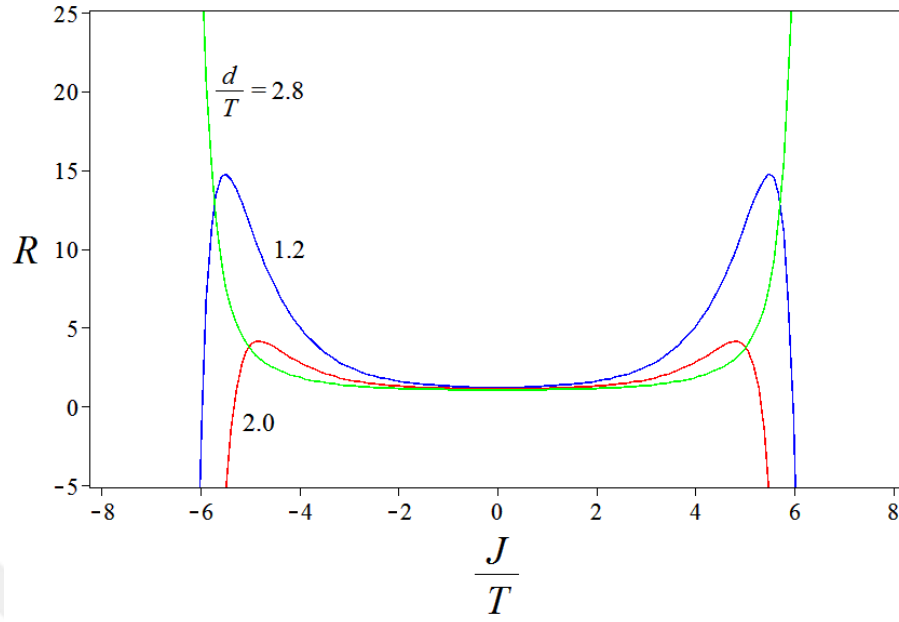
Eğrilik skalerinin d/T 'ye göre davranışı ferromanyetik ve antiferromanyetik etkileşmeler için sırasıyla Şekil 4.6 'da ve Şekil 4.7'de çizildi. Her iki çizim, Şekil 4.1 ve 4.2 'deki etkileşme enerjileri dikkate alınarak üç farklı renkte elde edildi. Şekillere göre, R eğriliği J 'nin işaretinden bağımsız olmakla birlikte aldığı rakamsal değere göre farklı davranışlar sergiler. Örneğin $J/T = 1.2$ için R negatif d bölgesinde azalan d değerleri ile birlikte çok hızlı bir artış yaparken (mavi renkteki eğriler) $J/T = 2.0$ olduğunda birisi minimum diğeri maksimum olmak üzere iki adet ekstremum noktalar ortaya çıkar (kırmızı renkteki eğriler). Minimum noktasının bulunduğu d değerinden daha düşük değerlerde hızlı artışına devam eder. $J/T = 2.8$ olduğunda ise bu ekstremum daha belirgin hale gelir (yeşil renkteki eğriler).



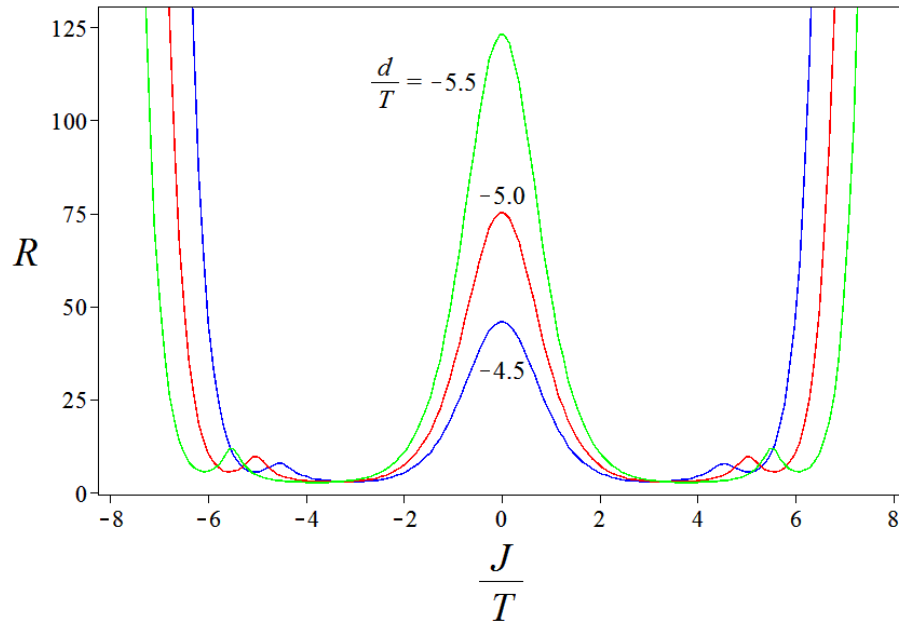
Şekil 4.6. $S = 1$ BC zinciri için $J > 0$ seçilerek elde edilen R 'nin d/T ile değişimi



