



**T.C.
İSTANBUL ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**



DOKTORA TEZİ

**BUNALIMLI SPİN-ÖRGÜ SİSTEMİNİN KUANTUM
TERMODİNAMİĞİ**

Seyit Deniz HAN

Fizik Anabilim Dalı

Yüksek Enerji ve Plazma Fiziği Programı

DANIŞMAN

Prof. Dr. Ekrem AYDINER

Şubat, 2022

İSTANBUL

Bu alıřma 17.02.2022 tarihinde ařaęıdaki jüri tarafından Fizik Anabilim Dalı Yüksek Enerji ve Plazma Fizięi Programında Doktora Tezi olarak kabul edilmiřtir.

Tez Jürisi

Prof. Dr. Ekrem AYDINER (Danıřman)
İstanbul Üniversitesi
Fen Fakültesi

Prof. Dr. Mustafa SARISAMAN
İstanbul Üniversitesi
Fen Fakültesi

Do. Dr. Ertan GÜDEKLİ
İstanbul Üniversitesi
Fen Fakültesi

Prof. Dr. Özgür E. MÜSTECAPLIOĞLU
Ko Üniversitesi
Fen Fakültesi

Prof. Dr. Uęur YAHŐİ
Marmara Üniversitesi
Fen-Edebiyat Fakültesi

- **İntihal Programı Beyanı**

20.04.2016 tarihli resmi gazetede yayımlanan Lisansüstü Eğitim ve Öğretim Yönetmeliğinin 9/2 ve 22/2 maddeleri gereğince; Bu Lisansüstü teze, İstanbul Üniversitesi'nin aboneli olduğu intihal yazılım programı kullanılarak Fen Bilimleri Enstitüsü'nün belirlemiş olduğu ölçütlere uygun rapor alınmıştır.

- **Tezden Üretilmiş Yayınların Künye Bilgileri**

Aydiner, E., Han, S.D., 2018, Quantum heat engine model of mixed triangular spin system as a working, *Physica A*, **509** 766-776.

ÖNSÖZ

Bilimsel ve akademik yolculuğa ilk çıktığım günlerde yüksek lisans tezimin önsözünü oluşturan “Bugün dün hayal ettiğim yarındır” cümlesinin peşini hiç bırakmadan tamamladığım doktora öğrenimim, araştırma sürecim ve tez çalışmalarım boyunca bilgi, öneri ve tecrübelerini her adımda paylaşan, her zaman derin desteğini, güvenini ve sabrını hissettiğim değerli danışman hocam sayın Prof. Dr. Ekrem AYDINER’e en içten dileklerimle teşekkür ederim.

Tez izleme komitemde yer alarak değerli görüşleri ile araştırmalarımın şekillenmesini sağlayan çok değerli Prof. Dr. Özgür E. MÜSTECAPLIOĞLU’na ve Doç. Dr. Ertan GÜDEKLİ hocalarıma çok teşekkür ederim.

Hayatım boyunca her konuda desteğini ve sevgisini esirgemedi her an yanımda olan çok sevgili annem Hatice HAN’a ve babam Nuri HAN’a en derin sevgi ve saygılarımla sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

Babam Nuri HAN’ın aziz hatırasına ...

Şubat, 2022

Seyit Deniz HAN

İÇİNDEKİLER

	Sayfa No
ÖNSÖZ	iv
İÇİNDEKİLER	vi
ŞEKİL LİSTESİ	viii
TABLO LİSTESİ	ix
SİMGE VE KISALTMA LİSTESİ	x
ÖZET	xii
SUMMARY	1
1. GİRİŞ	1
2. GENEL KISIMLAR	4
2.1. TERMODİNAMİĞİN YASALARI	4
2.2. KLASİK ISI MAKİNELERİ	9
2.3. KUANTUM TERMODİNAMİK	19
2.4. KUANTUM ISI MAKİNELERİ	29
3. MALZEME VE YÖNTEM	39
3.1. SPİN SİSTEMLERİ	39
3.1.1. Giriş	39
3.1.2. Kuantum Heisenberg Spin Modelleri	40
3.1.3. Manyetik Faz Sistemleri	43
3.1.4. Spin-Cam Sistemler	44
3.1.5. Spin-Cam Sistemlerde Bunalım	47
3.1.6. Spin-Cam Sistemlerde Düzen Parametresi	49
3.2. MODEL	51
3.2.1. Üçgen hücre üzerinde üç spinli karma Heisenberg XXZ spin modeli	52
3.2.2. Hamiltonyanın Özdeğerleri	55
3.2.3. Modele ait Kuantum Otto Isı Makinesi Çevrimi	55
3.2.4. Modele ait İş ve Verim	57

4. BULGULAR	59
4.1. 1. DURUM: $J_1 > 0$ VE $-J < J_2 < +J$	59
4.2. 2. DURUM: $J_1 < 0$ VE $-J < J_2 < +J$	61
4.3. 3. DURUM: $J_2 > 0$ VE $-J < J_1 < +J$	63
4.4. 4. DURUM: $J_2 < 0$ VE $-J < J_1 < +J$	64
4.5. İŞ-MANYETİK ALAN	66
5. TARTIŞMA VE SONUÇ	68
KAYNAKLAR	72
ÖZGEÇMİŞ	83



ŞEKİL LİSTESİ

	Page No
Şekil 2.1: Termodinamik sistem, çevre ve sınırı.....	6
Şekil 2.2: Temas eden üç cisim modeli	6
Şekil 2.3: Isı makinesinin şematik gösterimi. Isı enerjisi sıcak rezervuardan (T_H) soğuk rezervuara (T_L) akış gösterirken sistem iş (W) yapmaktadır.	11
Şekil 2.4: Klasik Carnot Isı Makinesi Çevrimi (Bu diyagramda yer alan yüksek sıcaklık gösterimi T_h metinde T_H olarak, düşük sıcaklık gösterimi olan T_c ise metinde T_L olarak ifade edilmiştir. 2007, Pearson Education, Inc., publishing as Pearson Addison-Wesley).....	13
Şekil 2.5: Otto çevrimi için $P - V$ ve $T - S$ diyagramları.	16
Şekil 2.6: İki seviyeli kuantum sistem için kuantum Carnot makinesine ait şematik diyagram. Δ iki enerji seviye arasındaki farkı, P_e uyarılmış seviyede bulunma olasılığını temsil eder. Sistem yüksek sıcaklıktaki ısı rezervuarı ile temastayken A 'dan B 'ye izotermal genişleme, sistem düşük sıcaklıktaki ısı rezervuarı ile temastayken C 'den D 'ye izotermal sıkıştırma süreci gerçekleşirken B 'den C 'ye ve D 'den A 'ya iki adyabatik süreç gerçekleşmektedir.	33
Şekil 2.7: İki seviyeli kuantum sistem için kuantum Otto ısı makinesine ait şematik diyagram. Kırmızı noktalardan ve kesikli siyah noktalardan oluşan eğriler izotermal süreçleri temsil etmektedir. Δ_H ve Δ_L , iki izokorik süreç boyunca ($A \rightarrow B$ ve $C \rightarrow D$) iki enerji seviye arasındaki farkı temsil etmektedir. P_e^H ve P_e^L ise uyarılmış durumda bulunma olasılıklarıdır. A 'dan B 'ye ve C 'den D 'ye iki kuantum izokorik süreci B 'den C 'ye ve D 'den A 'ya iki kuantum adyabatik süreci ifade etmektedir. $T(i)$, ($i = A, B, C, D$) i noktalarında sistemin etkin sıcaklığıdır ve $T(B) = T_H$, $T(D) = T_L$	37
Şekil 3.1: Heisenberg Spin Modelleri	42
Şekil 3.2: Spin-cam alaşımların şematik gösterimi. Ana metalin atomları (beyaz daireler), metal içerisine yerleştirilen safsızlıklar (siyah daireler).....	46
Şekil 3.3: Mattis Modeli. Bu şekilde + sembolü $J > 0$ ve - sembolü de $J < 0$ 'a karşı gelmektedir. (a) bunalımsız, (b) bunalımlı plakayı temsil etmektedir.	48
Şekil 3.4: Manyetizasyon ve düzen parametresi ilişkisi (a) paramanyetik faz, (b) ferromanyetik faz, (c) spin-cam faz [176]	50
Şekil 3.5: Spin-1/2 ve Spin-1 Matris Operatörleri	52
Şekil 3.6: Üstteki şekil, üçgen bir hücre üzerinde yer alan karma $(1/2, 1, 1/2)$ XXZ Heisenberg sistemini göstermektedir. Burada spin-spin etkileşim sabitleri arasında $J_{12} = J_{32} = J_1$ ve $J_{13} = J_2$ ilişkisi vardır. Siyah renkli daireler spin-1/2 ve beyaz renkli daireler ise spin-1'i temsil etmektedir. Aşağıdaki şekil, üçgen hücrenin bir boyuta projeksiyonunun temsildir... 53	53

Şekil 3.7: Komşu spin çiftleri arasındaki etkileşim çiftlenim sabitleri ve fazlar arasındaki konfigürasyonlar	54
Şekil 3.8: Kuantum Otto Isı Makinesi Çevrimi Gösterimi (Hot Bath= Sıcak Rezervuar, Cold Bath= Soğuk Rezervuar)	56
Şekil 4.1: Üzerine çalışılan Heisenberg karma spin sisteminin spin cam faz ($J_1 > 0$ & $J_2 < 0$) ve ferromanyetik faz ($J_1 > 0$ & $J_2 > 0$) durumları için ısı makinesi olarak (a) iş ve (b) verim davranışı grafiği. Burada, iş ve verim $\alpha_i = J_{1H}/J_{1L} = 2, 1.6, 1.5, 1.4, 1.3$, $i = 1, 2, 3, 4, 5$, $J_{1H} = \{4, 5, 6, 7, 8\}$ ve $J_{1L} = \{2, 3, 4, 5, 6\}$, $T_H = 6$, $T_L = 1$ ve $B_H = B_L = 0.8$ değerleri için J_2 değerine göre elde edilmiştir.	60
Şekil 4.2: Üzerine çalışılan Heisenberg karma spin sisteminin spin cam faz ($J_1 < 0$ & $J_2 < 0$) ve ferrimanyetik faz ($J_1 < 0$ & $J_2 > 0$) durumları için ısı makinesi olarak (a) iş ve (b) verim davranışı grafiği. Burada, iş ve verim $\beta_i = -J_{1L}/-J_{1H} = 2, 1.6, 1.5, 1.4, 1.3$, $i = 1, 2, 3, 4, 5$, $J_{1L} = \{-4, -5, -6, -7, -8\}$ ve $J_{1H} = \{-2, -3, -4, -5, -6\}$, $T_H = 6$, $T_L = 1$ ve $B_H = B_L = 0.8$ değerleri için J_2 değerine göre elde edilmiştir.	62
Şekil 4.3: Üzerine çalışılan Heisenberg karma spin sisteminin ferrimanyetik faz ($J_2 > 0$ & $J_1 < 0$) ve ferromanyetik faz ($J_2 > 0$ & $J_1 > 0$) durumları için ısı makinesi olarak (a) iş ve (b) verim davranışı grafiği. Burada, iş ve verim $\theta_i = J_{2H}/J_{2L} = 2, 1.6, 1.5, 1.4, 1.3$, $i = 1, 2, 3, 4, 5$, $J_{2H} = \{4, 5, 6, 7, 8\}$ ve $J_{2L} = \{2, 3, 4, 5, 6\}$, $T_H = 6$, $T_L = 1$ ve $B_H = B_L = 0.8$ değerleri için J_1 değerine göre elde edilmiştir.	64
Şekil 4.4: Üzerine çalışılan Heisenberg karma spin sisteminin spin cam faz ($J_2 < 0$ ve $J_1 < 0$ veya $J_2 < 0$ ve $J_1 > 0$) durumları için ısı makinesi olarak (a) iş ve (b) verim davranışı grafiği. Burada, iş ve verim $\gamma_i = -J_{2L}/-J_{2H} = 2, 1.6, 1.5, 1.4, 1.3$, $i = 1, 2, 3, 4, 5$, $J_{2L} = \{-4, -5, -6, -7, -8\}$ ve $J_{2H} = \{-2, -3, -4, -5, -6\}$, $T_H = 6$, $T_L = 1$ ve $B_H = B_L = 0.8$ değerleri için J_1 değerine göre elde edilmiştir.	65
Şekil 4.5: Üzerine çalışılan Heisenberg karma spin sisteminin a) $\tau_i = J_{1H}/J_{1L} = J_{2H}/J_{2L} = 2, 1.6, 1.5, 1.4, 1.3$, $i = 1, 2, 3, 4, 5$, $J_{1H} = \{4, 5, 6, 7, 8\}$ ve $J_{1L} = \{2, 3, 4, 5, 6\}$ değerleri için b) $\tau_i = -J_{1L}/-J_{1H} = -J_{2L}/-J_{2H} = 2, 1.6, 1.5, 1.4, 1.3$, $i = 6, 7, 8, 9, 10$, $J_{1L} = \{-4, -5, -6, -7, -8\}$ ve $J_{1H} = \{-2, -3, -4, -5, -6\}$ değerleri için iş (W)-manyetik alan (B) ilişkisi grafiği.....	67

TABLO LİSTESİ

Page No

Tablo 2.1: Klasik termodinamik ve kuantum termodinamik süreçlerin benzerlikleri ve farklılıkları.	28
---	----



SİMGE VE KISALTMA LİSTESİ

Simgeler	Açıklama
U	: İç enerji
T	: Sıcaklık
V	: Hacim
W	: Yapılan pozitif iş
B	: Manyetik alan
H	: Hamiltonyen
S_{VN}	: von Neumann entropisi
Q_{in}	: Aktarılan ısı miktarı
Q_{out}	: Soğurulan ısı miktarı
η	: Verim
Φ	: Bunalım fonksiyonu
P_n	: İşgal edilme olasılığı
k_b	: Boltzmann sabiti
R	: İdeal Gaz sabiti
E_n	: Enerji özdeğeri
J	: Spin etkileşim parametresi
$\sigma_{x,y,z}$	: Pauli spin matrisleri

Kısaltmalar	Açıklama
<i>RKKY</i>	: Ruderman, Kittel, Kasuya, Yoshida Etkileşimi

ÖZET

DOKTORA TEZİ

BUNALIMLI SPİN-ÖRGÜ SİSTEMİNİN KUANTUM TERMODİNAMİĞİ

Seyit Deniz HAN

İstanbul Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Ekrem AYDINER

Kuantum ısı makinesi sıcak ve soğuk rezervuarlar arasındaki ısı akışından güç üretir. Giderek küçülen araç ve makineler dünyasında kuantum etkilerinin ortaya çıktığı ölçekte bu makineleri üretmek önem kazanmaktadır. Böylece klasik termodinamiğin kuantum ölçeğindeki karşılığı olan kuantum termodinamiği alanı yeni bir disiplin olarak ortaya çıkar. Farklı sıcaklık düzeylerine sahip pek çok kuantum mekaniksel sistemler kullanılarak ısı makinesinin yapılabileceği literatürde gösterilmiştir. Spin sistemleri de buna iyi bir örnektir. Biz bu çalışmada bunalımlı bir sistem olarak bilinen spin-cam model üzerinde çalıştık. Spin-cam sistemler yalnızca yoğun madde fiziği ve istatistik mekaniğin değil aynı zamanda biyolojik sistemlerin dinamiğini açıklamak için de ilginç ve önemli bir konudur. Bu sistemler özellikle insan beynini modelleme veya canlılığın temel yapısını oluşturan moleküler evrimin modellenmesi konularında önemli bir yere sahip olmuştur. Bu nedenle bu tez çalışmasında bunalımlı $(1/2, 1, 1/2)$ karma Heisenberg XXZ spin sistemini ele aldık ve bunalım etkisi altında kuantum ısı makinesinin üreteceği iş ve verimi hesapladık. Ele aldığımız sistem seçilen etkileşim parametresine bağlı olarak farklı manyetik fazları da gösterebilmektedir. Çalışmada ferromanyetik, antiferromanyetik faz durumlarında iş ve verim hesaplanarak spin-cam fazının sonuçları ile karşılaştırılmıştır.

Şubat 2022, 84 sayfa.

Anahtar kelimeler: Kuantum Termodinamik, Bunalımlı Spin-Örgü, Spin-Cam, Kuantum Isı Makinesi

SUMMARY

Ph.D. THESIS

QUANTUM THERMODYNAMICS OF THE FRUSTRATED SPIN-LATTICE SYSTEM

Seyit Deniz HAN

İstanbul University

Institute of Graduate Studies in Sciences

Department of Physics

Supervisor: Prof. Dr. Ekrem AYDINER

The quantum heat engine generates power from heat flow between hot and cold reservoirs. It is important to produce quantum heat engines on a scale where quantum effects occur in the world of increasingly smaller tools and engines. Thus the field of quantum thermodynamics, which is the quantum scale equivalent of classical thermodynamics, emerges as a new discipline. A heat engine can be built using many quantum mechanical systems with different temperatures. Spin systems are a good example of this. In this study, we worked on the spin-glass model, which is known as a frustrated system. Spin-glass systems are an interesting and important topic for explaining not only condensed matter physics and statistical mechanics, but also the dynamics of biological systems. These systems have had an important role in modeling the human brain or modeling the molecular evolution that constitutes the basic structure of life. Also we discussed the frustrated $(1/2, 1, 1/2)$ mixed Heisenberg XXZ spin system and calculated the work and efficiency to be produced by the quantum heat machine under the effect of frustration. The system we are considering can also display different magnetic phases depending on the selected interaction parameter. In the study, work and efficiency were calculated in ferromagnetic and antiferromagnetic phases and compared with the results of the spin-glass phase.

February 2022, 84 pages.

Keywords: Quantum Thermodynamics, Frustrated Spin-Lattice, Spin-Glass, Quantum Heat Engine

1. GİRİŞ

Günümüz dünyasında teknolojik gelişmeler, mikroskobik olayları yeniden dizayn ve kontrol etmek için bilimsel yöntem ve süreçlerin yetenekleri ile taban tabana bağlı durumdadır. Özellikle kuantum kuramının devrim niteliğinde sayılabilecek yenilikleri klasik fiziğin çizdiği sınırların ötesine geçmemize olanak sağlamıştır. Kuantum mekaniğine ait özellikler etkilerini bilhassa bilişim kuramında göstermiş ve çığır açacak pek çok gerçek zamanlı teknolojinin de önünü açmıştır. Fizikte bunun en önemli ve güncel örneğini manipüle edilmiş kuantum sistemlerinin kullanıldığı kuantum hesaplama ve kuantum kimya gibi alanlarda kolaylıkla görebiliriz. Bununla birlikte bir diğer örnek, maddenin kuantum özellikleri ile alakalı olarak dizayn edilmesiyle oluşturulan yeni termodinamik süreçleri içeren kuantum termodinamiğidir. Kuantum termodinamiği; kuantum ısı makineleri veya buzdolapları, iş yapan kuantum sistem süreçleri ve pozitif iş için gerekli koşullar ile ilgilenmektedir.

Kuantum ısı makineleri, kuantum istatistiksel mekaniği yasaları aracılığı ile ısıyı işe dönüştüren cihazlardır. Klasik bir ısı makinesinin aksine, kuantum ısı makinelerinde sistem ile termal rezervuarlar arasındaki enerji alışverişi nicelleştirilmiş biçimde gerçekleşir. Bu nedenle kuantum ısı makineleri kesikli enerji seviyelerine sahip olacak şekilde modellenmiştir. Kuantum ısı makineleri, izotermal, adyabatik, izokorik, izobarik ve izoenerjetik süreçler gibi bazı temel termodinamik süreçlerden ve bu süreçlere karşılık gelen sabit sıcaklık, entropi, hacim, basınç ve enerji gibi bazı fiziksel niceliklerden oluşur. Bu termodinamik süreçler ve bu süreçlerle ilişkili fiziksel büyüklükler Carnot, Otto, Diesel, Brayton, Ericsson ve Stirling vb. çevrimleri oluşturmak için kullanılabilir.

Kuantum termodinamik çevrimlerden iş elde edilmesi üzerine son zamanlarda çok ilginç sonuçlar elde edilmiştir. İlk olarak Maserlerin üç seviyeli Carnot ısı makinesi ile eşdeğerliliği öne sürülerek bir prototip geliştirilmiş ve yeni gelişmelere zemin hazırlamıştır. Kuantum ısı makinesi kavramı, iyi bilinen Carnot çevriminin fiziksel olarak gerçekleştirilebilir, klasik süreçlerin veya makinelerin idealleştirilmesinde olduğu gibi gerçekçi olarak pompalanan çok seviyeli sistemlerin idealleştirilmesi olarak tanımlanmaktadır. Son zamanlarda da kuantum ısı makinelerinin çalışma mekanizmalarını anlamak için çeşitli çalışmalar yapılmaktadır. Kuantum termodinamiğin aktif ve güncel araştırma alanlarını kuantum ısı makineleri,

kuantum sistemlerden iş elde edilmesi süreçleri, pozitif iş elde edilmesi için oluşturulan koşullar vb. çalışmalar oluşturmaktadır. Kuantum ısı makineleri iş üretmek için harmonik osilatör sistemleri, spin sistemleri, iki veya daha çok seviyeli sistemler, kavite kuantum elektrodinamiği sistemleri ve çiftlenmiş iki seviyeli sistemler gibi kuantum mekaniksel sistemleri ele alır. Gelişen teknoloji ile birlikte kuantum çevrimler aracılığı ile çalışan kuantum ısı makinelerinin yapılandırılmış ve kontrollü işlevselleştirilmesine olan ilgi ilginç kuantum mekaniksel davranışları nedeniyle artmaktadır. Bu nedenle yukarıda değinilen bazı sistemler aracılığı ile kuantum ısı makinelerinin deneysel olarak da gerçekleştirilmesi son derece önemlidir. Son zamanlarda spin-1/2 parçacıkları kullanılarak kuantum etkileşimlerin rolünün anlaşılması üzerine kuantum Otto çevrimi için araştırmalar yapılmaktadır. Bu çalışmalarda, adyabatik süreçler boyunca sabit alınan dış manyetik alan içinde spin-spin etkileşim parametresi olan J 'nin $(J_1 \rightarrow J_2 \rightarrow J_1)$ şeklinde iki değer arasında değiştiği durumlar ele alınmıştır. Bu tip sistemler için iki spin arasındaki parametrelerin değişiminin ısı transferi, yapılan pozitif iş, verim gibi temel termodinamik büyüklükler üzerine olan etkileri yoğun bir şekilde araştırılmaktadır.

Bu tez çalışmasında bir spin-cam malzemenin kuantum termodinamiği açısından bir kuantum ısı makinesi olarak çalıştığı, spin cam fazından ferromanyetik, spin cam fazından antiferromanyetik fazlara geçişlerde ele alınacak manyetik sistemin kuantum ısı makinesi gibi davranabildiği fiziksel süreçler üzerine yoğunlaşılacaktır. Bununla beraber, spin-cam fazında ve ayrıca bu fazlar arasındaki geçişlerde manyetik sistemin ısı makinesi olarak çalıştığı gösterilerek kuantum ısı makinesinin spin fazlarını belirleyen etkileşim parametrelerine bağlılığının nasıl olduğu belirlenecek ve fazlar arasındaki kuantum ısı makinesinin etkileşim parametresi, sıcaklık, dış manyetik alan gibi Hamiltonyen parametrelerine olan bağlılığı ve tüm fazlardaki kuantum ısı makinelerinin iş ve verimlerini ayrı ayrı belirlemek üzerine hesaplamalar yapılacaktır. Model olarak üçgen bir hücre üzerinde bulunan $(1/2, 1, 1/2)$ üç spinden oluşan karma Heisenberg XXZ manyetik sistemi için dış homojen manyetik alan altında spinler arası etkileşim sabiti olan J parametresi değerlerine göre belirlenen Spin-cam, Antiferromanyetik ve Ferromanyetik faz durumlarının değişimleri belirlenecektir. Öncelikle ele alınan kuantum sistemin tasviri yapılarak Hamiltonyen denklemi ve bu denklemden yola çıkılarak elde edilen enerji değerleri verilecek, daha sonra kuantum mekaniği ve istatistik mekanik formülasyonları aracılığı ile kuantum Otto çevrimi ele alınarak sistemin iş ve verim gibi fiziksel özelliklerinin

hesaplanması yöntemi tartışılarak sıcaklık, manyetik alan ve etkileşim çiftlenim parametresi gibi değişkenlere bağlı olarak nasıl değiştiği incelenecektir. Özetle tezin organizasyonu şu şekildedir:

İkinci bölümde, tezin amacına yönelik olarak kullanılacak olan termodinamiğin yasaları, klasik ısı makineleri, kuantum termodinamik ve kuantum ısı makineleri detaylı olarak açıklanacaktır.

Üçüncü bölümde, öncelikle kuantum Heisenberg spin sistemleri tanıtılacaktır. Ardından manyetik faz sistemleri ele alınıp manyetik faz olan spin-cam fazı ayrıntılı olarak anlatılarak spin-cam sistemlerde bunalım ve düzen parametresi incelenecektir. Daha sonra üçgen hücre üzerinde yer alan ve dış homojen manyetik alan altında üç spinli karma Heisenberg XXZ modeli kullanılarak sistemin Spin-cam, Antiferromanyetik ve Ferromanyetik faz durumlarının değişimleri sistemin yaptığı iş ve sahip olduğu verim kavramları üzerinden incelenecektir.

Dördüncü bölümde, üçüncü bölümde modele ait iş ve verim durumlarını incelediğimiz Heisenberg XXZ spin sistemine ait bulgulara yer verilecektir.

Tezin son bölümü olan beşinci bölümde ise yaptığımız hesaplamalar sonucu elde ettiğimiz bulgular tartışılarak çalışma sonlandırılacaktır.

2. GENEL KISIMLAR

2.1. TERMODİNAMİĞİN YASALARI

Klasik termodinamik, Sadi Carnot'un [1] 1824 yılında yaptığı "Réflexions sur la puissance motrice du feu et sur les machines propres à développer cette puissance" başlıklı ufuk açıcı çalışmasına dayanarak 1850 ve 1860 yılları arasında W. Thomson (Lord Kelvin), R. Clausius ve J. C. Maxwell tarafından kurulmuştur. R. Mayer ve J. P. Joule'un yaptığı deneysel çalışmalar sayesinde, 1700 ve 1800 yılları arasında ısı ve doğası hakkındaki ilk çalışmalara hakim olan kalori teorisinin ötesine geçilmiştir. Yaptıkları çalışmalarda mekanik iş ve ısı arasındaki nicel eşdeğerlik için sayısal bir değer elde edilmiştir. Böylece, "kalorik" olarak adlandırılan maddi olmayan bir kavram deneysel olarak reddedilmiştir. Mayer ve Joule'un bulguları aynı zamanda birinci yasanın (enerjinin korunumu) gelecekteki ifadeleri için de temel oluşturmuştur.

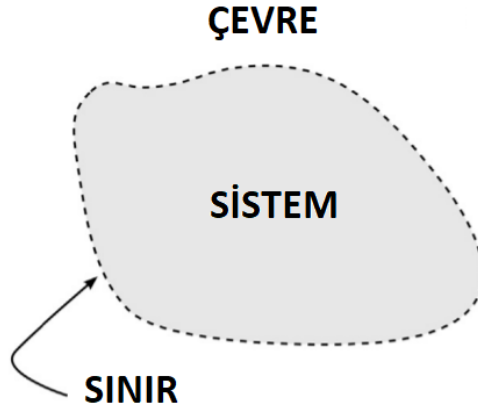
Burada, ısı motorlarının araştırılmasının ve ısıнын mekanik işe dönüştürülmesinin sınırlarının termodinamiğin birinci yasasının ifadesinden önce geldiğini belirtmekte fayda vardır. Bunun nedeni, bu enerji dönüşümünün (buhar motoru; 18. yüzyılın ikinci yarısı) önce mevcut kısıtlamalara dikkat çekmesi ardından da ısıнын doğasının net bir şekilde anlaşılması ve ısı ile mekanik iş arasındaki niceliksel eşdeğerliğin (19. yüzyılın ortaları) ortaya çıkmasıdır. Sonraki yıllarda Clausius, Carnot'un "Réflexions" çalışmasına daha güçlü bir matematiksel temel sağladı ve ikinci yasanın açık bir ifadesini geliştirerek (1864) entropi kavramını, S 'yi tanıttı. Entropi kavramı, fizik biliminde belki de en karmaşık kavramlardan biri olarak yerini almaktadır. Bu kavram sadece termodinamik için değil, aynı zamanda fiziğin diğer alan ve disiplinlerinde de (örneğin, bilgi teorisi) kullanılmaktadır. Entropinin başka bir tanımı 19. yüzyılın ikinci yarısında, H-teoremi aracılığı ile L. Boltzmann tarafından verilmiştir. Bu teoreme göre ölçülebilir basınç P , hacim V ve sıcaklık T ile tanımlanan sisteme ait herhangi bir makroskopik termodinamik durum sistemin mikrodurumlarının sayısı olan N ile üretilebilir. Makro durumların olasılığı N ile orantılıdır ve Boltzmann, en olası makro durum ile maksimum mikro durum sayısının ilişkilendirilebileceği bir denge durumu olduğu sonucuna varmıştır. Sonuç olarak, $S = k \times \log N$ (k , Boltzmann sabiti) şeklinde verilen

Boltzmann formülü nedeniyle böyle bir denge durumunun entropisi de maksimum olmalıdır. P , V ve T gibi belirli parametreler tarafından tanımlanan herhangi bir termodinamik sistem tersinmez bir yol aracılığı ile denge durumuna sahip olmak istemektedir. Boltzmann'a göre bu tersinmezliğin istatistiksel nitelikte olduğunu söylenebilir. Başka bir deyişle, bir sistemin daha düşük bir entropi durumuna kayması son derece düşük bir olasılıkla mümkün olsa da, maksimum entropili denge durumu en olası durumdur.

20. yüzyılın başlarında, klasik mekanikte tersinirlik (veya zamana göre simetri) ve termodinamikte tersinmezlik hakkında zengin bir tartışma yaşanmıştır. Bu konuda Caratheodory, Ehrenfest, Hilbert ve Nerst tarafından temel düzeyde önemli katkılar sunulmuştur. Sonuncusu, mutlak entropi (1906) kavramıyla karakterize edilen üçüncü bir termodinamik kanunu önermiştir. $T = 0$ 'da (T , mutlak sıcaklık) herhangi bir sistem için $S = 0$ olduğu varsayılmıştır. Bu, iki durum arasındaki entropi farklarının hesaplanabileceği bir pozitif mutlak entropi ölçeğinin tanımını mümkün kılmıştır. 20. yüzyıl boyunca çok sayıda bilim insanı termodinamiğin yasalarını ısı-ış dönüşüm problemlerinden başka denge sistemlerinden uzak, karmaşıklığın kendi kendine örgütlenmesi ve büyümesi gibi biyolojik, ekonomik ve sosyal problemlere de uygulamıştır. Onsager, Prigogine, Georgescu-Roegen, Lotka ve Odum gibi bilim insanları bu tartışmalara büyük katkılarda bulunmuşlar ve termodinamik yasalarını yeniden formüle ederek geliştirmişlerdir.

Şimdi, öncelikle termodinamik sistem ve çevre ile klasik termodinamiğin yasalarını açıklayalım:

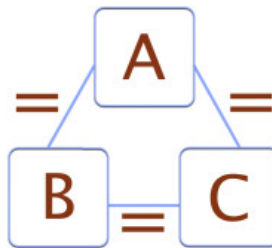
Termodinamik Sistem ve Çevre: Bilim insanları karışıklığı önlemek için termodinamiksel nicelikleri bir sistem ve çevresini referans alarak tanımlamışlardır. Termodinamik sistem ve çevresi bir sınırla ayrılmıştır. Örneğin, eğer kapalı bir kapta 1 mol gaz varsa sınır sadece kabın iç duvarıdır. Bu sınırın dışındaki herşey kabın kendisini de içeren çevre olarak kabul edilmektedir. Termodinamik sistemler tanımlanırken sınır açıkça belirlenebilmelidir. Böylece, dünyanın belirli bir bölümünün sistemde mi yoksa çevrede mi olduğu açıkça söylenebilir. Eğer madde, belirlenen sınırı geçemiyorsa sistem 'kapalı sistem', geçiyorsa sistem 'açık sistem' olarak isimlendirilir. Ele alınan sistem izole edilmiş bir sistem olmadığı sürece kapalı bir termodinamik sistem çevresi ile hala enerji alışverişinde bulunabilir (Şekil 2.1).



Şekil 2.1: Termodinamik sistem, çevre ve sınırı

Klasik termodinamiğin yasaları, termodinamik sistemleri karakterize eden sıcaklık, enerji ve entropi gibi temel fiziksel büyüklükleri tanımlamaktadır ve şu şekilde verilmektedir:

Sıfırıncı yasa: Klasik termodinamiğin sıfırıncı yasasına göre iki sistem, birbiriyle etkileşim içerisindeyken aralarında ısı veya madde alışverişi olmuyorsa bu sistemler, termodinamik olarak dengededir. Sıfırıncı yasa, (ilk olarak on sekizinci yüzyılda Joseph Black tarafından ve çok daha sonra Guggenheim tarafından isimlendirilmiştir) evrensel bir sıcaklık ölçeğinin matematiksel tanımının inşaa edilmesine olanak sağlamaktadır. Şekil 2.2’de eğer A ve B sistemleri termodinamik dengedeyse ve B ve C sistemleri de termodinamik denge içerisindeyse; A ve C sistemleri de termodinamik denge içerisindeydir. Bu yasa sıcaklık kavramını doğrulamaktadır. Örneğin, B ’nin bir termometre olduğunu varsayarsak A ve C ’nin sıcaklığını ölçmek için B kullanılırsa ve A ve C ’nin aynı sıcaklığa sahip olduğu görülürse, A ve C termal olarak temas halindeyse ısı akışı gerçekleşmeyecektir. Bu yasa, termal denge ilişkisinin bir denklik ilişkisi olduğu iddiasını öne süren termodinamiğin, matematiksel formülasyonu için oldukça önemlidir. Bu yasa ile bir sistem termal dengedeyse, enerjinin hacim üzerinde eş yönlü olarak dağıldığı varsayılır. Sistemin enerjisi arttıkça sistemin sıcaklığı da artar ($dU/dT > 0$).



Şekil 2.2: Temas eden üç cisim modeli

Birinci yasa: Termodinamiğin birinci yasasına göre bir sistemin iç enerjisindeki değişim sisteme verilen ısı ile sisteme çevre tarafından uygulanan iş'in toplamıdır. Bu yasa "enerjinin korunumu" olarak da bilinmektedir.

Bir termodinamik sistemin bir durumdan diğerine geçişine eşlik eden durum fonksiyonundaki değişiklik, bu durumlar arasındaki yola değil, yalnızca başlangıç ve son durumlara bağlıdır. Sistem orijinal durumuna dönerse,

$$\oint dU = 0 \quad (2.1)$$

bu değişimin integrali sıfır olacaktır.

Bu tür sistemler 'döngüsel süreç' (cyclic process) olarak isimlendirilir. Birinci yasanın Poincare ifadesi, döngüsel bir süreçte, sistem tarafından yapılan iş, sistem tarafından alınan ısıya eşittir. Termodinamiğin birinci yasasına göre, kapalı bir sistemde iç enerjinin U 'nun durum fonksiyonu, sistem tarafından alınan ısı δQ ile çevre tarafından sistem üzerine yapılan iş δW 'nin toplamı şeklinde ifade edilir:

$$dU = \delta Q + \delta W \quad (2.2)$$

Burada, sistem iş yaptığında δW değeri negatif, sistem üzerine iş yapıldığında ise δW değeri pozitif alınır.

Isı ve iş değişimleri, değişimin yoluna bağlıdır ve durum fonksiyonları değildir. Bu nedenle, yalnızca başlangıç ve son durumlara bağlı olan bir Q veya W fonksiyonu tanımlamak mümkün değildir. Açık bir sistem dikkate alındığında ısı transferi ve madde alışverişi nedeniyle bir enerji akışı söz konusudur. Enerjinin korunumu, herhangi bir hal değişiminde toplam enerjinin korunduğunu belirtir. Toplam enerji; sistemin iç, kinetik ve potansiyel enerjisinin, ısıнын ve işin türünün (elektriksel, mekaniksel veya kimyasal iş gibi) toplamıdır.

İkinci yasa: Termodinamiğin ikinci yasası, doğal süreçlerin geri döndürülemezliğini, doğal süreçlerin madde ve enerjinin ve özellikle sıcaklığın uzamsal homojenliğine yol açma eğiliminde olduğunu ifade etmektedir. Bu yasa çeşitli şekillerde formüle edilebilir. Verilebilecek en basit örneklerinden biri, ısıнын daha soğuk bir cisimden daha sıcak bir cisme kendiliğinden geçmediğini ifade eden Clausius ifadesidir. Bu durum bir termodinamik sistemin entropisi adı verilen niceliğın varlığına işaret etmektedir. Bu yasa ile izole edilmiş bir sistemin toplam entropisinin zamanla daima arttığı veya sistemin kararlı halde olduğu veya tersinir bir süreç varlığında sabit kaldığı ifade edilir. Uzayın ayrı fakat yakın bölgelerinde, her biri kendi kendisiyle termodinamik dengede olan, ancak birbirleriyle termodinamik dengede olma zorunluluğu olmayan iki izole edilmiş sistem, daha sonra etkileşime girmeleri izin verildiğinde, karşılıklı olarak termodinamik dengeye ulaşacaklardır. Başlangıçta izole edilmiş sistemlerin entropilerinin toplamı, etkileşim sonucunda elde edilen son kombinasyonun toplam entropisinden küçük veya ona eşittir. Bu eşitlik, iki orijinal sisteme ait değişkenlerin (sıcaklık, basınç vb.) eşit olması durumunda gerçekleşir; böylece son sistem de aynı değerlere sahip olacaktır.

İkinci yasa, tersinir ve tersinir olmayan çok çeşitli süreçler için geçerlidir. Tüm doğal süreçler tersinir olmayan süreçlerdir. Tersinir bir ısı transferinde, transfer edilen ısı δQ , hem sistemin hem de ısı kaynaklarının sıcaklığı olan T ile sistemin entropisi olan S 'nin artışı dS 'nin çarpımı ile ifade edilmektedir:

$$\delta Q = T dS \quad (2.3)$$

Tersinir süreçler yararlı ve uygun bir teorik sınırlayıcı durum olsa da, tüm doğal süreçler geri döndürülemez süreçlerdir. Bu tersinmezliğin en iyi örneği, iletim veya radyasyon yoluyla meydana gelen ısı transferidir. Entropi, yalnızca makroskopik durumlar bilindiğinde, bir sistemin hareketinin ve konfigürasyonunun mikroskopik ayrıntılarıyla ilgili fiziksel bir ölçü olarak da görülebilir. Mikroskopik veya moleküler ölçekte düzensizlik veya enerji dağılımı olarak isimler verilebilen entropi, sistemin sadece makroskopik durumları bilindiğinde, hareketinin ve konfigürasyonunun mikroskopik detayları hakkında fiziksel bilgi eksikliğinin bir ölçüsü olarak görülmektedir.

Üçüncü yasa: Termodinamiğin üçüncü yasası birkaç şekilde ifade edilebilir [2]. Örneğin, bir sistemin sıcaklığını sonlu bir zamanda sıfıra düşürmek imkansızdır ve bir sistemin entropisi, sıcaklık sıfıra yaklaştıkça sabit bir değere yaklaşır.

Sıfır sıcaklıkta, sistem minimum termal enerjili durumda, yani temel durumda olmalıdır. Bu noktada entropinin sabit değerine (mutlaka sıfır olmak zorunda değildir), sistemin rezidüal entropisi denir. Termodinamik bir sistem için minimum termal enerjiye sahip durum yalnızca bir konfigürasyona veya mikro duruma sahiptir. Bu durumda yani sistem benzersiz bir temel duruma sahip olduğunda entropi değeri sıfıra ulaşır. Mikrodurumlar, bir sistemin belirli bir durumda olma olasılığını tanımlamak için kullanılmaktadır. Her bir mikrodurumun aynı anda meydana gelme olasılığına sahip olduğu varsayılır, bu nedenle daha az mikrodurumlu makroskopik durumların meydana gelme olasılığı daha düşüktür. Genel olarak entropi, Boltzmann ilkesine göre olası mikro durumların sayısı ile ilgilidir:

$$S = k_B \ln \Omega \quad (2.4)$$

Burada, sistemin entropisi S , Boltzmann sabiti k_B ve mikrodurumların sayısı Ω ile ifade edilmektedir. Mutlak sıfır sıcaklığında sadece bir mikrodurum mümkündür ($\Omega = 1$, $\ln(1) = 0$).

2.2. KLASİK ISI MAKİNELERİ

Isı makineleri, iki termal rezervuar arasındaki ısı değişiminden meydana gelen sıcaklık farkını mekanik işe dönüştürebilen çevrimsel sistemlerdir (Şekil 2.3). Bu çevrim süreçleri boyunca sistem çevresi ile ısı ve iş alışverişi yapmaktadır. Isı soğutulması aracılığı ile iş çıktısının iş girdisini baskıladığı durumlarda bu sistemler bir ısı makinesi görevi görürken ısı girdisinden daha büyük bir ısı çıktısı oluşturmak için iş harcanırsa sistem bir ısı pompası görevi görecektir.

Termodinamiğin klasik yasalarının anlaşılması bir enerji biçiminin (örneğin, ısı) başka bir enerji biçimine (örneğin, iş) dönüştüren, buharlı makinelerin geliştirilmesine yol açmıştır. Bu durumun sonucu olarak da sanayi devrimi başlamıştır. İlk buharlı lokomotifler 1800'lü

yıllarda buhar makinelerinin icat edilmesinden sonra kullanılmaya başlanmıştır. Buharlı makine termal enerjiyi (ısı) mekanik enerjiye (iş) dönüştürmektedir. Buhar motorunun verimliliği her iki yönde hareket eden valfin pistonları sağa ve sola hareket ettirerek her iki tarafa doğrudan trenin ileri hareketini oluşturmalarını sağlamıştır.