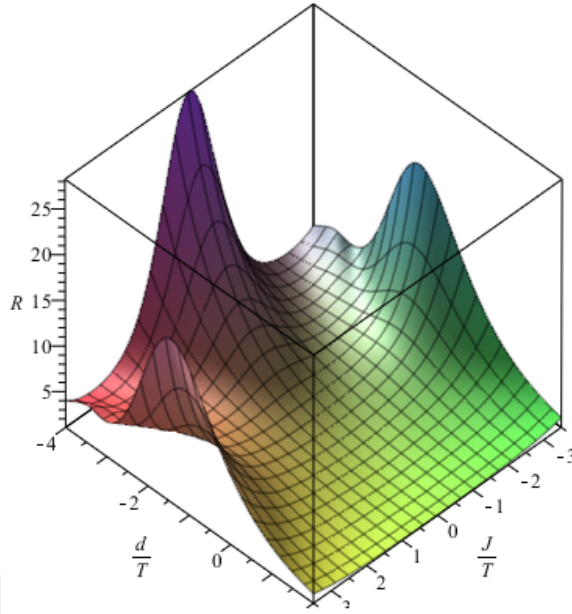
Şekil 4.7. $S = 1$ BC zinciri için $J < 0$ seçilerek elde edilen R 'nin d/T ile değişimi



Şekil 4.8. $S = 1$ BC zinciri için $d > 0$ seçilerek elde edilen R 'nin J/T ile değişimi



Şekil 4.9. $S = 1$ BC zinciri için $d < 0$ seçilerek elde edilen R 'nin J/T ile değişimi



Şekil 4.10. $S = 1$ BC zinciri için üç boyutlu R diyagramı

Şekil 4.8 ve 4.9 'da ise sırasıyla $d > 0$ ve $d < 0$ durumları dikkate alınarak R 'nin J/T 'ye göre değişimi incelendi. Her iki şekilden R eğriliğinin $J = 0$ eksenine göre simetrik olduğu görülür: $R(-J) = R(J)$. Ancak, $d > 0$ ve $d < 0$ bölgelerinde farklı $R - J/T$ eğrileri ortaya çıkar. Örneğin, $d/T = 1.2, 2.0$ ve 2.8 seçildiğinde $J/T = 0$ 'da R niceliği aynı minimuma sahip iken (Şekil 4.8), $d/T = -4.5, -5.0$ ve -5.5 alındığında $J/T = 0$ 'da farklı yüksekliklerde büyük tepeler oluşur (Şekil 4.9). Bunların dışında, simetrik fonksiyon özelliğini koruyacak şekilde $J/T > 0$ ve $J/T < 0$ bölgelerinde farklı yüksekliklerde R için d - bağımlı küçük tepeler de gözlenir.

Yukarıda özetlenen tüm sonuçlar Şekil 4.10 'da sunulan üç boyutlu R skaler eğrilik diyagramında da gözlenebilir. Şekildeki yüzey yapısına göre, $-4 < J/T < 4$ ve $-4 < d/T < 4$ aralıklarında skaler eğrilik daima pozitif değerler almaktadır. Bu da ilgili manifold uzayının söz konusu rejimde bir eğri uzay olduğu anlamına gelmektedir.