Isı motorlarının yapımında ve uygulanmasında önemli bir soru ortaya çıkmaktadır. İş yapmak için kullanılabilecek maksimum ısı oranı nedir? Bu soru ancak termodinamiğin ikinci yasasıyla yanıtlanabilir. Termodinamiğin ikinci yasası birkaç şekilde ifade edilebilir. Sunulan en önemli ifade, Clausius ifadesi olarak bilinen kendiliğinden ısı akışının yönü ile ilgilidir. Yapılan diğer ifadeler ise ısı makineleri ile ilgilidir. Isı motorlarını, buzdolapları ve ısı pompaları gibi cihazları düşündüğümüzde, ısı ve iş kavramları için normal işaret kuralı kullanılmamaktadır. Kolaylık olması açısından, Q_H , Q_L ve W sembolleri, aktarılan ısı miktarlarını ve elde edilen iş miktarını temsil etmektedir. Isının bir sisteme girip girmediği ve bir sistem üzerine veya sistem tarafından iş yapılıp yapılmadığı, sembollerin önünde uygun işaretlerle ve diyagramlarda yer alan okların yönleriyle gösterilir.

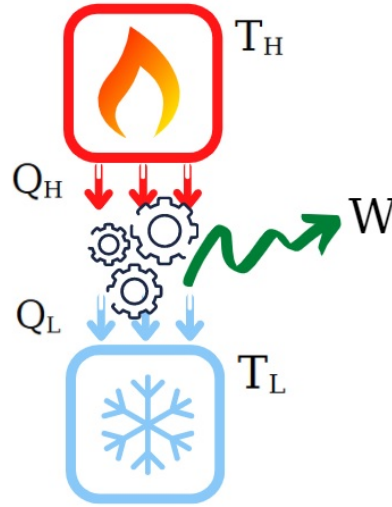
Bir ısı makinesi inşa etmek için birden fazla ısı kaynağına/banyosuna ihtiyaç bulunmaktadır. Bu noktada, bir ısı kaynağı (yüksek sıcaklık rezervuarı veya sıcak rezervuar) ile bir soğutucu (düşük sıcaklık rezervuarı veya soğuk rezervuar) arasında şematik olarak gösterilen ısı makinesi Şekil 2.3'de gösterilmektedir. Burada, ısı makinesi, T_H sıcaklığındaki bir ısı kaynağından (sıcak rezervuar) Q_H kadar ısıyı absorbe ederken bu enerjinin bir kısmını faydalı iş W üretmek için kullanır ve sonra kalan enerjiyi Q_L ısı olarak sıcaklığı T_L olan ısı banyosuna (soğuk rezervuar) bırakmaktadır.

Enerji santralleri ve içten yanmalı motorlar ısı makinelerine verilebilecek iyi örneklerdir. Enerji santralleri, bir ısı banyosu gibi davranarak atmosfere veya yakındaki bir su kütlesine ısı verirken, elektrik jeneratörlerini çalıştırmak için yüksek sıcaklıkta üretilen su buharını kullanmaktadır. Bir içten yanmalı motorda, bir pistonu itmek için sıcak gaz-hava karışımı kullanılmaktadır ve ısı benzer şekilde yakınındaki atmosfere verilir.

Klasik ısı makineleri, yanmalı makinelerden moleküler makinelere kadar çok çeşitli ölçeklerde karşımıza çıkmaktadır [3, 4]. En küçük klasik ısı makineleri, sıvılarda optik olarak tuzaklanmış mikropartiküller [5] kullanılarak elde edilmiş ve vakumda tuzaklanan nanoparçacıkların [6] kullanılması da önerilmiştir. Bu tür küçük sistemler ile onları çevreleyen rezervuarlar arasındaki dalgalanma, parçacıkların Brownian hareketi izlenerek

yakalanabilir. Parçacığın kendisini çevreleyen rezervuardan daha sıcak olduğu denge dışı durumlar çalışılmıştır [7, 8].

Bir sistemin iç enerjisi, klasik makroskopik sistemlerdeki değişkenler olan basınç ve hacim (mekanik büyüklükler) veya sıcaklık ve entropi (termal büyüklükler) gibi eşlenik bir çiftin ürünü olarak ifade edilir [9, 10]. Bir termodinamik çevrimin temsil edilmesi için bu tür çiftleri kullanmak bu çevrimin matematiksel alanının sistem tarafından üretilen net işe eşit olduğu gibi biçimsel bir tanımlamaya bizi ulaştıracaktır. Dolayısıyla bahsedilen eşlenik değişken çiftlerinden tüm termodinamik özellikler türetilir. Termodinamik süreçlerin çok sayıda farklı kombinasyonu göz önüne alındığında genellikle onu keşfeden bilim insanlarının adını taşıyan farklı idealleştirilmiş çevrimler tanımlayabiliriz. İdealleştirilmiş çevrimler bir fiziksel değişkenin süreç içinde sabit tutulduğu süreç olarak ifade edilebilir. Gerçek ısı makineleri için termodinamik çevrimler idealize edilmiş örneklerden önemli ölçüde farklılıklar gösterebilir.



Şekil 2.3: Isı makinesinin şematik gösterimi. Isı enerjisi sıcak rezervuardan (T_H) soğuk rezervuara (T_L) akış gösterirken sistem iş (W) yapmaktadır.

Ele aldığımız ısı makinesi çevrimlerinin tersinir olduğu varsayımı ile sürtünme veya diğer tersinmez etkiler üzerine enerji kaybının olmadığı dikkate alınırsa ısı makinesi tarafından elde edilen iş W , Q_H ile Q_L arasındaki fark olan net ısıya (Q_{net}) eşittir.

$$W = Q_{net} = Q_H - Q_L \quad (2.5)$$

Bu ısı makinesinin termal verimliliği (μ) ise makine tarafından elde edilen işin (W) makineye giren Q_H ısısına oranına denir.

$$\mu = \frac{W}{Q_H} = \frac{Q_{net}}{Q_H} = \frac{Q_H - Q_L}{Q_H} \quad (2.6)$$

İlk bakışta, ısısının tamamının iş'e dönüştürülebilmesi mümkün görülebilir ve bu düşünce Termodinamiğin I. Kanununa da aykırı değildir. Fakat bütün ısı makinelerinin aldığı yüksek ısısın ne kadarını iş'e dönüştürebileceğinin, dolayısıyla verimin teorik sınırını belirleyen Carnot prensibi ile hiçbir ısı makinesi için ve makro boyutta ele alındığında doğadaki bütün termal süreçler için verim daima yüzde yüz oranından düşük olarak elde edilecektir. Bu bölümde Carnot ve Otto çevrimleri ele alınacaktır.

1820'lerin başında, Fransız bir mühendis olan Sadi Carnot (1786-1832), ısı makinelerinin verimliliğini artırma ile ilgilenmeye başladı. 1824'te, yaptığı çalışmalar onu aynı iki rezervuar arasında mümkün olan en yüksek verimliliğe sahip varsayımsal bir termodinamiksel çevrim (Carnot çevrimi) önermeye yöneltti [1]. Bu termodinamiksel çevrimde çalışan bir makineye Carnot ısı makinesi adı verilmektedir. Pratik düzeyde, bu çevrim buharlı makineler, buzdolabı veya ısı pompaları için tersine çevrilebilir bir modeli temsil ettiği için oldukça önemlidir. Diğer yandan klasik Carnot ısı makineleri termodinamiksel çevrimde yalnızca iki rezervuar bulundurduğundan mutlak sıcaklık ölçeğini tanımlamak için termodinamiğin ikinci yasasıyla birlikte kullanılabilir.

Çalışma maddesi olarak ideal bir gaz ele alındığında, Şekil 2.4 ile gösterildiği gibi Carnot çevriminin adımları aşağıdaki gibidir:

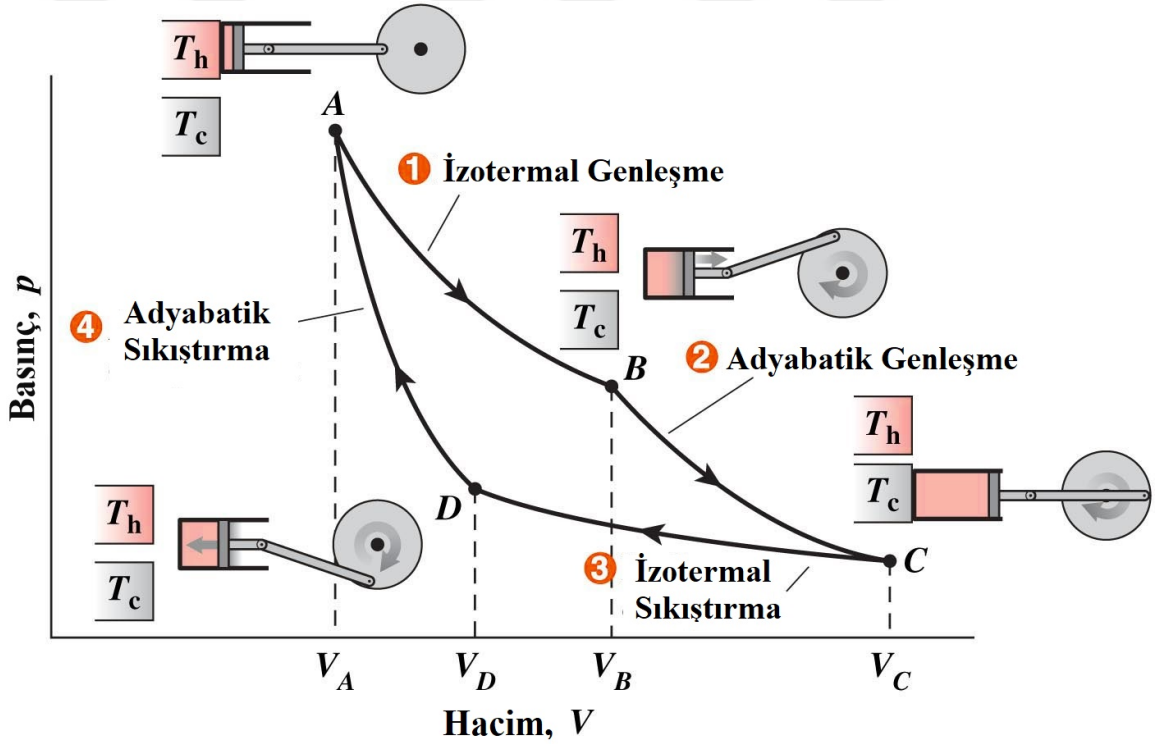
- **İzotermal Genleşme:** İdeal gaz, T_H sıcaklığındaki bir ısı rezervuarı ile termal olarak temas halindedir. İdeal gaz ısı rezervuarından Q_H ısını absorbe eder ve W_1 işi yaparak izotermal olarak genleşmesine izin verilir. İdeal bir gazın iç enerjisi E_{int} yalnızca sıcaklığın bir fonksiyonu olduğundan, izotermal genleşme sırasında iç enerjinin değişimi sıfırdır ($E_{int} = 0$). Termodinamiğin birinci yasası olan $E_{int} = Q - W$ eşitliği ile, gaz tarafından absorbe edilen ısı miktarı,

$$Q_H = W_1 = nRT_H \ln \frac{V_B}{V_A} \quad (2.7)$$

ile verilmektedir.

- **Adyabatik Genleşme:**

İdeal gaz termal olarak yalıtılmıştır ve W_2 işi yaparak daha da genleşmesine izin verilir. Bu genleşme adyabatik olduğundan gazın sıcaklığı T_H 'den T_L 'ye düşmektedir. pV^γ değeri sabit olduğundan ideal gaz denklemi $PV = nRT$ ile TV^γ sabit olur ve $T_H V_B^{\gamma-1} = T_L V_C^{\gamma-1}$ elde edilir.



Şekil 2.4: Klasik Carnot Isı Makinesi Çevrimi (Bu diyagramda yer alan yüksek sıcaklık gösterimi T_h metinde T_H olarak, düşük sıcaklık gösterimi olan T_c ise metinde T_L olarak ifade edilmiştir. 2007, Pearson Education, Inc., publishing as Pearson Addison-Wesley)

- **İzotermal Sıkıştırma:**

İdeal gaz, T_L sıcaklığındaki soğuk bir rezervuarla termal olarak temas haline getirilir ve izotermal olarak sıkıştırılır. Bu işlem sırasında ideal gaz üzerinde W_3 iş yapılır ve ideal gaz soğuk rezervuara Q_L kadar ısı verir. 1. çevrime benzer olarak,

$$Q_L = W_3 = nRT_L \ln \frac{V_C}{V_D} \quad (2.8)$$

elde edilir.

- **Adyabatik Sıkıştırma:** İdeal gaz termal olarak izole edilir ve sıkıştırma işlemi ile ilk durumuna geri döndürülür. Bu süreçte gaz üzerinde W_4 işi yapılır. Sıkıştırma adyabatik olduğundan, gazın sıcaklığı T_L 'dan T_H 'a yükselir. 2. adıma benzer olarak, $T_L V_D^{\gamma-1} = T_H V_A^{\gamma-1}$ elde edilir.

Klasik Carnot ısı makinesi çevriminde gazın yaptığı toplam iş şu şekilde verilir:

$$W = W_1 + W_2 - W_3 - W_4 \quad (2.9)$$

Bu iş, Şekil 2.4 ile verilen pV diyagramında çevrim çizgilerinin çevrelediği alana eşittir. Sistemin ilk ve son durumları aynı olduğundan, çevrimdeki gazın iç enerji değişimi sıfır olmalıdır ($E_{int} = 0$). Termodinamiğin 1. yasasına göre,

$$W = Q - E_{int} = (Q_H - Q_L) - 0 \quad (2.10)$$

elde edilecektir.

Klasik Carnot ısı makinesinin veriminin hesaplanması için ise öncelikle,

$$\frac{Q_L}{Q_H} = \frac{T_L \ln V_C/V_D}{T_H \ln V_B/V_A} \quad (2.11)$$

şeklinde Q_L/Q_H oranı bulunur. Isı makinesi çevriminin 2. ve 4. basamaklarında elde edilen $\frac{V_C}{V_D} = \frac{V_B}{V_A}$ bağıntısı yerine yazılırsa verim,

$$e = 1 - \frac{T_L}{T_H} \quad (2.12)$$

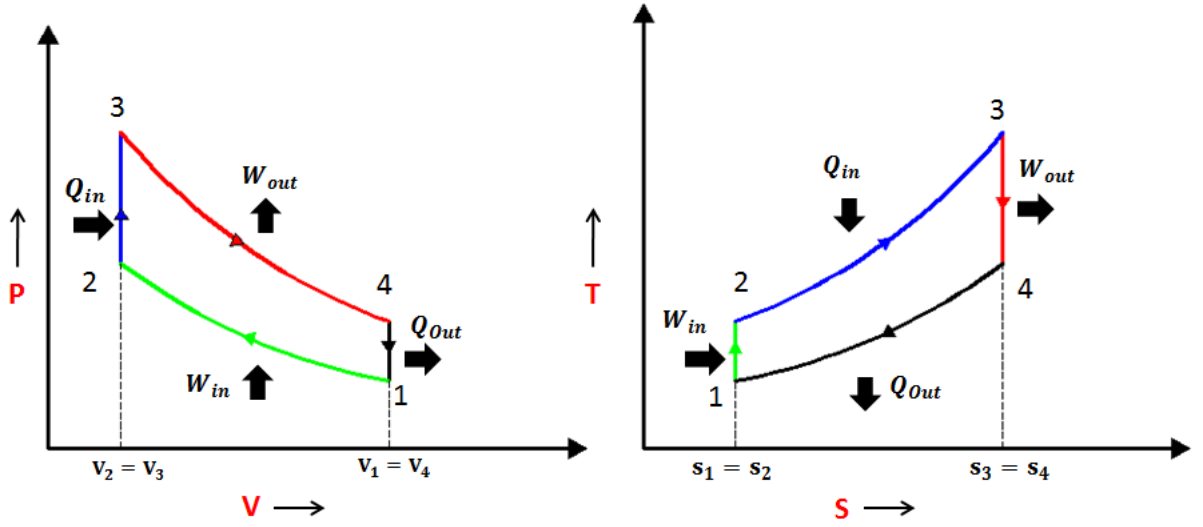
olarak elde edilmiş olur.

1876'da Nikolaus August Otto, Otto çevrimini keşfetmiştir. Hemen hemen tüm benzinli motorlar Otto çevrimi temelinde çalışmaktadır. Otto çevriminin işleyişi Dizel çevrimi ile benzerlik göstermektedir. Aralarındaki en büyük fark, Dizel çevriminde ısı sabit basınç durumunda eklenirken, Otto çevriminde ısı eşit hacimde eklenmektedir. Diğer yandan Otto çevrimi, Dizel çevriminin sıkıştırma oranından daha düşük olan 7:1 ile 10:1 arasında bir sıkıştırma oranı aralığına sahiptir.

Klasik Otto makinesi, Carnot makinesi gibi yüksek bir T_H sıcaklığı ile düşük bir T_L sıcaklığındaki iki ısı kaynağı arasında çalışan bir ısı makinesi değildir. Bu makinede dört ayrı sıcaklık noktası bulunmaktadır ve bu noktaların sıcaklık hiyerarşileri de şöyle verilebilir (Şekil 2.5):

$$T_2 > T_1, T_3 > T_2, T_4 < T_3, T_4 > T_1 \quad (2.13)$$

Klasik Otto çevrimi iki sabit hacim ve iki izentropik (adyabatik) işlemten meydana gelir. Şekil 2.5 deki $P - V$ ve $T - S$ diyagramlarından faydalananak basitçe şöyle anlatılabilir: Çalışma maddesi (ideal gaz, gerçekte yakıt hava karışımı), 1 noktasından 2 noktasına kadar izentropik olarak sıkıştırılır. Sıkıştırma sonunda çalışma maddesinin basıncı ve sıcaklığı artar. 2 noktasından 3 noktasına kadar çalışma maddesine sabit hacimde dışarıdan ısı verilir. Böylece basınç ve sıcaklık tekrar artar. 3 noktasında basınç ve sıcaklık maksimum değerine ulaşır. 3 noktasından, 4 noktasına kadar basıncın etkisi ile silindirdeki piston aşağıya doğru itilir ve bu genişleme izentropik bir genişlemedir. 4 noktasından 1 noktasına kadar sabit hacimde çalışma maddesinden dışarıya ısı atılır ve 1 noktasında sistem, en baştaki koşullarına döner ve çevrim tamamlanır. $T - S$ diyagramı üzerinde S entropiyi ifade eder ve izentropik bir işlemde entropi sabittir.



Şekil 2.5: Otto çevrimi için $P-V$ ve $T-S$ diyagramları.

- **İzentropik sıkıştırma:**

Klasik Otto çevriminde 1 noktasındaki çalışma maddesi 2 noktasına kadar izentropik olarak sıkıştırılır. 1 noktasında karışımın sıcaklığı T_1 ve basıncı P_1 dir. 2 noktasında sıcaklık T_2 ye basınç ise P_2 ye çıkacaktır. Bu esnada piston dış bir kuvvet tarafından itilir. İzentropik hal değişimlerinde ısı transferi söz konusu değildir. İdeal gaz denkleminde hareketle,

$$P_1 \times V_1^k = P_2 \times V_2^k \quad (2.14)$$

yazılabilir. Buradan,

$$\frac{P_2}{P_1} = \frac{V_1^k}{V_2^k} \rightarrow \frac{P_2}{P_1} = \left(\frac{V_1}{V_2} \right)^k \quad (2.15)$$

elde edilir. Burada V_1 silindir hacmini, V_2 ise yanma odasının hacmini ifade etmektedir. Sıcaklık ve hacim arasındaki bağıntı için de

$$T_1 \times V_1^{k-1} = T_2 \times V_2^{k-1} \quad (2.16)$$

yazılabilir. Buradan,

$$\frac{T_2}{T_1} = \frac{V_1^{k-1}}{V_2^{k-1}} \rightarrow \frac{T_2}{T_1} = \left(\frac{V_1}{V_2} \right)^{k-1} \quad (2.17)$$

elde edilir. Böylece 1-2 noktaları arasındaki $T - P$ ilişkisi

$$P_1^{\frac{1}{k-1}} \times T_2 = P_2^{\frac{1}{k-1}} \times T_1 \quad (2.18)$$

- **Sabit hacimde ısı verilmesi:**

Klasik Otto çevriminde, 2 noktasındaki çalışma maddesine sabit hacimde ısı verilmek suretiyle çalışma maddesi 3 noktasına kadar ısıtılarak basıncı P_3 ve sıcaklığı T_3 değerlerine yükseltilir. Sabit hacimde ısı verilmesi sonucu oluşan P_3 ve sıcaklığı T_3 değerlerine ideal gaz denkleminde ulaşılabilir:

$$\frac{P_2 \times V_2}{T_2} = \frac{P_3 \times V_3}{T_3} \quad (2.19)$$

Burada ısı verme işlemi sabit hacimde olduğundan $V_2 = V_3$ tür. Gerekli sadeleştirmeler ile,

$$\frac{P_2}{T_2} = \frac{P_3}{T_3} \text{ ve } \frac{T_3}{T_2} = \frac{P_3}{P_2} \quad (2.20)$$

elde edilir.