4.3. Karma spin Ising zinciri için eğrilik skalerinin türetilmesi ve R -diyagramları

Bu kesimde BC modelinde olduğu gibi (2.41) 'deki λ_+ özdeğeri (dolayısıyla (2.42) 'deki Gibbs serbest enerji bağıntısı) $x = \beta J$ ve $y = \beta d$ değişkenleri cinsinden yazılır. Bu-

rada diğer durumlardan farklı olarak üçüncü bir değişken ($z = \beta h_A$) mevcuttur fakat bu değişken sabit alınmaktadır. Dolayısıyla problem iki boyutlu ($n=2$) hale indirgenmektedir. Önceki zincirlerde olduğu gibi x ve y değişkenlerine bağlı olarak (3.44) metrik elemanları (2.42) denklemi yardımıyla türetilir. Yapmış olduğumuz analitik hesaplamalar sonucunda g_{ij} metrik bileşenleri ve bunların türevlerinin kullanımı yoluyla bulunan eğrilik skaleri bağıntısının çok uzun olması nedeni ile tezde R 'nin açık bir formül şeklinde gösterilmesi mümkün olmamıştır. Bu nedenle basitlik ve kısaltma olması bakımından önce metrik bileşenleri aşağıdaki gibi (2.41) öz değerinin kendisi ve türevleri cinsinden verildi:

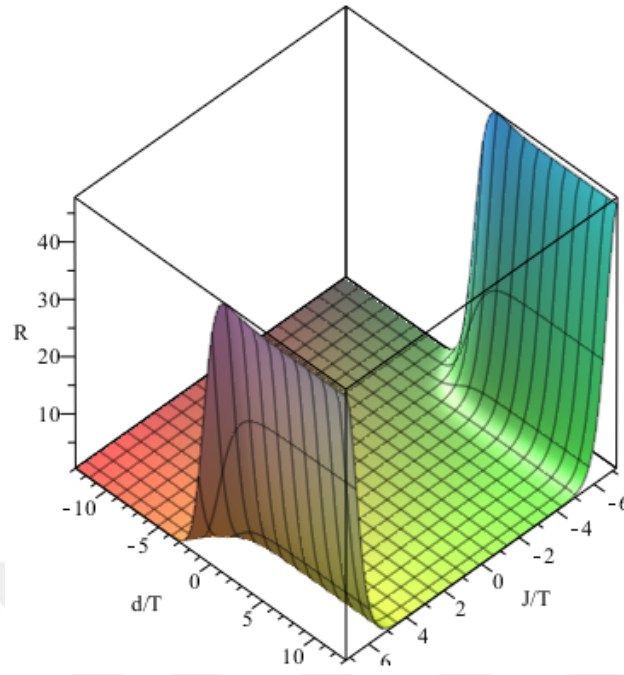
$$\begin{aligned} g_{11} &= \frac{\partial^2 \ln f}{\partial x^2} = \frac{f_{xx}}{f} - \frac{f_x^2}{f^2}, \\ g_{12} &= \frac{\partial^2 \ln f}{\partial x \partial y} = \frac{f_{xy}}{f} - \frac{f_x f_y}{f^2}, \\ g_{22} &= \frac{\partial^2 \ln f}{\partial y^2} = \frac{f_{yy}}{f} - \frac{f_y^2}{f^2}. \end{aligned} \quad (4.64)$$

Burada $f = \lambda_+(x, y)$ kabul edilerek (λ_+ (2.41) ile verilmektedir)

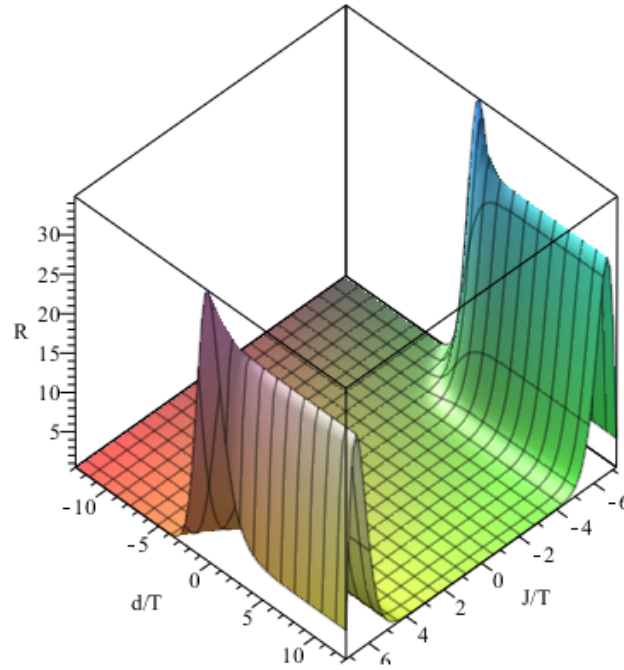
$$f_x = \frac{\partial f}{\partial x}, \quad f_y = \frac{\partial f}{\partial y}, \quad f_{xx} = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}, \quad f_{xy} = \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}, \quad f_{yy} = \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}, \quad (4.65)$$

alınır. (4.64) metrik bileşenlerinin (3.51) 'de kullanılmasıyla eğrilik skaleri R aşağıdaki kapalı formda belirtildiği gibi f 'nin birinci ve daha yüksek mertebeden kısmi türevleri cinsinden bulunur:

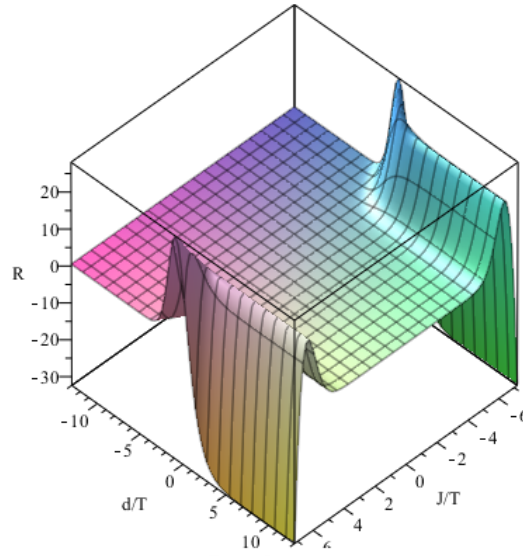
$$\begin{aligned} R = & -\frac{1}{2} \frac{1}{(f(f_{xx}f_{yy} - f_{xy}^2) - f_x^2 f_{yy} + 2f_x f_y f_{xy} - f_x^2 f_{xx})^2} \left[f^2 f_{xy}^2 (f f_{xx} - f_x^2) \right. \\ & + f^2 f_{xy}^2 (f f_{yy} - f_y^2) + 4f_x f_y f_{xy} (f_x f_y f_{xy} + f f_{xx} f_{yy}) + f^2 f_{xy} f_{xxx} (f_y^2 - f f_{yy}) \\ & + f^2 f_{xy} f_{xy} (2f_x f_{xy} - f f_{xx}) + f^3 f_{yyy} (f_{xxx} - f_{xx} f_{xy}) + f^2 f_{yyy} (f_x^2 f_{xx} + f_y f_{xx}^2) \\ & + f^2 f_x f_{yy}^2 f_{xxx} + 2f_x^2 f_y (f_{xy}^2 f_{xx} + 2f f_x^2 f_{yy} (f_{xy}^2 - f_{xx} f_{yy}) - 4f f_x f_y f_{xy}^3 \\ & + 2f f_y^2 f_{xx} (f_{xy}^2 - f_{xx} f_{xy}) - 4f_x f_y^3 f_{xy} f_{xx} + 2f_x^2 f_y f_{yy} (f_{xx} f_y - 2f_x f_{xy}) \\ & + f^2 f_x f_{xy} (f_y f_{xx} + f_{xx} f_{yy}) - 3f^2 f_y f_{xy} f_{xx} f_{xy} - f^2 f_x f_{yyy} (f_y f_{xx} + f_{xy} f_{xx}) \\ & \left. - f^2 f_y f_{xy} f_{yy} f_{xxx} + f^2 f_{yy} (f_{xy} (f_y f_{xx} - 3f_x f_{xy}) + f_x^4 f_{yy}^2 + f_y^4 f_{xx}^2) \right]. \end{aligned} \quad (4.66)$$



Şekil 4.11. Karma spin $S = 1/2$ ve $S = 1$ Ising zinciri için $h_A/T = 0.003$ seçilerek elde edilen üç boyutlu R diyagramı