- **İzentropik genleşme:**

Klasik Otto çevriminde 3 noktasındaki çalışma maddesi 4 noktasına kadar izentropik olarak genişletilir. 3 noktasında karışımın sıcaklığı T_3 ve basıncı P_3 tür. 4 noktasında sıcaklık T_4 e basınç ise P_4 e düşecektir. 3-4 noktaları arasındaki piston üzerindeki basınç etkisi ile itilecek ve hal değişimi boyunca pozitif bir iş elde edilecektir. İzentropik hal değişimlerinde ısı transferi yoktur. İdeal gaz denkleminde hareketle,

$$P_3 \times V_3^k = P_4 \times V_4^k \quad (2.21)$$

yazılabilir. Buradan,

$$\frac{P_4}{P_3} = \frac{V_3^k}{V_4^k} \rightarrow \frac{P_4}{P_3} = \left(\frac{V_3}{V_4} \right)^k \quad (2.22)$$

elde edilir. Burada $V_1 = V_4$ ve $V_2 = V_3$ tür. Sıcaklık ve hacim arasındaki bağıntı için de

$$T_3 \times V_3^{k-1} = T_4 \times V_4^{k-1} \quad (2.23)$$

yazılabilir. Buradan,

$$\frac{T_4}{T_3} = \frac{V_3^{k-1}}{V_4^{k-1}} \rightarrow \frac{T_4}{T_3} = \left(\frac{V_3}{V_4} \right)^{k-1} \quad (2.24)$$

elde edilir. Böylece 3-4 noktaları arasındaki $T - P$ ilişkisi,

$$P_3^{\frac{1}{k-1}} \times T_4 = P_4^{\frac{1}{k-1}} \times T_3 \quad (2.25)$$

ifadesi ile verilir.

- **Sabit hacimde soğutma:**

Klasik Otto çevriminde izentropik genişlemeden sonra çalışma maddesinin sıcaklık ve basıncı, başlangıç noktasındaki sıcaklık ve basınç değerlerinden yüksektir. Çevrimin tersinir olabilmesi için çalışma maddesinin çevrim sonunda başlangıçtaki özelliklerine sahip olması gerektiğinden, sabit hacimde sistemden dışarıya ısı atılarak çalışma maddesi soğutulur ve başlangıçtaki şartlara geri dönüş sağlanmış olur. Burada hacim

sabit olacağından genleşme sonu sıcaklık ve basıncı ile başlangıç sıcaklık ve basıncı arasında ideal gaz denklemi kullanılarak aşağıdaki bağıntılar kurulur:

$$\frac{P_1 \times V_1}{T_1} = \frac{P_4 \times V_4}{T_4} \quad (2.26)$$

Burada dış ortama ısı atma işlemi sabit hacimde olduğundan $V_1 = V_4$ tür. Gerekli sadeleştirmeler ile,

$$\frac{P_4}{T_4} = \frac{P_1}{T_1} \text{ ve } \frac{T_4}{T_1} = \frac{P_4}{P_1} \quad (2.27)$$

elde edilir.

Elde edilen pozitif iş miktarının sisteme giren toplam ısı miktarına oranı, klasik Otto çevriminin verimi olarak bilinir ve

$$e = \frac{Q_H + Q_L}{Q_H} = 1 + \frac{Q_L}{Q_H} = 1 - \frac{T_4 - T_1}{T_3 - T_2} \quad (2.28)$$

ile hesaplanabilir.

2.3. KUANTUM TERMODİNAMİK

Fizik biliminin önemli alt alanlarından biri olan termodinamik, bize karmaşık sistemlerde meydana gelen süreçlerin mikroskobik detaylarını dikkate almadan sistemin bütünsel özellikleri hakkında etkili bir resim sunmaktadır. Üzerine çalışılan bir sistemin sıcaklığı, bu sistemden elde edilen iş veya yaydığı ısı miktarı gibi fiziksel büyüklükler çok sayıda parçacıktan oluşan sistemler için dikkate alınan çok önemli parametrelerdir. Genel bir tanımla, termodinamik geniş alanda uygulanabilir ve makroskopik dünyada meydana gelen her süreç için yasalarının geçerli olduğu bir alandır. Bu makroskopik tanımlamanın dezavantajı ise termodinamiğin zorunlu olarak ortalama büyüklükler ile

ilgilenmeye ihtiyaç duymasıdır. Bu durum, ele alınan sistemin makroskopik olarak çok sayıda parçacıktan oluştuğu durum için geçerli olsa da sistemin boyutu küçüldükçe fiziksel büyüklükler üzerindeki hassasiyet azalmakta ve termal hareketler nedeniyle meydana gelen ortalama büyüklükler etrafından meydana gelen dalgalanmalar (fluctuations) ile ilişkili olmaya başlamaktadır. Makroskobik tanımlamaların başarısız olduğu bu noktada, stokastik termodinamik dikkate alınmaktadır ve termodinamik büyüklüklerdeki dalgalanmalar hakkında daha detaylı bir fikir vermektedir. Stokastik termodinamik aynı zamanda termodinamiksel denge durumlarının ötesine geçer ve denge dışı sistemlerin davranışını tanımlamakta kullanılabilir. Bu durum nano ölçekli veya biyolojik makinelerin araştırılması için son derece önemlidir [11]. Bununla birlikte çok küçük sistemler dikkate alındığında kuantum etkiler ortaya çıkmaktadır. Bu durumda dalgalanmalar sadece termal etkilerden değil kuantum mekaniksel etkilerden de meydana gelebilecektir. Burada, kuantum süreçlerini tanımlayan zamanın tersine çevrilebilirliği ve bu süreci tanımlayan üniter dinamiklerin sürekliliği olarak ulaşmasına yol açmalıdır gibi bazı sorular ortaya çıkmaktadır [12]. Ayrıca, klasik termodinamik ve bilgi teorisini birbirine bağlayan entropi gibi fiziksel büyüklükler kuantum mekaniğinde dikkat çeken bir fenomen olan dolanıklığın kuantum termodinamik çerçevesi içinde ele alınması anlamında da önemli bir rol oynamaktadır. Kuantum sistemler için termodinamiksel büyüklükleri tanımlamak ve ölçmek üzerine literatürde çalışmalar mevcuttur [13–16]. Makroskopik klasik dünyadan mikroskobik kuantum dünyasına geçiş yapılırken termodinamik yasaların yerini koruyup korumadığı sorulabilecek doğal bir sorudur.

Kuantum termodinamik, kuantum mekaniği yasaları çerçevesinde termodinamik süreçlerin incelendiği önemli bir araştırma alanıdır. Uzun yıllar boyunca, yapılan çalışmalarla klasik termodinamik ve kuantum termodinamik teorileri ayrı ayrı geliştirilmiştir. Ancak, Scovil ve diğ. [17, 18] yaptığı çalışmalarda Carnot ısı makinesinin üç seviyeli Maser ile eşdeğerliliğini göstererek yeni gelişmelere zemin hazırlamışlardır. Kuantum teorisinin kurulması ile termodinamiğin kuantum mekaniksel yasalar aracılığı ile ifade edilmesi literatür için de anahtar rol oynamaktadır. İki teori aynı konuyu farklı bakış açıları ile ele almaktadır ve bu durum maddenin içinde bulunduğu durumuna ve dinamiklerine ilişkin tutarlı bir görüş gerektirmektedir.

Termodinamiğin dört yasası, içinde termodinamik süreçlerin bulunduğu bir çerçeve sağlamaktadır. Bu yasalar fenomenolojik bulgulara dayanarak aksiyom olarak tanımlanırlar.

Bu yasalar formüle edilirken genellikle sistem ve çevre (environment) gibi terimler kullanılmaktadır. Burada çevre, termal rezervuarı temsil etmektedir. Bununla birlikte gerçek durumlarda sistem, rezervuar ve onu saran uzay arasında böyle bir ayrılığı temsil eden ayırıcı çizgi yer almamaktadır. Genel olarak, rezervuarların, termodinamik yasaların geçerli olacağı şekilde yeterince büyük olduğu varsayılmaktadır. Ancak kesin olarak söylemek gerekirse, tüm evren ve onu tanımlayan yasalar termodinamik dengeleri dikkate almaktadır. Termodinamik, kendi içinde tutarlı ve bağımsız bir fiziksel teoridir ve sadece dört yasanın varsayımlarına dayanmaktadır.

Bir diğer önemli araştırma alanı olan stokastik termodinamik [11], termodinamiksel niceliklerin dalgalanmasını zamanla gelişen bir sistemin yörüngelerini dikkate alarak açıklamaktadır. Bu durum, dalgalanmaların kolloid yapılar veya mikroskobik biyolojik yapılar gibi küçük sistemlerdeki gibi kayda değer olduğunda ortaya çıkmaktadır. Stokastik termodinamik, sistemlerin dengeden çıktığı süreçleri sınırlayan dalgalanma ilişkilerin keşfedilmesine yol açmıştır [19]. Ünlü Jarzynski [20, 21] ve Crooks [22, 23] bağıntıları, sistemin durumları arasındaki serbest enerji farkını yapılan işle ilişkilendirmektedir ve çeşitli sistemlerde de deneysel olarak doğrulanmıştır. Bu bağıntılar modifiye edilmemiş kapalı sistemler ile küçük değişikliklerle modifiye edilmiş açık sistemler için geçerlidir [24, 25].

Kuantum mekaniksel olarak, iş gözlemlenebilir bir büyüklük değildir [24–27]. Bu nedenle projektif [28], interferometrik [29, 30] ölçümler veya optik spektrum ölçümleri gerçekleştirilerek çıkarılması gerekmektedir [31]. Bununla birlikte, kuantum dalgalanmaları, moleküler [32] ve iyon tuzaklı [33] sistemlerde süperiletken devreler kullanılarak [34] başarıyla ölçülmüştür. İnterferometrik teknikler aynı zamanda kuantum süreçlerde meydana gelen ısı değişimini ölçmek için de kullanılmıştır [35]. Lineer olmayan kuantum dalgalanmaları [26, 28], üzerine çalışılan sistemden iş üretmek için kuantum bilgi teorisi [36], kuantum sistemlerde geri bildirim (feedback) mekanizmaları [37, 38], dalgalanma bağıntılarının kuantum hesaplama alanındaki potansiyel uygulamaları [39, 40] vb. konular güncel araştırma alanlarını oluşturmaktadır.

Klasik termodinamiğin ikinci yasası, sistemin entropisinin değişmediği tersinir süreçler ile sistemin entropisinin artırılarak yapılan işin ısı olarak dağıtıldığı tersinmez süreçler arasında bir ayrım yapmaktadır. Klasik süreçlerde entropinin oynadığı rol kuantum mekaniksel süreçlerde dolanıklık fenomeni ile bir analogi oluşturmaktadır [41–43]. İki durum arasındaki

ayırt edilebilirliğin bir ölçüsü olan dolanıklığın göreceli entropisi termodinamiksel süreçler sırasında artmalıdır. Koherans durumların varlığında serbest enerjinin kullanışlı bir fiziksel büyüklük olup olmadığı konusu ise önemli bir soru olarak karşımıza çıkmaktadır [44, 45]. Ancak klasik teorilerin sonucunda da olduğu gibi kuantum sistemlerinde de [46] maksimum elde edilebilir ortalama iş serbest enerjideki değişime eşittir. Kuantum dolanıklık termal durum topluluklarından iş üretmek için gerekli bir ürün olarak karşımıza çıkmaktadır [47–49]. Bununla birlikte, klasik Carnot makinesi ile doğrudan benzerlik içinde olarak dolanıklık üretilmeden de maksimum iş üretmek mümkündür [50].

Bilgi teorisi hem klasik [51] hem de kuantum [52] termodinamik alanlarında çok önemli bir rol oynamaktadır. Maxwell'in Cini (Maxwell's Demon) ve Szilard Makinesi [36] gibi ünlü fenomenler, ikinci yasayı ihlal ederek, bir entropi artışı olmadan sistemden iş elde edilmesine izin vermektedir. Bu sistemler iş elde edilerek ve entropide belirgin bir düşüş göstererek deneysel olarak kolloidal parçacıklar [53, 54] ve tek elektronlarla [55, 56] gösterilmiştir. Landauer tarafından farkedilen bu paradoks bilginin fiziksel olduğu ve bir yerde saklanması gerektiği sonucunu doğurmuştur [57, 58]. Landauer bu çalışmasında bilgiyi silme işleminin mantıksal olarak tersinmez bir işlem olduğundan hareket ederek, bu türden mantıksal işlemlerin fiziksel bir bedeli olduğunu göstermiştir. Silme işleminin gerçekleşmesi için çevreye bir miktar ısı aktarımı yapılması gerekmektedir. Landauer'in sonucu daha çok istatistiksel nitelikte ve bu yönüyle termodinamiğin ikinci yasasının istatistiksel türetimi ile yakından ilgilidir. Bilgiyi silme yoluyla ısı üretilmesi deneysel olarak da doğrulanmıştır [59–61] ve bilginin saklanması tersinir bir süreç ise ısıнын ortama yayıldığı gösterilmiştir [60–62]. Bir kuantum sistemi için tasarlanan kuantum cin, klasik cin [63, 64] durumundan daha fazla iş üretebilir. Sistemin verimi ise kuantum diskord [36, 64] ile ölçülen kuantum korelasyonlar ile artarken dekoherans durumu ile azalma göstermektedir. Sistemin enerji spektrumunu değiştirmeden araya bir bölme (Szilard makinesinde olduğu gibi) koymak ve kuantum parçacıkların ayırt edilememesi sistemden elde edilen iş miktarını etkileyen diğer faktörler olarak karşımıza çıkmaktadır. Ayrıca yapılan çalışmalarda Szilard makinesinin çalışmasında bir kuantum bellek kullanılıyorsa sistemden iş elde edilebileceği gösterilmiştir [65]. Bu düşünce deneylerinin uygulanması için öneriler [66, 67] literatüre sunulmuş olsa da henüz reel olarak gerçekleşmemiştir.

Güçlü etkileşen bazı kuantum sistemler [68, 69] için sistem ve rezervuar dolanıklığı [70, 71] nedeniyle Landauer prensibinin geçerli olmadığına dair bazı iddialar öne sürülmüştür.

Bu durum sürekli hareket potansiyeli [72] ve kuantum bilgi işlemede bir dizi sorun [73] ortaya çıkarabilir. Ancak denge dışı sistemlerde [74] bile bu prensibin hem zayıf [75] hem de kuvvetli etkileşimli [73] kuantum sistemlerde geçerli olduğu gösterilmiştir. Bir kuantum sistemde bilginin işe dönüştürülmesi gösterilmiştir ve Landauer'in Prensibi kuantum mantık kapıları için doğrulanmıştır [76]. Bununla birlikte kuantum belleğin özelliklerinden yararlanan Landauer Prensibinin bir versiyonu, bilgiyi silme işleminin iş maliyetinin negatif olduğunu göstermiştir [77].

Yapılan araştırmalara ait literatür bilgisinden sonra kuantum termodinamik formalizmi verilecek olursa sınırlı sayıda enerji seviyesine sahip keyfi bir kuantum sistemin Hamiltonyan'ı şöyle yazılabilir:

$$H = \sum_n E_n |n\rangle \langle n| \quad (2.29)$$

Burada $|n\rangle$ sistemin n . özvektörünü E_n ise bu özvektöre karşı gelen özdeğeri temsil etmektedir. Bu durumda Denklem 2.29,

$$H = \sum_n (E_n - E_0) |n\rangle \langle n| \quad (2.30)$$

şeklinde ifade edilir. Buradan hareketle, üzerine çalışılan sistem için U iç enerji, n . özvektörde P_n olasılığı olmak üzere,

$$U = \langle H \rangle = \sum_n P_n E_n \quad (2.31)$$

ile ifade edilir. Denklem 2.29 kullanılarak iç enerjideki değişim,

$$dU = \sum_n [E_n dP_n + P_n dE_n] \quad (2.32)$$

şeklinde verilmektedir. Denklem 2.32'ün sağ tarafında yer alan birinci terim Q üzerine çalışılan sistemdeki ısı değişimine, ikinci terim ise sistem tarafından W yapılan iş'e karşılık gelir. Kuantum termodinamik çerçevesinde,

$$Q = \sum_n E_n dP_n \quad (2.33a)$$

$$W = \sum_n P_n dE_n \quad (2.33b)$$

şeklinde elde edilmektedir.

$$Q_{in} = \sum_n E_n^H [P_n(T_H) - P_n(T_L)] \quad (2.34a)$$

$$Q_{out} = \sum_n E_n^L [P_n(T_L) - P_n(T_H)] \quad (2.34b)$$

Denklem 2.33a ile verilen ısı değişimi Q , kuantum Otto ısı makinesi için basit olarak $Q = Q_{in} - Q_{out}$ ile verilir. Burada, Q_{in} , izotermal genleşme sırasında soğurulan ısı miktarıdır ve Q_{out} ise sıkıştırma prosedürü sırasında açığa çıkan ısı miktarıdır. Burada, sıcak ve soğuk ısı rezervuarları için sırasıyla E_n^H ve E_n^L enerji seviyelerini, T_H ve T_L sıcaklıkları temsil etmektedir.

Kuantum ısı makinesi için her bir çevrimde yapılan net iş W ,

$$W = \sum_n [E_n^H - E_n^L] [P_n(T_H) - P_n(T_L)] . \quad (2.35)$$

ile verilmektedir. Bu denklem, $W = Q_{in} + Q_{out}$ ($Q_{in} > 0$ ve $Q_{out} < 0$) şeklinde soğurulan

ve yayınlanan ısı miktarları cinsinden düzenlenebilir [78]. Termodinamik yasaların sonucu olarak her bir çevrimi için elde edilecek verim

$$\eta = \frac{W}{Q_{in}} \quad (2.36)$$

ile ifade edilmektedir.

Bu iyi bilinen tanımlamaların ardından kuantum ısı makinesi çevrimleri için η verim ifadesi kuantum sisteme ait enerji özdeğerleri ve olasılıklar cinsinden,

$$\eta = \frac{W}{Q_{in}} = \frac{\sum_n [E_n^H - E_n^L] [P_n(T_H) - P_n(T_L)]}{\sum_n [E_n^H] [P_n(T_H) - P_n(T_L)]} . \quad (2.37)$$

elde edilmektedir.

$E^j \equiv \langle E^j \rangle = \sum_n E_n^j P_n(T_j)$, $j = H, L$ ile verilen beklenen değer tanımı kullanılarak Denklem 2.37 daha basit bir forma dönüştürülebilir:

$$\eta = 1 - \frac{E^L(T_H) - E^L(T_L)}{E^H(T_H) - E^H(T_L)} , \quad (2.38)$$

ya da $\Delta E^L = (E^L(T_H) - E^L(T_L))$ ve $\Delta E^H = (E^H(T_H) - E^H(T_L))$ denklemleri aracılığı ile,

$$\eta = 1 - \frac{\Delta E^L}{\Delta E^H} < 1 \quad (2.39)$$

yazılabilir. Burada, ΔE^L ve ΔE^H , sırasıyla, farklı rezervuar sıcaklıkları arasında beklenen düşük ve yüksek farklardır. Denklem 2.39, $\eta = W/Q_{in}$ ifadesine eşdeğer bir başka verim temsilidir ve $\Delta E^H > \Delta E^L$ koşulu dört zamanlı kuantum ısı prosedürü için geçerli olduğundan $\eta < 1$ durumu her zaman sağlanacaktır.

Termodinamiğin temel amaçlarından biri, üzerine çalışılan bir sistem için termodinamik çevrimin oluşturulmasıdır. Bir termodinamik çevrim sırasında, sistem ısı ve iş kavramları aracılığı ile iç enerjisini değiştiren bir dizi darbeye maruz kalmaktadır. Çevrimin sonunda ise sistem orjinal durumuna geri dönmektedir. Kuantum termodinamik çevrimler, Carnot çevrimi veya Otto çevrimi gibi makroskopik termodinamiksel çevrimlerin mikroskobik versiyonlarıdır. Bu bölümde kuantum izotermal, izokorik ve adyabatik süreçler ele alınacaktır.

- **Kuantum İzotermal Süreç:**

Sabit bir sıcaklıkta ısı banyosu ile temas halinde bulunan bir potansiyel kuyu içindeki parçacık, üzerinde çalışılan bir sistem olarak ele alınabilir. Bu parçacık dışarıya pozitif iş yapabilir ve bu arada da ısı banyosundan ısı soğurabilir. Sistemin ısı banyosu ile termal olarak dengede kalması için enerji seviyeleri ve bulunma olasılıkları aynı anda değişir. $|e\rangle$ uyarılmış durumu, $|g\rangle$ taban durumu ve ΔE bu iki enerji seviyesi arasındaki farkı temsil etmek üzere iki seviyeli bir sistemi ele alacak olursak kuantum izotermal süreçte $r = P_e/P_g$ oranı Boltzmann dağılımını sağlamalıdır;

$$r = P_e/P_g = \exp[-\beta\Delta E(t)] \quad (2.40)$$

Burada P_e uyarılmış duruma ait bulunma olasılığını, P_g taban durumuna ait bulunma olasılığını, k_B Boltzmann sabitini, T sıcaklığı temsil etmektedir ve $\beta = 1/k_B T$ dir. $P_e + P_g = 1$ olan normalizasyon şartı sağlanır. İki enerji seviye arasındaki fark ΔE zamanla yavaş bir şekilde değişirse Denklem 2.40, $r \equiv r(t) = \frac{P_e}{P_g} = e^{-\beta\Delta E(t)}$ olarak yazılabilir. Bu durumda ele alınan sistem için yeterince yavaş bir süreçte ısı banyosu ile termodinamik dengede kaldığı söylenebilir. $r(t)$ oranı ve $\Delta E(t)$ enerji seviyeleri arasındaki fark dikkate alındığında herhangi iki seviyeli durum için sistemin etkin sıcaklığı,

$$T_{\text{eff}} = \frac{1}{k_B \beta_{\text{eff}}} = \frac{\Delta E(t)}{k_B} \left[\ln \frac{P_g}{P_e} \right]^{-1} \quad (2.41)$$

şeklinde tanımlanabilir. Denklem 2.41 iki seviyeden fazla seviyeye sahip sistemler için

direkt olarak genelleştirilemeyebilir. Örneğin, üç seviyeli bir durum için $|a\rangle$, $|b\rangle$ ve $|c\rangle$ üç durumu, P_a , P_b , P_c bulunma olasılıklarını temsil etmek üzere, eğer $\Delta E_{ab}(t)$ ve $\Delta E_{bc}(t)$ iki enerji seviyesi arasındaki fark,

$$\frac{1}{\Delta_{ab}(t)} \ln \frac{P_a}{P_b} = \frac{1}{\Delta_{bc}(t)} \ln \frac{P_b}{P_c}, \quad (2.42)$$

denklemini sağlamaz ise etkin sıcaklık ifadesi tanımlanamaz. Burada, $\{|b\rangle, |c\rangle\}$ ile verilen alt indisler farklı etkin sıcaklık değerlerine sahip olurken $\{|a\rangle, |b\rangle\}$ alt indisleri Denklem 2.41 ile verilen etkin sıcaklık değerine sahip olur [79].

- **Kuantum İzokorik Süreç:**

Kuantum izokorik süreçte, ele alınan sistem ile ısı banyosunun temas halinde olması sağlanır. Ancak aralarında ısı alışverişi mümkün olsa da bu süreçte iş yapılmaz. Bununla birlikte ele alınan sistem ısı banyosu ile termal dengeye ulaşana dek bulunma olasılıkları P_n ve von Neumann entropi S değişecektir, enerji seviyeleri arasındaki fark ΔE ise bu süreçte sabit kalır. Klasik izokorik süreçte basınç P ve sıcaklık T değişir ve sadece sürecin sonunda çalışılan sistem ısı banyosu ile termal dengeye ulaşır. Örneğin, sonsuz kare potansiyel kuyusu içinde bir parçacık ele alınırsa ısı soğurduğunda ya da yayınladığında kuantum izokorik süreç boyunca iş yapılmaz ve her özvektöre ait bulunma olasılıkları sürecin sonunda Boltzmann dağılımını sağlar.

- **Kuantum Adyabatik Süreç:**

Kuantum adyabatik süreçte, ele alınan kuantum sistem izole edilir ve sisteme ait Hamiltonyan zamana bağlı Hamiltonyan olan $H_C(t)$ ile dışarıdan kontrol altında tutulur. Bu süreçte, toplam Hamiltonyan $H(t) = H_0 + H_C(t)$ şeklinde ifade edilir. Burada kontrol Hamiltonyanı ile sistemin kendi Hamiltonyanı komüt etmez [80]. Kuantum sistem izole edildiği için üniterdir ve von Neumann entropisi S_{vn} sabittir. Bu nedenle kuantum adyabatik süreç için göreceli entropi ölçümü enerji entropisi olan S_E ile tanımlanır. Entropinin zamana göre türevi alınır,

$$\frac{dS_E}{dt} = - \sum_j \dot{p}_j \log p_j \quad (2.43)$$

elde edilir. Burada p_j , herhangi bir enerji seviyesi olan $E_j(t)$ değerlerinde bulunma olasılığıdır. Bu bilgiler ışığında sistemin bulunma olasılıkları $dP_n = 0$ aynı kalır. Bu süreçte ısı alışverişi gerçekleşmez ($dQ = 0$), enerji seviyeleri arasındaki fark değiştiğinden sistem sadece iş yapacaktır [79]. Böylece Hamiltonyan farklı zamanlar için $[H(t), H(t')] = 0$ şeklinde komüt etmelidir. Klasik bir adyabatik süreçte ise bulunma olasılıklarının değişmeden kalmasına gerek yoktur. Kuantum adyabatik şartların oluşabilmesi için sistem üzerine dışardan uygulanan kontrol işlemi sonsuz yavaş bir şekilde sağlanmalıdır. Bu durumun da sistemin ürettiği gücü sıfır yaptığı bilinmektedir. Sonlu bir güç üretmek için sisteme uygulanan operasyonların hızı artırılmalıdır. Bu durumda sistemdeki hızlı değişimlerin komüt ilişkisinin sağlanmamasına yol açacak dolayısıyla içsel sürtünmelerden kaynaklanan kayıplar oluşacaktır. Bu durum bulunma olasılıklarının değişmesine neden olmaktadır.

Bu bölümde son olarak klasik termodinamik ve kuantum termodinamik süreçlerin benzerlikleri ve farklılıklarını aşağıdaki tabloda görebiliriz:

Tablo 2.1: Klasik termodinamik ve kuantum termodinamik süreçlerin benzerlikleri ve farklılıkları.

	İzotermal Süreç	İzokorik Süreç	Adyabatik Süreç
Klasik	Isı alışverişi vardır. İş yapılır. Sabit: U, T Değişir: P, V	Isı alışverişi vardır. İş yapılmaz. Sabit: V Değişir: P, T	Isı alışverişi yoktur. İş yapılır. Değişir: P, T, V
Kuantum	Isı alışverişi vardır. İş yapılır. Sabit: T Değişir: U, E_n, P_n	Isı alışverişi vardır. İş yapılmaz. Sabit: E_n Değişir: P_n, T_{eff}	Isı alışverişi yoktur. İş yapılır. Sabit: P_n Değişir: E_n, T_{eff}

2.4. KUANTUM ISI MAKİNELERİ

En küçük klasik ısı makineleri, sıvılarda optik olarak tuzaklanmış mikropartiküller [5] kullanılarak elde edilmiş ve vakumda tuzaklanan nanoparçacıkların [6] kullanılması önerilmiştir. Bu tür küçük sistemler ile onları çevreleyen rezervuarlar arasındaki dalgalanma, parçacıkların Brownian hareketi izlenerek yakalanabilir. Parçacığın kendisini çevreleyen rezervuardan daha sıcak olduğu denge dışı durumlar çalışılmıştır [7, 8]. Brownian hareketin kuantum teorisi kuantum dalgalanmalarına bağlı olarak klasik Brownian hareketinden ayrılmaktadır [2]. Bu durum, dalgalanmaların (gürültü) ve dağılmaların (sürtünme) zaman ölçeklerinin klasik durumun aksine farklı olduğunu ortaya çıkarmaktadır [72]. Bahsedilen süreçler ışığında farklı bu sonuçlar tam olarak anlaşılamamış ve kuantum Brownian motorlar üzerinde önemli bir etkiye sahip olabileceği tartışılmıştır [81].

Kuantum Hall iletkenleri [82] veya tek elektron kuantum noktası sistemlerinden oluşan termoelektrik ısı makineleri mikroskobik ısıyı faydalı işe dönüştürmek için ideal adaylar olarak ileri sürülmüştür [83–88]. Ancak bu etki ultra soğuk atomlar [89] ve bir yarı iletken mikrokavitesi kullanılarak deneysel olarak gözlenmiştir [90]. Isının taşınmasını [91] anlayabilmek ve onu mikro devrelerde yararlı işe çevirebilmek, tutarlı veya kuantum katalizörlerin kullanımını ve sınırlamalarını [92, 93] anlamak gibi, büyük teknolojik öneme sahip olacaktır.

Çok çeşitli termal makine türlerinin kuantum mekaniksel analogları çalışılmıştır [79, 94–96]. Örneğin kuantum Otto ısı makinelerinin gerçekleştirilmesi için tuzaklanmış iyon sistemleri [97], optik [98], katı-hal sistemleri [99] ve tek molekül sistemleri [100] vb. çalışılmıştır. Diğer yandan kuantum Hall etkisi [101] kullanılarak ultra soğuk paramanyetik malzemeler [102] içinde Seebeck etkisinin gözlenmesi ile Nernst makineleri çalışılmıştır. Sistem ve rezervuarı arasındaki korelasyonlar ve dolanıklık kuantum ısı makinesinin üreteceği [103] iş miktarını etkilemektedir. Bazı kuantum ısı makineleri verimlilik açısından klasik benzerlerini ve hatta klasik Carnot limitini [78, 104] geçtiğini öngörmektedir. Kuantum etkilerin kuantum pillerin yeteneklerini de artıracığı tahmin edilmektedir [105] ve gerçek makinelerin adyabatik olmayan çalışmasından kaynaklanan sürtünmenin [106, 107] üstesinden gelmektedir. Literatürde kuantum buzdolapları da tek bir kütrit'in kübit'i soğutmak için kullanılabileceği tahmini ile teorik olarak incelenmiştir [96, 108]. Bu boyut ölçeğinde, sonlu boyut etkileri sistem üzerinde kuantum koherans gibi etkili bir

rol oynamaktadır. Her iki etki de kuantum sistemden elde edilen iş miktarını temelden sınırlandırmaktadır [44, 46]. Carnot verimliliğinden uzakta çalışırken, bununla birlikte, kuantum korelasyonlarının varlığının soğutma ve taşınma gibi durumlar üzerinde bazen yararlı sonuçlar verdiği gösterilmiştir [109].

Literatürde yer alan diğer önemli bir ısı makinesi kuantum Szilárd ısı makinesidir [110]. Szilárd'a göre Maxwell'in cini, moleküllerin hızını gözlemlerken, hız bilgilerini depolarken ve karşılaştırırken ve kapıyı açıp kapatırken entropi üretmelidir. Eğer Maxwell'in cini tarafından üretilen entropi dikkate alınmazsa sisteme ait entropi azalmış gibi görünebilir. Ancak bu entropi dikkate alınırsa zeki cin'in iş yaparken ürettiği entropi ile toplam entropinin artması beklenir. Szilárd, Maxwell'in cini problemini klasik bir ısı motoru kullanarak analiz etti. Bu analizde kapalı bir kutu içinde birçok parçacık yerine tek bir parçacık dikkate aldı. Bu kapalı kutunun ortasında piston görevi görecektir ve bu bölme bulunmaktadır ve bu bölme kutuyu ikiye bölmektedir. Bu düzeneğe göre ele alınan tek parçacık sağ ya da sol tarafta yer alabilir. Eğer parçacık sol bölmedeyse pistonu sağa itebilir, sağ bölmedeyse pistonu sağa itebilir. Böylece parçacığın bulunduğu kutunun hacmi genişler. Bu basit termodinamik süreçte sistem $k_B T \ln 2$ (k_B , Boltzmann sabiti ve T , sıcaklık) değerinde iş üretmiş olur. Böylece Szilárd, Termodinamiğin ikinci yasasının ihlal edilmediğini göstermiş oldu. Szilárd ısı motorunun kuantum versiyonu ise Kim ve diğ. [111] tarafından önerildi. Klasik Szilárd ısı motorundan farklı olarak kuantum versiyonda kutunun ortasına ince bir bariyer takılır ve çıkarılır. Bu şekilde gerçekleştirilen termodinamik sürecin pozitif iş üreteceği gösterilmiştir [112–114]. Son zamanlarda kuantum motorunun benzer bir versiyonu da Thomas ve diğ. [115] tarafından sonsuz kuyu potansiyeli için çalışılmıştır. Bu çalışmada, kuantum Szilárd ısı motorunun iş ve verimliliğinin tek ve birçok parçacık için pozitif olduğu gösterilmiştir. Ele alınan bu model, bariyer eklenmesi ile dejenere öz durumların oluşmasına yol açan herhangi bir potansiyele de uygulanabilir. Aydınlar [116] tarafından yapılan çalışmada da bu model kesirli kuvvet yasası benzeri bir potansiyele sahip olarak ele alınmıştır. Bu çalışmada kesirli kuvvet yasası potansiyeli altında Stirling benzeri çevrime sahip kuantum Szilárd ısı motorunun iş ve verimliliği incelenmiştir.

Kuantum sistemlerde üçüncü yasanın ihlal edilmesinin mümkün olup olmadığı da aktif bir araştırma konusudur [117–121]. Literatürde yapılan bu araştırma ve tartışmalar yalnızca kapalı kuantum sistemler için yapılmıştır. Açık kuantum sistemlerin termodinamiği üzerine yapılan çalışmalar önemli bir araştırma alanını kapsamaktadır [122–124].

Kuantum ısı makineleri, kuantum maddeleri iş maddesi (working substance) olarak kullanarak iş üretirler [17, 18]. İş maddelerinin kuantum özelliklerinden dolayı kuantum ısı makinelerinin de ilginç ve bir o kadar önemli özellikleri mevcuttur. Örneğin, bazı koşullar altında kuantum ısı makinelerinde yapılan işin miktarının, klasik termodinamiksel çevrimler sonucu yapılan iş miktarının maksimum limitleri üzerine çıktığı gösterilmiştir [125, 126]. Scully vd. [127] yaptığı çalışmada da kuantum ısı makinelerinin veriminin klasik Carnot makinesi çevriminin veriminden daha yüksek olduğu gösterilmiştir. Fizik bilimi literatüründe kuantum ısı makinelerinin termodinamik ve kuantum mekaniği arasında bir köprü kurduğu ve çalışılması mümkün fiziksel modeller sunduğu açıktır. Bununla birlikte klasik ve kuantum termodinamik sistemler arasındaki farkın belirlenmesinde ve termodinamik süreçlerin kuantum-klasik geçiş problemlerinin [79] anlaşılmasındaki rolü büyüktür.

Kuantum ısı makinelerinin iş üretebilmesi için spin sistemleri [128–135], harmonik osilatör sistemleri [135–139], iki veya daha fazla enerji seviyesine sahip sistemler [79, 140, 141], kavite kuantum elektrodinamiği [127, 142], kuple iki seviyeli sistemler [143] dolanık spin sistemleri [144, 145] gibi kuantum sistemleri kullanılmaktadır. Literatüde klasik Carnot ısı makinesi termodinamik çevrim aracılığı ile iş üretebilen ve iyi bilinen bir makinedir. Bu makine her bir çevriminde dört evreli fiziksel süreçler altında çalışmaktadır. Bu özellik, ısı makinelerinin fiziksel mekanizmalarının temelini oluşturur. Kuantum ısı makineleri üzerine yapılmış mevcut çalışmalar daha çok klasik ısı makinelerinin kuantum analogilerine dayanmaktadır [125–127, 142, 146–150]. Kuantum ısı makinelerinin bir diğer özel hali olan kuantum Otto makinesi de dikkatleri üzerine çekmektedir [125, 126, 132, 135, 139, 142, 151, 152]

Kuantum ısı makinelerinin çalışma ortamı (working substance) olarak dış bir manyetik alan altında birbirleri ile kuple olmuş spin çiftlerinin (tek eksen dönüşlü lineer olmayan spin sıkışma etkileşmesi olarak da adlandırılır) ele alındığı çalışmalar mevcuttur [78, 153]. Bu yapılan çalışmaların bilimsel motivasyonunda spin çiftleri arasındaki kuantum korelasyonların kurulması bulunmaktadır. Bu etkileşimler aracılığı ile oluşturulan makinenin kuantum Otto çevrimi içinde çalıştığı varsayılmıştır [79, 125]. Kuantum Otto çevrimi iki adyabatik ve iki izokorik olmak üzere dört evreden oluşur. Adyabatik evrelerde, dış manyetik alanın ve spin-spin etkileşim büyüklüklerinin değişmesi ile kuantum sisteminin ısı makinesi gibi çalıştığı ve bu makinenin iş ve veriminin hesaplandığı çalışmalar bulunmaktadır [78].

Bir diğ er  nemli husus, kuantum korelasyonların ısı makinesinin performansı  zerinde nasıl bir rol oynadığıdır. Termodinamik  evrimde yer alan iki izokorik evre sonunda ele alınan  alıřma ortamının (working substance) kuantum durumları kanonik k me form lasyonu aracılığı ile kurulabilir. Isı banyolarının sıcaklığının deėiřimleri gibi sisteme haiz t m parametrelerin deėiřimleri de kontrol edilebilir [154]. Bu durum iki ısı banyosu i inde ele alınan sistemdeki kuantum korelasyonların kontrol n  de m mk n kılmaktadır. Spin  iftleri arasındaki korelasyonların spinler arası dolanık durumların dikkate alınarak formasyon dolanıklığı [155], kuantum diskord [156, 157], negativite [158] gibi y ntem analizleri ile oluřturulan kuantum ısı makineleri de mevcuttur [78, 145, 159].

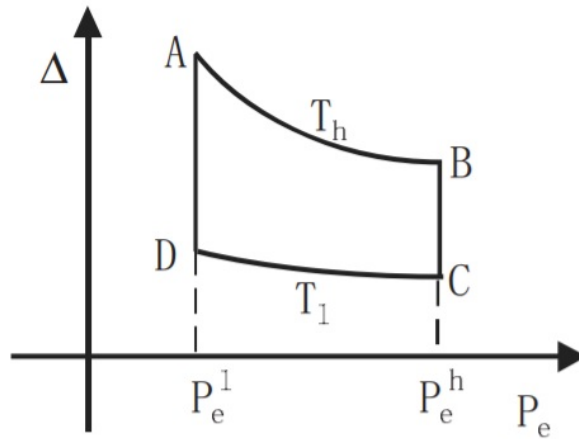
Kuantum ısı makineleri genel olarak (1) karřılıklı  evrim ve (2) s rekli  evrim olarak iki kategoride sınıflandırılır. Son zamanlarda (3) hibrit  evrim i eren ısı makineleri de literat rde yer almaktadır [160].

1. *Karřılıklı  evrim:* Bu  evrimde,  zerine  alıřılan sistem d n ř ml  olarak sıcak ve soėuk ısı rezervuarları ile temas yoluyla etkileřmektedir. Genellikle, bir sonraki alt b l mde detaylı olarak incelenen, kuantum Carnot ve Otto ısı makinelerinde olduėu gibi d rt  evrimden oluřur. Bu ısı makinelerinde iki adyabatik s re  bulunur ve  zerine  alıřılan sistem  evresi ile termal olarak izole edilmiřtir. Sistemi  alıřan bir piston harekete ge irir. Burada ayrıca, sistemin d n ř ml  olarak herbir ısı rezervuarı ile etkileřimde olduėu, ısı transferinin ger ekleřtiėi iki  evrim bulunmaktadır. Carnot ısı makinesi i in bu  evrimler izotermal  evrim adını alırken Otto ısı makinesi i in izokorik  evrim adını alır. Bu ısı makineleri aynı zamanda iki kısımdan oluřan iki zamanlı ısı makineleridir [161]. Birinci kısımda sistem sadece sıcak rezervuar ile ikinci kısımda ise sistem sadece soėuk rezervuar ile etkileřimde olabilir. Birinci zamanda her iki kısım da kendi ısı rezervuarları ile etkileřime girebilir ancak termal dengeye ulařmaları řart deėildir. İkinci zamanda, iki kısım da ısı banyosundan ayrılır ve birbiri ile etkileřecek duruma getirilir.
2. *S rekli  evrim:* Kuantum mekaniėi yasalarına uyarak iřlem yapan mikroskobik veya nano  l ekli aygıtlarda karřılıklı  evrim  nemli problemler doėurmaktadır.  zerine  alıřılan sistem ile rezervuar arasındaki etkileřimin a ılıp kapanması (on-off switching) ve kuantum mekaniksel  er evede adyabatik olmayan iřlemler  evrimler s resince enerji ve ısı transferini etkileyebilir. Bununla birlikte, mikroskobik d zende

sistem ve rezervuarın tamamen birbirinden ayrılması da her zaman mümkün olmayabilir. Yukarıda belirtilen bu nedenlerden dolayı, sistemin sürekli olarak sıcak ve soğuk ısı rezervuarı ile etkileşimde olduğu ısı makinelerini tartışmak oldukça önemlidir.

3. *Hibrit Çevrim:* Hibrit çevrimli ısı makineleri, ne sürekli olarak ısı rezervuarı ile etkileşimde olan ne de ısı rezervuarlarından tamamen ayrılmış olarak çalışan makinelerdir. Bu makinelerin performansları Mukherjee ve diğ. [160] tarafından analiz edilmiştir.

1824 yılında Sadi Carnot, herhangi bir çevrimsel süreçlere sahip makinenin verimliliğinin sınırlı olduğunu ve maksimum verimliliğin üzerine çalışılan sistemin ya da çevrimin karakterine bağlı olmadığını sadece sıcak ve soğuk rezervuarların sıcaklığına bağlı olduğunu gösterdiğini önceki bölümde incelemiştik [1]. Şimdi ise kuantum Carnot ısı makinesini inceleyeceğiz. Kuantum Carnot ısı makinesi ikisi kuantum izotermal ($A \rightarrow B$ ve $C \rightarrow D$) ikisi kuantum adyabatik süreçlerden ($B \rightarrow C$ ve $D \rightarrow A$) oluşan dört zamanlı bir termodinamik çevrimden oluşan bir makinedir (Şekil 2.6). Parçacık, A 'dan B 'ye izotermal genişleme süresi boyunca T_H sıcaklığında bulunan ısı rezervuarı ile temas halindedir. Üzerine çalışılan sistemi oluşturan parçacığın her zaman ısı rezervuarı ile termal dengede kalması için enerji seviyeleri çok yavaş değiştirilmektedir.