Şekil 4.12. Karma spin $S = 1/2$ ve $S = 1$ Ising zinciri için $h_A/T = 0.005$ seçilerek elde edilen üç boyutlu R diyagramı



Şekil 4.13. Karma spin $S = 1/2$ ve $S = 1$ Ising zinciri için $h_A/T = 0.007$ seçilerek elde edilen üç boyutlu R diyagramı

Önceki iki zincirden farklı olarak, h_A sabit iken, iki parametreye bağlı şekilde kapalı formda elde edilen R niceliğinin üç boyutlu eğrilik diyagramları üç farklı küçük h_A manyetik alan değeri seçilerek Şekil 4.11, 4.12 ve 4.13 'de gösterildi. h_A 'nın R üzerindeki etkisini karşılaştırma açısından üç grafikte de aynı yatay düzlem aralığı (yani J/T - d/T rejimi) alındı. Öncelikle ortaya çıkan tüm grafiklerden R eğriliğinin (BC zincirindeki gibi) J/T 'ye göre simetrik bir fonksiyon olduğu açıkça görülebilir. Ancak, BC 'den farklı olarak $h_A = 0.003$ için herhangi bir tepe yoktur (Şekil 4.11). Bir bütün olarak bakıldığında Şekil 4.11 'e göre termodinamik durum uzayı genellikle düzdür ve eğrilik sıfırdır. Sadece, simetriden dolayı $-4 < d/T$ olduğunda iki farklı J/T aralığında ($-7 < J/T < -5$ ve $5 < J/T < 7$) $R > 0$ olduğu gözlemlendi. Manyetik alan artırıldığında ($h_A = 0.005$) aynı aralıklarda birbirine göre simetrik iki farklı tepe ortaya çıkar. Bunlardan birincisi $J/T = -6$ çizgisi boyunca, diğeri $J/T = 6$ çizgisi üzerinde oluşur (Şekil 4.12). Şekil 4.13 'e göre $h_A = 0.007$ seçilmesi durumunda ise yukarıdaki bulgulara ilave olarak tepelerde kayma olduğu böylece R 'nin negatif değerler de alabildiği bulundu. Aynı rejim civarında R 'de d/T 'ye bağlı yeni tepeler de elde edildi.

5. SONUÇLAR

Bu tez çalışmasında ilk olarak ikinci bölümde istatistik mekanikte tam olarak çözümlenebilen üç değişik spin zinciri (Ising, Blume-Capel ve Karma-spin) ele alınarak bunların TMM ile çözümü konusunda teorik bilgi verildi. Her bir zincir için türetilen (Gibbs) serbest enerji bağıntısı ve bunların bağlı oldukları enerji parametreleri incelendi. Üçüncü bölümde Riemann geometrisi çerçevesinde bir termodinamik parametre uzayının eğrilik skalerinin türetilmesi konusunda temel basamaklar verildi. Daha sonra, dördüncü bölümde indirgenmiş enerji parametreleri cinsinden iki-boyutlu bir parametre uzayı (faz uzayı) seçilerek uzayda iki nokta arasındaki sonsuz küçük çizgi uzunluğu için bir metrik tanımlandı. Metrik tensör elemanları Gibbs serbest enerjisinin ikinci-kısmi türevleri alınarak bulundu. Son olarak bu bölümde eğrilik skaleri (R) Ising ve BC zincirleri için açık formda, karma-spin zinciri için ise (bağıntının çok uzun olması nedeniyle) kapalı formda kısa bir formül olarak ifade edildi.