Şekil 2.6: İki seviyeli kuantum sistem için kuantum Carnot makinesine ait şematik diyagram. Δ iki enerji seviye arasındaki farkı, P_e uyarılmış seviyede bulunma olasılığını temsil eder. Sistem yüksek sıcaklıktaki ısı rezervuarı ile temastayken A 'dan B 'ye izotermal genişleme, sistem düşük sıcaklıktaki ısı rezervuarı ile temastayken C 'den D 'ye izotermal sıkıştırma süreci gerçekleşirken B 'den C 'ye ve D 'den A 'ya iki adyabatik süreç gerçekleşmektedir.

Termodinamikte tersinir süreçler ısı rezervuarına ve üzerine çalışılan sistemin etkin sıcaklığına eşlik ederek sistemin çevresindeki bazı özelliklerde sonsuz küçük değişiklikler başlatarak sistemi orijinal durumuna döndürmek için yönü tersine çevrilebilen bir süreçtir. Tüm tersinir süreç boyunca, sistem çevresi ile termodinamik denge içindedir. Üzerine çalışılan sistemin termodinamiksel olarak tersinir olduğunu belirlemek için kuantum adyabatik süreç üzerinde iki koşulun sağlanması gereklidir. Bunlardan birincisi, kuantum adyabatik süreçten sonra ($B \rightarrow C$) sistemi karakterize etmek için T_L etkin sıcaklığı kullanılmasıdır. Bu durumda Boltzmann dağılımı üzerine çalışılan sistem tarafından sağlanmış olur. İkincisi, kuantum adyabatik süreçten sonra sistemi karakterize etmek için kullanılan T_L etkin sıcaklığı kuantum izotermal süreç boyunca ($C \rightarrow D$) ısı rezervuarının T_L sıcaklığına eşittir. Bu koşullar gerçekleşmediğinde kuantum izotermal sürecinden ($C \rightarrow D$) önce üzerine çalışan sistemin termalizasyon işlemi kaçınılmaz olur. Bu termalizasyon sürecinde sistemin ve ısı rezervuarının toplam entropi artışı sıfırdan farklıdır. Bu nedenle bu termalizasyon süreci geri döndürülemez (tersinir) bir süreçtir [162, 163]. Burada bahsedilen iki koşulun,

1. Kuantum adyabatik süreçte bütün enerji seviyeleri arasındaki farklar $E_n(B) - E_m(B) = \lambda [E_n(C) - E_m(C)]$ ve $E_n(A) - E_m(A) = \lambda [E_n(D) - E_m(D)]$, ($n = 0, 1, 2, \dots$) şeklinde aynı oranda değiştirilirse,
2. Kuantum adyabatik süreçte enerji seviyeleri arasındaki farkların değişim oranı (B 'den C 'ye veya A 'dan D 'ye) ısı rezervuarlarının iki sıcaklığının birbirine oranına ($\lambda = T_H/T_L$) eşit olursa

bu iki koşula eşdeğer olduğu ispatlanabilir.

Şimdi kuantum Carnot ısı makinesinin iş ve verimliliğini analiz edebiliriz. Herhangi bir kuantum izotermal süreçte ısı alışverişini (dQ) hesaplamak için $dQ = T dS$ kullanılmaktadır. Çünkü kuantum izotermal süreçte ısı rezervuarının sıcaklığı sabit tutulmaktadır. Kuantum izotermal genişleme ve sıkıştırma süreçleri için soğurulan ısı Q_{in} ve yayılan ısı Q_{out} olmak üzere,

$$Q_{\text{in}} = T_H[S(B) - S(A)] > 0, \quad (2.44)$$

$$Q_{\text{out}} = T_L[S(C) - S(D)] > 0, \quad (2.45)$$

denklemleri aracılığıyla hesaplanabilir. Burada, T_H yüksek sıcaklıktaki ısı rezervuarı sıcaklığını T_L ise düşük sıcaklıktaki ısı rezervuarı sıcaklığını temsil etmektedir. Çevrimin farklı $i = A, B, C, D$ noktalarında üzerine çalışılan sistemin entropi değerleri ise

$$S(i) = -k_B \sum_n \frac{\exp[-\beta_i E_n(i)]}{Z(i)} [-\beta_i E_n(i) - \ln Z(i)] \quad (2.46)$$

şeklinde verilmektedir. Burada, $\beta_{A,B} = 1/k_B T_H$, $\beta_{C,D} = 1/k_B T_L$ 'dir. Bu sonuçları elde etmek için termal denge durumlarının

$$\rho = (1/Z) \sum_n \exp(-\beta E_n) |n\rangle \langle n| \quad (2.47)$$

ile verilen Boltzmann dağılımı kullanılmaktadır. Burada, $Z = \text{Tr} \exp(-\beta H)$ bölüşüm fonksiyonudur. Bu noktadan hareketle kuantum Carnot ısı makinesinin termodinamik çevrimleri sonucu yapılan iş W_C ve verimi η_C hesaplanabilir. Denklem 2.44, Denklem 2.45 ve termodinamiğin 1. yasası kullanılarak kuantum Carnot ısı makinesinin termodinamik çevrimleri sonucu yapılan net iş W_C ,

$$W_C = Q_{\text{in}} - Q_{\text{out}} = (T_H - T_L)[S(B) - S(A)] \quad (2.48)$$

ile hesaplanmaktadır. Herhangi bir kuantum adyabatik süreçte bulunma olasılıklarının değişmemesi nedeniyle entropi değişmemektedir ve $S(B) = S(C)$ ile $S(A) = S(D)$ ilişkisi kullanılmaktadır.

Kuantum Carnot ısı makinesinin verimi η_C ise ,

$$\eta_C = \frac{W_C}{Q_{in}} = 1 - \frac{T_L}{T_H} \quad (2.49)$$

denklemleri ile hesaplanmaktadır.

İdeal bir klasik Carnot ısı makinesi çevriminin iki klasik izotermal ve iki klasik adyabatik süreçten oluştuğu iyi bilinmektedir. Üzerine çalışılan sistem olarak ideal gaz alındığında, sistemin iç enerjisi klasik izotermal süreçte değişmez. Çünkü ideal gazın iç enerjisi yalnızca sıcaklığa bağlıdır. Klasik ideal gaza dayalı klasik izotermal süreçler için bu varsayım, ideal gaz dışında bir çalışma maddesi kullanan klasik bir Carnot ısı makinesi için de doğrudur. Fakat kuantum versiyonunda, kuantum izotermal ve kuantum adyabatik süreçler kuantum mekaniğine dayalı olarak mikroskobik olarak yeniden tanımlanmalıdır. İlkesel olarak klasik sonuç, sistemin kuantum doğası (kesikli enerji seviyeleri) dikkate alındığında değişkenlik gösterebilir.

Kuantum Otto ısı makinesi ise ikisi kuantum izokorik, ikisi kuantum adyabatik süreçlerden oluşan dört zamanlı bir termodinamik çevrimdir (Şekil 2.7). [79, 135, 151, 152]. Kuantum izokorik ısı sürecinde ($A \rightarrow B$) iş yapılmaz ancak ısı soğurulur. Üzerine çalışılan sistem tarafından soğurulan ısı miktarı,

$$Q_{in} = \sum_n \int_A^B E_n dP_n = \sum_n E_n^H [P_n(B) - P_n(A)] \quad (2.50)$$

ile verilir. Burada; E_n^H , kuantum izokorik ısıtma ($A \rightarrow B$) süresince sistemin sahip olduğu n . enerji özdeğeridir. Benzer olarak, kuantum izokorik soğutma ($C \rightarrow D$) sürecinde yayılan ısı miktarı,

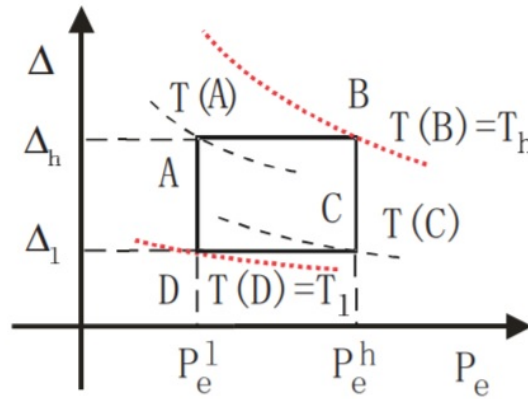
$$Q_{out} = - \sum_n \int_C^D E_n dP_n = \sum_n E_n^L [P_n(C) - P_n(D)] \quad (2.51)$$

ile verilir. Burada; E_n^L , kuantum izokorik soğutma ($C \rightarrow D$) süresince sistemin sahip olduğu

n . enerji özdeğeridir.

Burada ifade edilen Q_{in} ve Q_{out} ısı miktarlarını hesaplamak için Denklem 2.44 ve Denklem 2.45 kullanılamamaktadır. Çünkü kuantum izokorik süreçte $dQ = TdS$ eşitliği sadece termal denge durumunda geçerlidir, ısı rezervuarı ve üzerine çalışılan sistem de her zaman termal denge durumunda bulunmamaktadır. Bu nedenle bu süreç termodinamiksel olarak tersinir bir süreç olmamaktadır.

Önceki alt başlıkta anlatılan kuantum Carnot ısı makinesi için kuantum adyabatik süreçte sistemin sahip olduğu tüm enerji seviyeleri arasındaki farklar aynı oranda değiştirilmek zorundaydı. Fakat çok seviyeli kuantum Otto ısı makinesinde böyle bir kısıt söz konusu değildir [152]. Çünkü kuantum Otto ısı makinesi çevriminin tersinirliğini sağlama zorunluluğu bulunmamaktadır. Bununla birlikte, kuantum Otto ısı makinesi ile kuantum Carnot ısı makinesini karşılaştırmak için tüm enerji seviyeleri arasındaki farkların aynı oranda değiştirildiği kuantum Otto ısı makinesinin kuantum adyabatik süreci için $E_n^H - E_m^H = \alpha(E_n^L - E_m^L)$, ($n = 0, 1, 2, \dots$) ele alınır. Taban durumuna ait enerji özdeğeri $E_0^H = E_0^L = 0$ şeklinde enerji referans noktası seçilirse $E_n^H = \alpha E_n^L$ elde edilecektir. Kuantum Carnot ısı makinesine benzer olarak iki kuantum adyabatik süreç için bulunma olasılıkları $P_n(B) = P_n(C)$ ve $P_n(A) = P_n(D)$ ve entropi değerleri $S(B) = S(C)$ ve $S(A) = S(D)$ şeklinde aynı kalmaktadır.



Şekil 2.7: İki seviyeli kuantum sistem için kuantum Otto ısı makinesine ait şematik diyagram. Kırmızı noktalardan ve kesikli siyah noktalardan oluşan eğriler izotermal süreçleri temsil etmektedir. Δ_H ve Δ_L , iki izokorik süreç boyunca ($A \rightarrow B$ ve $C \rightarrow D$) iki enerji seviye arasındaki farkı temsil etmektedir. P_e^H ve P_e^L ise uyarılmış durumda bulunma olasılıklarıdır. A'dan B'ye ve C'den D'ye iki kuantum izokorik süreci B'den C'ye ve D'den A'ya iki kuantum adyabatik süreci ifade etmektedir. $T(i)$, ($i = A, B, C, D$) i noktalarında sistemin etkin sıcaklığıdır ve $T(B) = T_H$, $T(D) = T_L$.

Denklem 2.50 ve Denklem 2.51 kullanılarak kuantum Otto ısı makinesinin termodinamiksel çevrimlerinde yapılan net iş W_O ,

$$W_O = Q_{\text{in}} - Q_{\text{out}} = \sum_n (E_n^H - E_n^L) [P_n(B) - P_n(A)] \quad (2.52)$$

ile ifade edilmektedir. Kuantum Otto ısı makinesinin verimi η_O ise

$$\eta_O = \frac{W_O}{Q_{\text{in}}} = 1 - \frac{E_n^L - E_m^L}{E_n^H - E_m^H} = 1 - \frac{1}{\alpha} \quad (2.53)$$

ile ifade edilmektedir. Burada, $E_n^H > E_n^L$ olduğundan dolayı $\alpha > 1$ 'dir. Çok seviyeli kuantum Otto ısı makinesine (tüm enerji seviyeleri arasındaki farkın aynı oranda değiştiği kuantum adyabatik süreçler) ait bu sonuç iki seviyeli kuantum Otto ısı makinesinin genelleştirilmesini ifade etmektedir [126, 152].

3. MALZEME VE YÖNTEM

3.1. SPİN SİSTEMLERİ

3.1.1. Giriş

Teorik fiziğin temel amaçlarından biri, doğal olaylarını açıklamak için basit matematiksel modeller tasarlamak ve o modelleri kullanmaktır. Yoğun madde ve istatistiksel fizik alanlarında spin modelleri, özellikle manyetizma fenomenini açıklamak için kullanılmaktadır. Spin modellerinin en basit örneklerinden biri Ising modelidir [164]. Bu model ferromanyetizmanın basit bir teorik tanımını sunmaktadır. Manyetik momentleri temsil eden değişkenler, bir örgü üzerinde her biri iki değer alabilen $\sigma_i = \pm 1$ spinleri ile tanımlanmaktadır. Atomlardaki manyetik momentlerin sadece komşularını etkilediğini varsayarsak bu modeller spinlerin büyük bölümünün nasıl kısa menzilli etkileşimler ile aynı yönlü olabildiklerini açıklamak için yardımcı olmaktadır. Bir örgü üzerinde yer alan komşu spinler arasındaki etkileşim E enerji olmak üzere şu şekilde tanımlanmaktadır:

$$E = - \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad (3.1)$$

Makroskopik olarak çok sayıda spinin aynı yönü göstermesini tercih etmek sistemin enerjisi anlamında elverişli bir yapı ortaya çıkarmaktadır. Örneğin, sıfırdan farklı net manyetizasyon durumu ele alınabilir. İki veya daha yüksek boyutta, Ising sistem, sıfırdan farklı kritik sıcaklıktan daha düşük sıcaklıklar için net manyetizasyonun sonlu olduğu bir durumda yer almaktadır. Bir boyutta bu durum yalnızca sıfır sıcaklıkta mümkün olmaktadır. Bu kritik sıcaklığın üzerinde termal dalgalanmalar sistemi tamamen düzensiz (manyetizasyonun olmadığı) hale getirmektedir. Bu durum faz geçişleri için uygulanan en basit modellerden biridir. Bu modelin motivasyonu esasen ferromanyetizmayı tanımlamak olsa da teori sıvı-gaz faz geçişini de tanımlar.

Ising modeli, klasik bir spin modeli örneğidir. Sonlu sıcaklıkta meydana gelen faz

geçişleri için termal dalgalanmalar kuantum dalgalanmalara hakimdir. Bu nedenle, bu geçişleri incelemek için kullanılan modeller tamamen klasik Hamiltonyen denklemleri ile tanımlanmaktadır. Klasik spin modelleri sıcaklığa bağlı faz geçişlerini anlamak için önemli bir rol oynamaktadır. Düşük sıcaklıklarda sistemin taban seviye özelliklerini tanımlamak için kuantum etkiler ön plandadır. Kuantum faz geçişleri bu anlamda oldukça ilginçtir ve önemli bir araştırma alanı oluşturmaktadır. Bu noktadan hareketle kuantum spin sistemleri kuantum çok cisim problemleri ve kuantum faz geçişi problemlerine dair yapılan araştırmalarda kullanılan önemli bir araçtır [165].

3.1.2. Kuantum Heisenberg Spin Modelleri

Geçtiğimiz yüzyılın ilk yıllarında Heisenberg, komşu spinler arasındaki etkileşimi dikkate alan basitleştirilmiş bir versiyon ile modelini kurmaya başladı. Bu model spinlerin ferromanyetik düzeni için ilk mikroskobik motivasyon sağladı.

Kuantum spin sisteminde spinler bir örgü üzerinde yer alan operatörler olarak tanımlanmaktadır. Kuantum spin etkileşimlerinin ortaya çıktığı önemli bir örnek Heisenberg spin modelleridir. Bir boyutlu Heisenberg spin zinciri için spinler arası etkileşim sabiti J olmak üzere spin-spin etkileşimleri kullanılarak sistemin Hamiltonyan denklemi yazılabilir:

$$H = J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = J \sum_{\langle ij \rangle} \left(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z \right) \quad (3.2)$$

Burada, S_x, S_y, S_z farklı noktalarda üzerine komüt eden spin operatörleridir, aynı nokta üzerinde ise standart komütasyon ilişkisine uymaktadır:

$$[S_i^\mu, S_j^\nu] = 0, \quad [S_i^\mu, S_i^\nu] = i\epsilon_{\mu\nu\rho} S_i^\rho \quad (3.3)$$

Sistemi oluşturan spinlerin spin-1/2 operatörleri $S^x = \frac{\sigma_x}{2}, S^y = \frac{\sigma_y}{2}, S^z = \frac{\sigma_z}{2}$ ile verilmektedir ve $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ Pauli spin matrislerini temsil etmektedir:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

Genel olarak, çok sayıda parçacık için herhangi bir kuantum spin Hamiltoniyeinin tam spektrumunu çözmek oldukça zordur. Sistemin boyutu arttıkça sonlu boyuttaki sisteme ait Hamiltoniyanın nümerik köşegenleştirilmesi işlemi oldukça zor hale gelmektedir. Bunun nedeni, birden fazla spinin Hilbert uzayını oluştururken her spinin Hilbert uzaylarının tensör çarpımları ile ifade edilmesidir. Eğer spin sisteminde N_s adet spin-1/2 yer alıyorsa Hilbert uzayı 2^{N_s} boyutunda olmaktadır. $N_s = 2$ için Heisenberg modeli diyagonalize edilebilen $2^2 \times 2^2$ matrisler içerdiği için kolaylıkla çözülebilir. İki spin-1/2 Heisenberg etkileşimi için özvektör ve özdeğerler şöyle ifade edilmektedir:

$$S = 0(\text{singlet}): \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{2}, E_1 = -\frac{3J}{4} \quad (3.5a)$$

$$S = 1(\text{triplet}): |\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle, \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{2}, E_2 = E_3 = E_4 = \frac{J}{4} \quad (3.5b)$$

Antiferromanyetik durum için ($J > 0$) en düşük enerji durumu tekli (singlet), ferromanyetik durum için ($J < 0$) en düşük enerji durumu üçlü (triplet)'e karşı gelmektedir.

Fiziksel bir sistemde yaklaşık olarak Avogadro sayısı 10^{23} kadar parçacık bulunmaktadır. Herhangi bir pratik sonuç elde etmek için sistemin davranışı incelenirken termodinamik limit ($N_s \rightarrow \infty$) dikkate alınmaktadır. Sonsuz boyuttaki sistemlere ekstrapolasyon yapmak için büyük boyutlu sistemlerin davranışı hakkında bilgiler edinmek oldukça önemlidir. Sistemin bulunduğu faz durumunun belirlenmesinde ve faz geçişlerinin incelenmesinde de sonlu boyut davranışının termodinamik sınıra güvenilir şekilde ekstrapolasyonu dikkat çekmektedir. Bir faz durumundaki düzeni belirlemeye yarayan parametre düzen parametresidir.

Bu tez çalışmasında odaklanacağımız model, spinlerinin birbirleri ile güçlü olarak etkileştiği tek boyutlu (1/2, 1, 1/2) üç spinden oluşan karma Heisenberg XXZ modelidir.

Bu model aynı zamanda, spin-1/2 izotropik Heisenberg modeli olarak veya $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ yönlerindeki izotropik etkileşimler nedeniyle XXX modeli olarak bilinmektedir. Daha sonra yapılan çalışmalar ile birlikte Heisenberg spin modeli daha da gelişerek farklı spin-spin etkileşim sabitlerine bağlı olarak farklı isimler almaktadır.

Heisenberg Spin Modelleri	Spinler arası etkileşim sabitleri
XX	$J_x = J_y, \quad J_z = 0$
XY	$J_x \neq J_y \neq 0, \quad J_z = 0$
XXX	$J_x = J_y = J_z$
XXZ	$J_x = J_y \neq J_z$
XYZ	$J_x \neq J_y \neq J_z$

Şekil 3.1: Heisenberg Spin Modelleri

Manyetik alanın yokluğunda, en yakın komşuları ile etkileşen spin-1/2 Heisenberg spin zincirinin en genel Hamiltoniyeni

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N [J_x S_i^x S_{i+1}^x + J_y S_i^y S_{i+1}^y + J_z S_i^z S_{i+1}^z] \quad (3.6)$$

ile verilmektedir.

Spin-spin etkileşim sabitleri için dört temel kombinasyon vardır:

1. $J_x = J_y = J_z = J > 0$: İzotropik ferromanyetik Heisenberg XXX modeli analitik olarak 1931 yılında Bethe [166] tarafından çözülmüştür.
2. $J_x = J_y = J_z = J < 0$: İzotropik antiferromanyetik Heisenberg XXX modelinin taban durum enerji seviyeleri 1938 yılında [167] tarafından elde edilmiş, uyarılmış durumlarına ait enerjiler ise 1962 yılında Cloizeaux ve Pearson [168] tarafından bulunmuştur.

3. $(J_x = J_y = J) \neq J_z$: Heisenberg XXZ modeli 1966 yılında Yang ve Yang [169] tarafından çözülmüştür.
4. $J_x \neq J_y \neq J_z$: Tamamen anizotropik Heisenberg modeli 1972 yılında Baxter [170] tarafından çözülmüştür.

3.1.3. Manyetik Faz Sistemleri

Farklı sıcaklıklarda manyetik alanlara tepki olarak malzemelerin manyetik davranışı temelinde beş temel manyetik faz türü gözlemlenmiş ve sınıflandırılmıştır. Bu manyetik faz türleri şunlardır: ferromanyetizma, ferrimanyetizma, antiferromanyetizma, paramanyetizma ve diamanyetizma.

Ferromanyetizma ve ferrimanyetizma, manyetik bir malzemedeki manyetik momentlerin net manyetizasyon üretmek için Curie sıcaklığı olarak adlandırılan sıcaklığın altındaki bir sıcaklıkta kendiliğinden sıralanması ile meydana gelir. Manyetik momentler Curie noktasının üzerindeki sıcaklıklarda rastgele hizalanır, ancak bu sıcaklığın altında tipik olarak dikey veya özel durumlarda spiral (sarmal) bir düzende sıralanır. Bir ferromanyetik fazda, eşit büyüklükteki manyetik momentler kendilerini birbirine paralel olarak düzenler. Öte yandan bir ferrimanyetik fazda, manyetik momentler antiparalel bir düzende büyüklük ve düzen açısından birbirlerine eşit değildir.

Momentler büyüklük ve düzen bakımından birbirlerine eşit olduğunda, net manyetizasyon vermeyecek şekilde antiparalel bir dizide Neel sıcaklığı olarak adlandırılan sıcaklıkta meydana geldiğinde, bu fenomen antiferromanyetizma olarak adlandırılır. Düzensizlikten düzene geçişler, faz geçişlerinin klasik örneklerini temsil eder. Bir faz geçişine başka bir örnek, düzenli buz yapısını oluşturmak için düzensiz su moleküllerinin 32°F (0°C) kritik sıcaklıkta dondurulmasıdır. Spin olarak adlandırılan manyetik momentler, katının atomları içindeki küçük elektronik mıknatıslar üzerinde lokalizedir. Matematiksel olarak, elektronik spinler dönen elektronların açısal momentumuna (dönme hızı çarpı eylemsizlik momenti) eşittir. Bir ferromanyetik veya ferrimanyetik kristaldeki spinler, makroskopik (büyük ölçekli) bir manyetize nesne oluşturmak için kendiliğinden hizaya girer. Bununla birlikte, çoğu manyetik katı, tek bir kristal yapı şeklinde değildir, ancak alan duvarlarıyla (domain walls) ayrılmış tek kristal alanlarından oluşur. Spinler, herhangi bir dış manyetik alandan bağımsız olarak Curie sıcaklığının altındaki bir alan içinde hizalanır, ancak makroskopik manyetize

bir nesne üretmek için alanların bir manyetik alanda hizalanması gerekir. Bu işlem, manyetik alanın etkisi altında bulunan alan duvarındaki spinlerin yönlerinin dönüşü ile gerçekleştirilir. Bu da duvarın yer değiştirmesine ve nihai olarak aynı dönüş yönüne sahip tek bir büyük alanın yaratılmasına neden olur.

Paramanyetizma, uygulanan bir manyetik alana pozitif yanıt veren maddelerde gözlenen zayıf bir manyetik faz türüdür. Bu yanıt, manyetik momentin manyetik alan yoğunluğuna oranıyla tanımlanan boyutsuz bir miktar olan birim hacim başına manyetik duyunluğu ile tanımlanır. Örneğin, tek sayıda elektrona sahip atomlarda ve moleküllerde paramanyetizma gözlemlenir, çünkü burada net manyetik moment sıfır olamaz.

Diamanyetizma, negatif manyetik duyunluğa sahip malzemelerle ilişkilidir. Grafit, bakır, gümüş ve altın gibi manyetik olmayan maddelerde ve bazı temel ve bileşik metallerin süper iletken durumunda oluşur. Bu malzemelerdeki negatif manyetik duyarlılık, uygulanan manyetik alan tarafından atomların elektron yörüngelerinde indüklenen bir akımın sonucudur. Elektron akımı daha sonra uygulanan alaninkine zıt işaretli bir manyetik momenti indükler. Bu etkileşimlerin net sonucu, malzemenin uygulanan manyetik alan tarafından nüfuz etmekten korunmasıdır.

3.1.4. Spin-Cam Sistemler

Spin cam da manyetik bir fazdır. Bu faz, manyetik faz olarak bilinen ve önceki başlıkta verilen ferromanyetik, ferrimanyetik, antiferromanyetik, paramanyetik ve diamanyetik fazlardan farklı bir manyetik fazdır. Spin cam fazı diğerlerinden ayıran en önemli özellik bu manyetik sistemin spin örgü yapısının düzensiz ve kompleks oluşudur. Bu fazı diğerlerinden ayıran en önemli karakteristik durum ise bunalım (frustration) özelliğidir.

Spin-cam faz sistemleri doğada saf olarak bulunmazlar, ancak, laboratuvar koşullarında ferromagnetik ve antiferromagnetik özellik gösteren maddelerin birbirlerine belirli şartlar altında ve oranlarda katılmasıyla oluşturulan alaşım veya bileşiklerdir. Spin cam sistemler spin iç düzeni itibariyle paramanyetik sistemlere benzerlik gösterir.

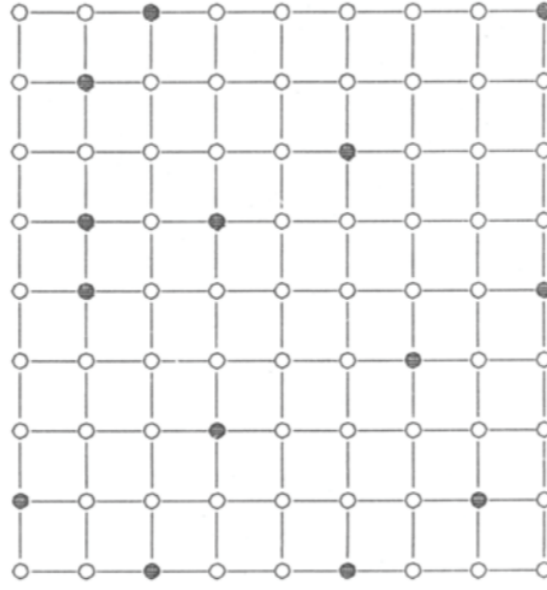
Herhangi bir manyetik fazdan spin-cam fazına geçmesi, söz konusu manyetik sistemin elde ediliş koşullarına ve sıcaklığa bağlıdır. Çünkü spin-cam fazını elde etmek için bazı özel koşulların oluşturulması gerekir. Spin-cam sistemleri elde etmek için sistemi oluşturan

bileşenlerin uygun oranda olmalarının yanı sıra yeterince düşük sıcaklıklar gerekmektedir. Bunun ötesinde, hazırlanan bazı sistemler, örneğin metalik spin-camlar, tavlandıktan sonra hızlı bir şekilde soğutulmaları gerekmektedir. Diğer yandan manyetik sistemin, spin-cam özelliği gösterip göstermeyeceği, örneğin metalik spin-camlar için katkı konsantrasyonuna bağlıyken, yalıtkan spin-camlarda ise birbirlerine karıştırılan maddelerin yüzdelere bağlıdır. Yani spin-cam sistemi elde etmek için tek bir yöntemin olduğu söylenemez. Bu yüzden deneyçiler birçok spin-cam sistemi bazen deneme yanılma yoluyla ve bazen de daha sistematik yöntemler izleyerek elde etmeyi başarmışlardır. Tüm bu çalışmalarda en önemli nokta spin-cam davranışına yol açacak etkileşim mekanizmasının deneysel aşamada oluşturulmasıdır. Zira bu durum, hem sistemin etkileşim mekanizmasını hem de bir anlamda geçiş sıcaklığını tayin edecektir. Spin-camların, etkileşim mekanizmaları, geçiş sıcaklıkları ve birçok termodinamik özelliklerinin farklı olmasına rağmen tüm spin-cam sistemlerin uyduğu ortak iki özellik; düzensizlik ve spinler arası yarışan etkileşimlerden kaynaklanan bunalım (frustration) davranışlarıdır. Bu iki özellik, spin-cam sistemlerin uydukları yegane evrensel davranışlardır.

Spin-cam faz sistemleri bunalım ve düzensizlik gibi evrensel iki özelliğinin dışında, başka fiziksel özelliklerine bakarak sınıflandırmak, bu sistemlerin fiziğini anlamak açısından önemlidir. Bu sistemleri anlayabilmek için sistemi mikroskobik düzeyde incelemek gereklidir. Bu düşünceden hareket ettiğimizde sistemin bir çok termodinamiksel davranışını belirleyen fiziksel kaynağın, etkileşim enerjisi ve dolayısıyla etkileşim mekanizması olduğu görülür. Ayrıca elde edilen sistemin etkileşim mekanizmaları, bu sistemlerin deneysel olarak nasıl elde edildiği bilgisini taşıdığı gibi aynı zamanda sistem için kurulacak bir teorik modelin de yapı taşlarını oluştururlar. Bu nedenle spin-cam sistemlerin etkileşim mekanizmalarına kısaca bir göz atalım. Ancak konunun çok çeşitlilik göstermesi nedeniyle dikkatimizi klasik spin-cam sistemlerin uyduğu Ruderman, Kittel, Kasuya, Yoshida (RKKY) [171] etkileşim mekanizması ve fiziği üzerinde toplayalım.

RKKY etkileşimine uyan sistemler; klasik spin-cam sistemler olup, safsızlık atomları olarak bilinen gibi geçiş metallerinin gibi manyetik olmayan ana metallerin içerisine, Şekil 3.2'deki şematik çizimde görüldüğü gibi, katılmalarıyla elde edilir. Ana metal içerisine katılan safsızlıklar rastgele konumları işgal ederler ve bu safsızlıkların sahip olduğu spin manyetik momentleri; geçiş sıcaklığının altında donarak düzensiz bir spin koleksiyonu oluştururlar. Genelde yüksek sıcaklıklarda tavlanan alaşımlar, safsızlıkların rastgele dağılımını sağlamak

için ani bir şekilde soğutulur.



Şekil 3.2: Spin-cam alaşımların şematik gösterimi. Ana metalin atomları (beyaz daireler), metal içerisine yerleştirilen safsızlıklar (siyah daireler)

Hazırlanan sistemin hızlı bir şekilde soğutulmasının nedeni, safsızlıkların difüzyon yoluyla ana metalin içerisinde seyahat ederek termal dengeye ulaşmasının önüne geçmek ve böylece gelişigüzel dağılımı sağlamaktır. Eğer sistem ani olarak soğutulmaz ise safsızlık atomları difüzyon yoluyla, tavlانarak, serbest enerji yüzeyinin minimumuna ulaşır, yani sistem termal dengeye gelir (kristal yapı oluşur) ve bu durumda sistemin spin-cam özelliği göstermesi beklenmez.

İlk spin-cam alaşımın elde edilışinden [172] bu yana, spin cam davranışını gösteren çok sayıda sistem elde edilmiş ve özellikleri deneysel olarak incelenmiştir. Elde edilen bu sistemlerin bir çoğunun hem fiziksel davranışlarının hem de etkileşim mekanizmalarının birbirlerinden farklı olduğu gözlenmiştir. Sayısız spin-cam sistemi burada anmak mümkün değildir, fakat farklı etkileşim mekanizmalarını ve bu etkileşim mekanizmalarına uyan birkaç spin camı burada örnek olarak vereceğiz. Alaşım olan asal, metal ve geçiş metal spin camları; AuFe, AuMn, AuCr, CuMn, AgMn, ZnMn, CdMn, MgMn dir. Heusler spin cam alaşımları; CuMnAl, Cu₂MnIn, Cu₂MnSn dir. Geçiş metali-geçiş metali spin camları; FeNi, FeMn, CoMn, CoNi, PdMn, PtMn, FeNiSi dir. Manyetik yarı-iletken spin camlar; Cd(1-x)Mn(x)Te, Cd(1-x)Mn(x)Se, Hg(1-x)Mn(x)Te ve Sn(1-x)Mn(x)Te dir. Reentrant spin camlar; NiMn, AuFe, FeCr, AlFe dir. Spin cam benzeri davranış gösteren bazı sistemler; RbHe₂PO₄,

$\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$ dir.

Şimdi, tüm spin-cam sistemlerin uyduğu ortak iki özellik olan spinler arası yarışan etkileşimlerden kaynaklanan bunalım (frustration) davranışı ve düzen parametresi kavramlarını açıklayalım:

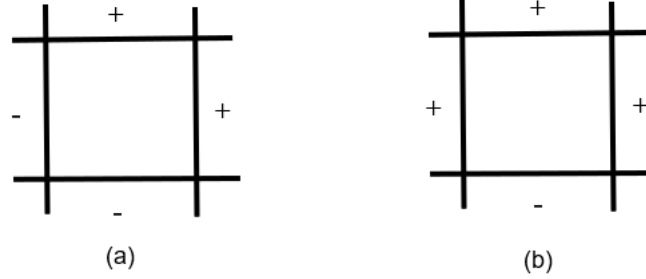
3.1.5. Spin-Cam Sistemlerde Bunalım

Araştırmacılar spin-camlarda ortaya çıkan düzensizliği sıradan düzensizlikten ayrı tutmayı önermişlerdir. Çünkü, sıradan düzensizlik ve ölçülebilir düzensizlik birbirinden oldukça farklıdır. Spin-camlar bunalım (frustration) özelliği gösteren bir sistemdir. Eğer sistemdeki bunalım ölçülebilirse bir anlamda düzensizlik de ölçülebilecektir. Bunalım kavramı fizik jargonuna ilk defa spin-cam fiziği ile birlikte girmiştir [173]. Bunalım olayının anlaşılması spin-cam fiziğinin anlaşılması noktasında çok önemli bir konudur. Çünkü spinlerin geçiş sıcaklığının altında donmaları, serbest enerji uzayında ortaya çıkan dejenere durumlar ve ergodikliğin kırılması [174] olayları bunalım olgusuyla yakından ilgilidir. Spin cam sistemlerin fiziğinin, fizik dünyasına yeni bileşenler kattığı açıktır. Diğer bileşenlerin bir çoğu da bunalım olgusuna bağlı olarak ortaya çıkmaktadır. Ergodikliğin kırılması, sisteme ait etkileşim Hamiltonyanını ve dolayısıyla bölüşüm fonksiyonunu yazmanın, bazı istatistiksel niceliklerin ortalamalarını almanın ve sisteme ait düzen parametresinin ifade edilmesinin zorluğu ve serbest enerji yüzeyinin geometrisi gibi birçok olgu, spin-cam sistemler için önerilecek modelin sac ayaklarını oluşturmaktadırlar. Bunları doğru yorumlayan modellerin, sistemin termodinamik davranışlarını açıklamaya aday olabileceği açıktır.

Bunalımın kaynağı spinler arası birbirleri ile yarışan etkileşimlerdir. Spin-camlarda yarışan etkileşimler ferromanyetik ve antiferromanyetik karakterli etkileşimlerdir. Spinler arası etkileşim parametresi J , etkileşim tipinin ferromanyetik veya antiferromanyetik olacağını belirler. Yani, $J > 0$ ise etkileşim tipi ferromanyetik ve $J < 0$ ise etkileşim tipi antiferromanyetik olacaktır. Spin-camlarda bunalım olayının ortaya çıkabilmesi için bu iki etkileşim tipinin bir sistematik yapı içerisinde bir araya gelmiş olması gerekmektedir.

Bunalım olayını anlamak için bir başka örnek olarak aşağıdaki Şekil 3.3'de gösterilen $\pm J$ Mattis modelini ele alalım. Böyle bir kare örgü birimine plaka denir [175]. Bu plakanın her bir köşesine bir tane spin koyarsak bu spinlerin kendi aralarında etkileşeceklerini bekleriz. Elbette ki bu etkileşim spinler arasında bir bağın oluşmasına yol açacaktır. Buna bağ

etkileşimi (bond interactions) denir. Bu bağlar rastgele ve bağımsızdır. Dolayısıyla, plaka etrafında negatif 'lerin sayısının tek veya çift olma olasılıkları eşittir.



Şekil 3.3: Mattis Modeli. Bu şekilde + sembolü $J > 0$ ve - sembolü de $J < 0$ 'a karşı gelmektedir. (a) bunalımsız, (b) bunalımlı plakayı temsil etmektedir.

Dikkate alacağımız herhangi bir $\langle ij \rangle$ bağı, spinler birbirine paralel $J > 0$ ve antiparalel $J < 0$ olacak şekilde bağ yaparlarsa enerjilerini minimize edebilirler. Şekil 3.3 (a) daki tüm bağ enerjileri aynı anda minimize edilebilir fakat Şekil 3.3 (b) deki bağ enerjileri aynı anda minimize edilemez yani, (b)'deki diziliş olası değildir. Bu nedenle (a) daki plaka bunalımsız (b) deki plaka ise bunalımlıdır.

Açıkça görülmektedir ki, bunalımlı bir plaka elde etmek için topolojik kısıtlamalara ihtiyacımız vardır. Spin-camlarda bu topolojik kısıtlamalar, düşük sıcaklıklarda sistemin tav (quenched) edilmesiyle elde edilebilmektedir. T_f donma sıcaklığının altında tav edilen bir sistemde hem ferromanyetik hem de antiferromanyetik etkileşimler ortaya çıkmaktadır. Tekrar bunalımlı plaka örneğine dönersek, bunalım fonksiyonu;

$$\Phi = \prod_C \text{sign}(J_{ij}) \quad (3.7)$$

şeklinde yazılabilir [173]. Kapalı bir C döngüsü üzerinden tanımlanmış olan bu fonksiyon, döngünün içinde ortaya çıkan bunalımın bir ölçüsüdür. $\phi = \pm 1$ olacak şekilde pozitif veya negatif değerler alabilir. Buradan hareketle, $\phi = +1$ ise plaka bunalımsız ve $\phi = -1$ ise plaka bunalımlıdır deriz. Elbette ki bu dört spinli plakadan bir spin-cam oluşmaz. Fakat bu örnek bunalımın nasıl ortaya çıktığını göstermesi bakımından dikkate değerdir.

Spin-camlarda bunalım olayı tam olarak çözülememiş problemlerden birisidir. Bununla

beraber bunalım olgusu, doğadaki bir çok kompleks sistemin fiziğinde şaşırtıcı bir şekilde ortaya çıkmaktadır.

3.1.6. Spin-Cam Sistemlerde Düzen Parametresi

Düzen parametresi manyetik sistemlerde, faz geçişini karakterize eden ve faz uzayının yapısını açıklamaya yarayan bir niceliktir. Şimdi bunu kısaca açıklayalım:

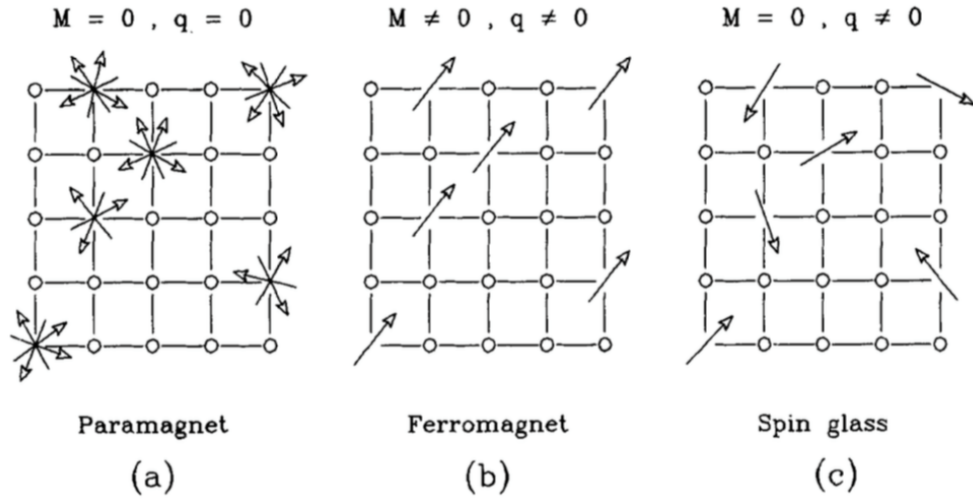
Örneğin bir ferromanyetik sistem için ortalama manyetizasyon, düzen parametresi olarak seçilebilir. Ferromanyetik sistemler için, dış manyetik alan sıfır iken ortalama manyetizasyon;

$$q = \langle M \rangle \equiv \frac{1}{N} \sum_i S_i \quad (3.8)$$

şeklinde ifade edilir. Görüldüğü gibi düzen parametresi, manyetizasyon değerine eşittir ve değeri sıfırdan farklıdır. Paramanyetik sistemlere bakıldığında durum değişmez. Sistemi temsil eden düzen parametresi ile ortalama manyetizasyon nicelikleri birbirlerinin yerine kullanılabilir. Fakat spin-cam sistemler nitelik olarak düzensiz bir paramanyetik fazdan farklıdır. Bu nedenle spin-cam sistemleri temsil eden farklı bir düzen parametresi seçilmelidir. Bu düzen parametresinin spin-camları diğer manyetik fazdan ayıran bir karakter taşımasının yanında sistemdeki simetri kırılmasını da doğru bir şekilde temsil etmesi gerekmektedir.