Elde edilen formüllerden R 'nin üç-boyutlu görüntüsü (yani eğrilik diyagramı) çizilerek aşağıdaki sonuçlar elde edildi: (i) Eğrilik skaleri, Ising zincirinde manyetik alana göre (h) diğer iki zincirde spin-spin etkileşme sabitine (J) göre simetrik bir fonksiyon özelliği göstermiştir. (ii) Grafiklerde oluşan yüzeylerde tekillik gözlenmezken ekstremum noktalar ortaya çıkmıştır. Bu ekstremumlar genellikle Ising zincirinde $h = 0$ çizgisi üzerinde ve BC zincirinde $J = 0$ çizgisi üzerinde gözlenmiştir. Karma spin zincirinde ise bu çizgilerin dışında iki farklı konumda tepeler bulunmuştur. Eğrilik yüzeylerindeki tepelerin, eğri yüzeyler üzerinde en kısa uzaklığın tespitinde metrik geometrideki jeodezik problemlerinin çözümünde önemli bir yeri olduğu bilinmektedir (Yuan vd 2007; Rotskoff ve Crooks 2015). Dolayısıyla tezde ortaya çıkarılan eğrilik skaleri hesaplamalarının ilerleyen dönemlerde spin zincirleri için yapılabilecek olan jeodezik probleminin çözümünde çalışmalarına da katkı sunacağı açıktır.

Bu tez ile başta dimerleşmiş klasik ve kuantum spin zincirleri olmak üzere istatistiksel mekanikte TMM ile daha önce çözümlenmiş olan pek çok tek-boyutlu model sistemlerin geometrik analizinde ve bunların skaler eğrilik diyagramlarının elde edilmesinde başlangıç oluşturacağı düşünülmektedir. Ayrıca, mevcut literatür bilgimize göre aynı ça-

Işıma tek-boyutlu fotonik kristaller, polimerler, homojen olmayan optik yapılar vb. gibi TMM 'nun değişik uygulama alanlarında Riemann eğriliği analizinin başlamasına ve yaygınlaşmasına katkı sağlayacağı umulmaktadır.



6. KAYNAKLAR

- Albayrak, E. and Keskin, M. 2000. Phase diagrams of the Blume-Emery-Griffiths model on the simple lattice calculated by the linear chain approximation. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 203: 201-212.
- Blume, M. 1966. Theory of the first-order magnetic phase change in UO₂. *Physical Review*, 141:517-524.
- Brody, D. and Rivier, N. 1995. Geometrical aspects of statistical mechanics. *Physical Review E*, 51: 1006-1011.
- Brody, C. D. and Ritz, A. 2013. Information geometry of finite Ising models. *Journal of Geometry and Physics*, 47: 207-220.
- Capel, H. W. 1966. On the possibility of first-order phase transitions in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting. *Physica*, 32: 966-988.
- Dey, A., Roy, P., Sarkar, T. 2013. Information geometry, phase transitions, and the Widom line: Magnetic and liquid systems. *Physica A*, 392: 6341-6352.
- Erdem, R. 2018a. Riemannian geometry of Ising model in the bethe approximation. *Journal of Physics: Conf. Series*, 1132: 012028.
- Erdem, R. 2018b. Antiferromagnetic ising model in the framework of Riemannian Geometry. *Acta Physica Polonica*, 49:1823-1834
- Erdem, R. 2019. Thermodynamic geometry of Ising ferromagnet in an external magnetic field: A self-consistent field theory calculation. *Physica A*, 526:121173
- Fireman, E. C., Cressoni, J. C. and dos Santos, R. J. V. 2003. Thermodynamics of an alternate Ising chain mapped onto an effective BEG model. *Physica A*, 329: 147-160
- Fu, H., Yao, K. and Liu, Z. 2006. Thermodynamic properties of mixed-spin chains in magnetic field by the transfer matrix method. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 305: 253-258.

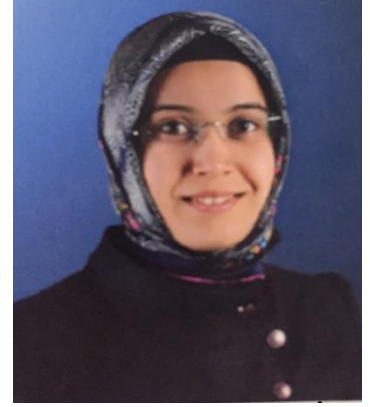
- Ghulghazaryan, R. G., Sargsyan, K. G. and Ananikian, N. S. 2007. Partition function zeros of the one-dimensional Blume-Capel model in transfer matrix formalism. *Physical Review E*, 76: 021104.
- Heidari, A. and Ghorbani, M. 2012. The computation of scalar curvature in the four-state mixed spin model and the investigation of its behaviour: a computational study. *Journal of Modern Physics*, 3: 37-42.
- Huang, K. 1987. Statistical mechanics. John Wiley, Newyork, 493.
- Ising, E. 1925. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, 31: 253-258.
- Jabar, A., Masrour, R., Benyoussef, A. and Hamedoun, M. 2017. Magnetic properties of the mixed spin-1 and spin-3/2 Ising system on a bilayer square lattice: A Monte Carlo study. *Chemical Physics Letters*, 670: 16-21.
- Janke, W., Johnston, D. A. and Kenna, R. 2004. Information geometry and phase transitions. *Physica A*, 336: 181-186.
- Janyszek, H. and Mrugala, R. 1989. Riemannian geometry and the thermodynamics of model magnetic systems. *Physical Review A*, 39: 6515-6523.
- Kaviani, K. and Dalafi-Rezaie, A. 1999. Pauli paramagnetic gas in the framework of Rimannian geometry. *Physical Rewiew E*, 60: 3520-3525.
- Kramers, H. A. and Wannier, G. H. 1941. Statistics of the Two-Dimensional Ferromagnet. Part I. *Physical Review*, 60: 252
- May, H. and Mausbach, P. 2012. Rimannian geometry study of vapor-liquid phase equilibria and supercritical behavior of the Lennard-Jones fluid. *Physical Rewiew E*, 85: 031201.
- May, H., Mausbach, P. and Ruppeiner, G. 2015. Thermodynamic geometry of supercooled water. *Physical Review E*, 91: 032141.
- Martinez-Garcilazo, J. P., Marquez-Islas, R. and Ramirez-Romero, C. 2009. *Revista Mexicana De Fisica*, 55 (2): 136-140.

- Mijatovic, M. and Milosevic, S. 1981. Phase diagrams of the Ising Spin-Peierls Transition Model. *Physics Letters A*, 87: 124-126.
- Mirza, B. and Talaei, Z. 2013. Thermodynamic geometry of a kagome Ising model in a magnetic field. *Physics Letters A*, 377: 513-517.
- Onsager, L. 1944. Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition. *Physical Review*, 65: 117-149.
- Pathria, R. K., 1996. Statistical mechanics. Elsevier, 529.
- Rotskoff, G. and Crooks, G., 2015. Optimal control in nonequilibrium systems: Dynamic Riemannian geometry of the Ising model. *Physical Review E*, 92: 060102(R).
- Ruppeiner, G. 1995. Riemannian geometry in thermodynamic fluctuation theory. *Review of Modern Physics*, 67 (3): 605-659.
- Ruppeiner, G., Bellucci, S. 2015. Thermodynamic curvature for a two-parameter spin model with frustration. *Physical Review E*, 91: 012116.
- Ruppeiner, G., Mausbach, P. and May, H. 2015. Thermodynamic R diagrams reveal solid-like fluid states. *Physics Letters A*, 379: 646-649.
- Ruppeiner, G., Sahay, A. and Sarkar, T., Sengupta, G. 2012. Thermodynamic geometry, phase transitions, and the Widom line. *Physical Review E*, 86: 052103.
- Ruppeiner, G. 2012. Thermodynamic curvature from the critical point to the triple point. *Physical Review E*, 86: 021130.
- Strečka, J. and Jascur, M. 2015. A brief account of the Ising and Ising-like models: mean-field, effective field and exact results. *acta physica slovac*, 65 (4): 235-367.
- Yuan, H., Glaser, S. and Khaneja, N. 2007. Geodesics for efficient and propagation of order along Ising spin chains. *Physical Review A*, 76: 012316.
- Zukovic, M. and Bobak, A. 2015. Mixed spin-1/2 and spin-1 Ising ferromagnets on a triangular lattice. *Physica A*, 436: 509-518.

ÖZGEÇMİŞ

FATMA HÜLYA UĞURLU

f.hulya_07@hotmail.com



ÖĞRENİM BİLGİLERİ

YÜKSEK LİSANS	Akdeniz Üniversitesi
2014-2019	Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Antalya
Lisans	Akdeniz Üniversitesi
2009-2013	Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Antalya
Pedagojik Formasyon	Mehmet Akif Ersoy Üniversitesi
2013-2014	Eğitim Fakültesi, Burdur