Düzen parametresinin özellikleri faz geçiş mekanizmasına sıkı sıkıya bağlıdır. Örneğin, paramanyetik fazdan, ferromanyetik faza geçişi karakterize eden parametreye düzen parametresi denir. Paramanyetik (P), spin-cam (SG) ve ferromanyetik (F) olarak isimlendirdiğimiz fazlar arasındaki farklar sezgisel olarak kavranabilir. Üç fazın her birindeki spin konfigürasyonunu Şekil 3.4 de olduğu gibi anlık görüntüsünün alındığını kabul edelim. Eğer elde edilen bu görüntüler çok kısa zaman aralıklarında alınmış ise örneğin paramanyetik fazdan spin-cam fazı ayırmak için yeteri kadar veri elde edemeyebiliriz. Çünkü her iki fazdaki spinlerin de rastgele yönelimlere sahip oluşları kaydedilecektir. Fakat, eğer her bir fazdaki spinlerin görüntüsü uzun bir zaman aralığı içinde elde edilirse

kolaylıkla, paramanyetik fazdan, spin-cam fazını ayırt etmek mümkün olur. Çünkü bir spin-cam sistemde, manyetik momentler bunalım etkisiyle donmuş durumda bulunacaklar fakat paramanyetik sistemde yönler değişmiş olacaktır. Bu açıdan bakıldığında arka arkaya alınan görüntüler, spin-cam sistemdeki spinlerin yönelimlerinin değişmediğini gösterecektir. Ancak, paramanyetik fazda durum böyle değildir. Yalnızca farklı spinlerin birbirlerine göre yönelimleri rastgele değil, hatta aynı spinin zaman içinde yönelimi bile rastgeledir.



Şekil 3.4: Manyetizasyon ve düzen parametresi ilişkisi (a) paramanyetik faz, (b) ferromanyetik faz, (c) spin-cam faz [176]

Ferromanyetik sistemler için düzen parametresinin, makroskopik manyetizasyonun ortalaması olarak verildiğini yukarıda gösterdik. Ancak uzun erimli bir etkileşmenin olmadığı spin-cam durumu için bir düzen parametresini yazmak ferromanyetik sistemlerde olduğu kadar kolay değildir. Bunun bir kaç tane nedeni olabilir; birincisi sistemdeki kısa menzilli etkileşmeler üzerinden alınan ortalamalar sıfıra gitmekte, bunun sonucu olarak da makroskopik manyetizasyon sıfır çıkmaktadır. İkincisi, bunalım etkisiyle ortaya çıkan simetri kırılması (broken-ergodicity), spin-cam sistem içerisinde kararlı ve yarı-kararlı yerel manyetik bölgelerin ortaya çıkmasına yol açmaktadır [174]. Sonuç olarak diyebiliriz ki spin-camlarda simetri kırılması genelde ısısal ortalamanın özelde ise tanımlanması pek de basit olmayan düzen parametrelerinin tanımını yapar. Fazların veya faz gruplarının değişik yollardan projeksiyonu farklı sonuçlara yol açar. Bir çok fazın varlığının doğal bir sonucu olarak spin-cam sistemler tek bir düzen parametresiyle tanımlanamaz, tersine bir çok parametre gerektirir. Spin-camlarda düzen parametresinin nasıl tanımlanması gerektiği konusunda tam bir netlik yoktur. Bu konuda bir çok çalışma yapılmış ve değişik düzen

parametreleri önerilmiştir [177–179]. Önerilen düzen parametreleri genelde önerilen modele doğrudan bağlıdır. Bu nedenle önerilen düzen parametresinin doğruluğu, modelin de doğruluğuna bağlıdır.

Buraya kadar manyetik malzemelerin spin-cam fazının bunalım ve düzen parametresi gibi bazı fiziksel özelliklerini literatür dahilinde inceleyerek vermiş olduk. Bundan sonraki kısımda bu spin-cam malzemelerin bir kuantum ısı makinesi olarak çalıştığını gösterebilmek adına klasik ve kuantum ısı makinesi konseptinde kuantum Otto çevrimini inceleyeceğiz.

3.2. MODEL

Bu tez çalışmasında bir spin-cam malzemenin kuantum termodinamiği açısından bir kuantum ısı makinesi olarak çalıştığı, spin cam fazından ferromanyetik, spin cam fazından antiferromanyetik fazlara geçişlerde ele alınacak manyetik sistemin kuantum ısı makinesi gibi davranabildiği fiziksel süreçler üzerine yoğunlaşılacaktır. Bununla beraber, spin-cam fazında ve ayrıca bu fazlar arasındaki geçişlerde manyetik sistemin ısı makinesi olarak çalıştığı gösterilerek kuantum ısı makinesinin spin fazlarını belirleyen etkileşim parametrelerine bağlılığının nasıl olduğu belirlenecek ve fazlar arasındaki kuantum ısı makinesinin etkileşim parametresi, sıcaklık, dış manyetik alan gibi Hamiltonyen parametrelerine olan bağlılığı ve tüm fazlardaki kuantum ısı makinelerinin iş ve verimlerini ayrı ayrı belirlemek üzerine hesaplamalar yapılacaktır.

Bu tez çalışmasında üçgen bir hücre üzerinde bulunan $(1/2, 1, 1/2)$ üç spinden oluşan karma Heisenberg XXZ manyetik sistemi için dış homojen magnetik alan altında spinler arası etkileşim sabiti olan parametresi değerlerine göre belirlenen Spin-cam, Antiferromanyetik ve Ferromanyetik faz durumlarının değişimlerini belirleyeceğiz. Öncelikle ele alınan kuantum sistemin tasviri yapılarak Hamiltonyen denklemi ve bu denklemden yola çıkılarak elde edilen enerji değerleri verilecek, daha sonra kuantum mekaniği ve istatistik mekanik formülasyonları aracılığı ile kuantum Otto çevrimi ele alınarak sistemin iş ve verim gibi fiziksel özelliklerinin hesaplanması yöntemi tartışılarak sıcaklık, manyetik alan ve etkileşim çiftlenim parametresi gibi değişkenlere bağlı olarak nasıl değiştiği incelenecektir.

3.2.1. Üçgen hücre üzerinde üç spinli karma Heisenberg XXZ spin modeli

Bu tez çalışmasında kuantum ısı makinesi oluşturmak için karma $(1/2, 1, 1/2)$ Heisenberg XXZ sistemi ele alınmıştır. Fiziğin birçok alanında yaygın olarak kuantum spin sistemlerini modellemek için kullanılan Heisenberg spin modelleri ilk kez Bethe ve Pauling [166, 180] tarafından çalışılmıştır. Üçgen bir hücre üzerinde yer alan karma $(1/2, 1, 1/2)$ Heisenberg XXZ spin sistemi ve bir boyutlu projeksiyonu Şekil 3.6'da gösterilmiştir. Burada homojen dış manyetik alanın z yönünde uygulandığını varsayıyoruz. Bu durumda Heisenberg XXZ karma spin modele ait Hamiltonyan

$$H = -J_1[\zeta_{12} + \zeta_{23}] - J_2\zeta_{13} + B(s_1^z + s_2^z + s_3^z) \quad (3.9)$$

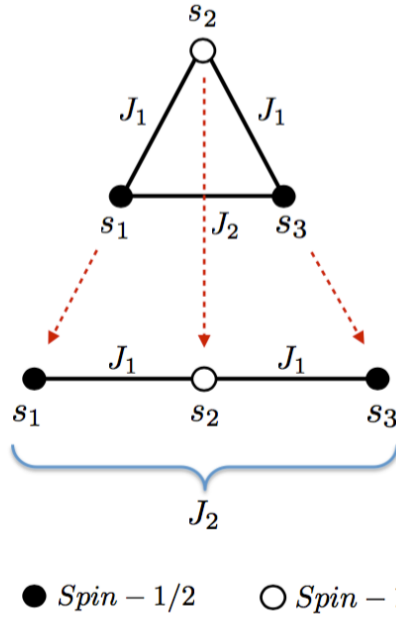
ile verilir. Burada $J_{1,2}$ yakın komşu spin çiftleri arasındaki spin etkileşim sabitleridir. $\zeta_{12} = \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2$, $\zeta_{23} = \vec{s}_2 \cdot \vec{s}_3$, $\zeta_{13} = \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_3$ ile verilir ve $B (\geq 0)$ dış manyetik alan şiddetidir. $i = 1, 2, 3$ olmak üzere $\vec{s}_i = (s_i^x, s_i^y, s_i^z)$ lokal spin operatörleridir. $s_{1,3}^{x,y,z}$ operatörleri spin-1/2 için $s_2^{x,y,z}$ operatörleri ise spin-1 için yazılmıştır. Son olarak $k = 1$ veya 2 olmak üzere $J_k > 0$ durumunu ferromanyetik etkileşim, $J_k < 0$ durumunu antiferromanyetik etkileşim olarak dikkate alıyoruz.

<u>Spin-1/2 Matrisleri</u>	<u>Spin-1 Matrisleri</u>
$\sigma^x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma^y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ $\sigma^z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$S^x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad S^y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$ $S^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$

Şekil 3.5: Spin-1/2 ve Spin-1 Matris Operatörleri

Denklem 3.9 ile verilen Hamiltonyana karşı gelen matris,

$$H = \begin{pmatrix} h_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h_2 & \frac{J_1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & \frac{J_2}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{J_1}{\sqrt{2}} & h_3 & 0 & 0 & 0 & \frac{J_1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & h_4 & \frac{J_1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & \frac{J_1}{\sqrt{2}} & \frac{J_2}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{J_1}{\sqrt{2}} & h_5 & 0 & 0 & 0 & \frac{J_1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h_6 & 0 & 0 & 0 & \frac{J_1}{\sqrt{2}} & \frac{J_2}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{J_2}{2} & \frac{J_1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & h_7 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{J_1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & h_8 & \frac{J_1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{J_2}{2} & \frac{J_1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & \frac{J_1}{\sqrt{2}} & h_9 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{J_1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & h_{10} & \frac{J_1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{J_2}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{J_1}{\sqrt{2}} & h_{11} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h_{12} & 0 \end{pmatrix} \quad (3.10)$$



Şekil 3.6: Üstteki şekil, üçgen bir hücre üzerinde yer alan karma $(1/2, 1, 1/2)$ XXZ Heisenberg sistemini göstermektedir. Burada spin-spin etkileşim sabitleri arasında $J_{12} = J_{32} = J_1$ ve $J_{13} = J_2$ ilişkisi vardır. Siyah renkli daireler spin-1/2 ve beyaz renkli daireler ise spin-1'i temsil etmektedir. Aşağıdaki şekil, üçgen hücrenin bir boyuta projeksiyonunun temsildir.

	$J_2 < 0$	$J_2 > 0$
$J_1 = \text{sabit} > 0$	Spin-Cam Faz	Antiferromanyetik Faz
$J_1 = \text{sabit} < 0$	Spin-Cam Faz	Ferromanyetik Faz
	$J_1 < 0$	$J_1 > 0$
$J_2 = \text{sabit} > 0$	Spin-Cam Faz	Antiferromanyetik Faz
$J_2 = \text{sabit} < 0$	Ferromanyetik Faz	Spin-Cam Faz

Şekil 3.7: Komşu spin çiftleri arasındaki etkileşim çiftlenim sabitleri ve fazlar arasındaki konfigürasyonlar

şeklinde elde edilir. Burada, $h_1 = 2B + J_1 + \frac{J_2}{4}$, $h_2 = B - \frac{J_2}{4}$, $h_3 = B + \frac{J_2}{4}$, $h_4 = -\frac{J_2}{4}$, $h_5 = \frac{J_2}{4} - J_1$, $h_6 = -B - \frac{J_2}{4}$, $h_7 = B - \frac{J_2}{4}$, $h_8 = \frac{J_2}{4} - J_1$, $h_9 = -\frac{J_2}{4}$, $h_{10} = \frac{J_2}{4} - B$, $h_{11} = -B - \frac{J_2}{4}$ ve $h_{12} = -2B + J_1 + \frac{J_2}{4}$. Ek olarak, Hamiltonyana ait matrisin baz vektörleri $\{|-1/2, -1, -1/2\rangle, |1/2, -1, -1/2\rangle, |-1/2, -1, 1/2\rangle, |1/2, -1, 1/2\rangle, |-1/2, 0, -1/2\rangle, |1/2, 0, -1/2\rangle, |-1/2, 0, 1/2\rangle, |1/2, 0, 1/2\rangle, |-1/2, 1, -1/2\rangle, |1/2, 1, -1/2\rangle, |-1/2, 1, 1/2\rangle, |1/2, 1, 1/2\rangle\}$ ile elde edilmektedir. Burada $|s_1, s_2, s_3\rangle$ gösterimi s_1^z, s_2^z, s_3^z nin özvektörlerini temsil etmektedir.

Bu çalışmamızda dış homojen bir magnetik alan altındaki üçgen bir hücre üzerinde bulunan $(1/2, 1, 1/2)$ üç spinden oluşan karma Heisenberg XXZ sisteminde en yakın komşu spin çiftleri arasındaki etkileşim çiftlenim sabiti olan $J_{1,2}$ değerlerinin aldıkları negatif ve pozitif değer değişimleri için sistemin spin-cam, antiferromanyetik ve ferromanyetik fazlarda bulunma koşullarını ve bu fazlar arasındaki geçişleri, sistemin iş ve verim gibi termodinamik özelliklerine bağlı değişimlerini inceleyeceğiz. Bunun için öncelikle ele aldığımız sistemdeki komşu spin çiftleri arasındaki etkileşim çiftlenim sabitleri ve fazlar arasındaki ilişkileri ortaya çıkaran 4 adet hücre konfigürasyonunu vermek yerinde olacaktır:

J_1 ve J_2 parametrik değerlerin sabit olarak seçildiği 4 adet durum Şekil 3.7 de gösterilmiştir. Bu parametrelerin sabit olarak ele alındığı koşullarda diğer parametreler üzerindeki değişimler ısı makinesinin çalışmasını sağlayan büyüklükler olacaktır. Örneğin, J_1 parametresi sabit olarak çalışıldığında ısı makinesinin termodinamiksel çevrim üzerindeki J_2 parametresinin değişimleri aracılığı ile çalışacağını söyleyebiliriz. Bahsedilen aynı süreç, J_2 parametresinin sabit olarak ele alınıp ısı makinesinin J_1 parametresinin değişimleri üzerinden çalışacağı şekli için de geçerliliğini koruyacaktır. Bir sonraki kısımda kuantum Otto

çevriminin evrelerini açıklayarak bu proje çalışmasında ele alacağımız sistemin kuantum fazlarının iş ve verim gibi termodinamik özelliklerine olan bağılıklarını hesaplamak adına temel formülasyonları vereceğiz.

3.2.2. Hamiltonyanın Özdeğerleri

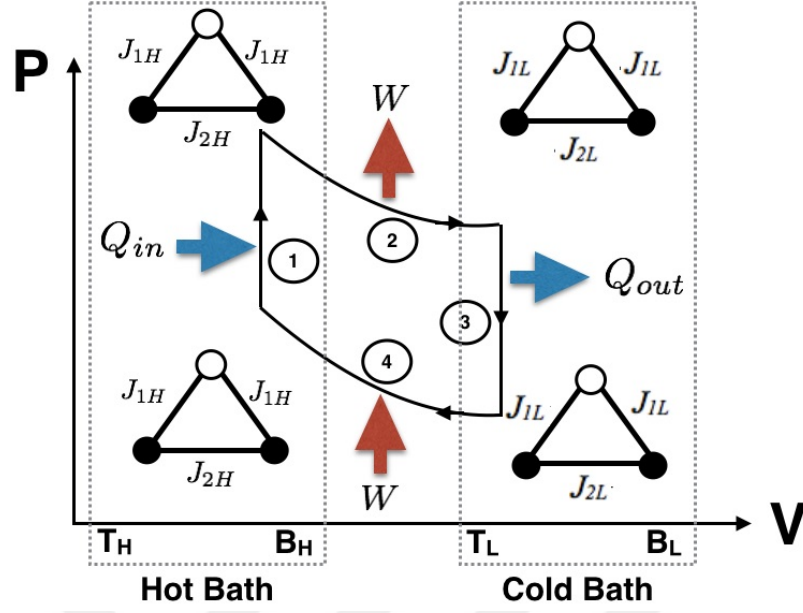
Schrödinger denklemi olan $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ Denklem 3.9 için çözülürse Hamiltonyana ait özdeğerler

$$\begin{aligned} E_1 &= -B - \frac{3J_2}{4}, E_2 = B - \frac{3J_2}{4}, E_3 = -2B + J_1 + \frac{J_2}{4}, \\ E_4 &= 2B + J_1 + \frac{J_2}{4}, E_5 = -\frac{3J_2}{4}, E_6 = -2J_1 + \frac{J_2}{4}, \\ E_7 &= -J_1 + \frac{J_2}{4}, E_8 = -(B + J_1) + \frac{J_2}{4}, E_9 = B - J_1 + \frac{J_2}{4}, \\ E_{10} &= J_1 + \frac{J_2}{4}, E_{11} = -B + J_1 + \frac{J_2}{4}, E_{12} = B + J_1 + \frac{J_2}{4}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

olarak elde edilir. Denklem 3.11'den görüldüğü gibi, tüm enerji özdeğerleri spin etkileşim parametreleri olan J_1 ve J_2 'ye bağlıdır. Bu parametrelerin değerleri, manyetik fazları ve onların enerjilerini belirler. Diğer yandan, termal dengede, özvektörlerin bulunma olasılıkları $P_n = \exp(-\beta E_n) / Z$ ile verilir. Burada, $Z = \text{Tr}(\exp(-\beta E_n))$ bölüşüm fonksiyonu, E_n Denklem 3.11 ile verilen özdeğerler ve $T = 1/\beta$ sıcaklıktır (işlem kolaylığı bakımından Boltzmann sabitini $k = 1$ olarak ayarladık). Çalıştığımız modelin tüm enerji özdeğerleri ve bulunma olasılıkları sonraki bölümlerde bu modelin kuantum termodinamik döngüsü için iş ve verim hesaplamak için kullanılacaktır.

3.2.3. Modele ait Kuantum Otto Isı Makinesi Çevrimi

Bu çalışmamızda basit bir ısı makinesi protokolünü ele alıyoruz. Spin modelinin salınımlı bir ısı banyosu veya rezervuar ile çiftlendiği varsayılmıştır. Salınımlı rezervuarın yalnızca T_H ve T_L gibi iki farklı sıcaklığı vardır. Heisenberg XXZ'den oluşan çalışma maddesi veya sistemi, dış manyetik alanda basit bir üçgen hücre üzerinde $(1/2, 1, 1/2)$ spin sistemi ile oluşturulmuştur. B Otto döngüsünün 4 aşamasından bağımsız olarak manyetik fazlardan geçer. Kuantum Otto ısı makinesinin bu aşamaları,



Şekil 3.8: Kuantum Otto Isı Makinesi Çevrimi Gösterimi (Hot Bath = Sıcak Rezervuar, Cold Bath = Soğuk Rezervuar)

Evre 1: Ele aldığımız kuantum sistem $T = T_H$ sıcaklığında sıcak banyo ile çiftlenmiştir. Başlangıç olarak her bir özvektöre ait bulunma olasılığı p_{i0} ($i = 1, 2, 3, 4$) şeklindedir. Yeterince beklenildiğinde B dış manyetik alanda her bir enerji özdeğeri E_{i1}^H değerinde sabit tutulurken özvektörlere ait olan bulunma olasılığı p_{i0} dan p_{i1} e değişmektedir. Böylece yalnızca Q_{in} ısı ısı aktarılır ve bu kuantum izokorik süreçte hiçbir iş yapılmaz.

Evre 2: Sistem ısı banyosundan izole edilir, enerji özdeğeri E_n^H 'dan E_n^L 'a değiştirilip $P_n(T_H, J_{1,2}^H)$ sabit tutularak kuantum adyabatik genleşme sürecine maruz kalır. Kuantum adyabatik teoremine göre her özvektörün bulunma olasılığı p_{i1} olarak korunur. Bu süreçte bir miktar iş yapılır ve ısı transferi yoktur.

Evre 3: Sistem $T = T_L$ sıcaklığında soğuk banyo ile çiftlenmiştir. Bu nedenle sistem başka bir kuantum izokorik sürecinden geçer. Yeterince beklenildiğinde B dış manyetik alanda her bir enerji özdeğeri E_{i2}^L değerinde sabit tutulurken özvektörlere ait olan bulunma olasılığı p_{i1} den p_{i2} ye değişmektedir. Termalleştirme işleminden sonra, Q_{out} miktarda ısı serbest bırakılır, ancak hiçbir iş yapılmaz.

Evre 4: Sistem soğuk ısı banyosundan çıkarılır ve her bir enerji özdeğeri E_{i2}^L 'den E_{i1}^H 'a düşürmek için kuantum adyabatik daralma işleminden geçirilirken, her bir özvektörün

bulunma olasılığı p_{i2} ile aynı tutulur. Bu süreçte, bir miktar iş yapılır, ancak ısı değişimi yoktur. Bu aşamanın sonunda, çalışma ortamı ilk koşullarına geri döner ve tekrar döngüye girer. Kuantum ısı makinesinin çevrimsel olması nedeniyle, olasılık üzerinde $p_{i2} = p_{i0}$ şeklinde sınır koşulu vardır.

Bu tez çalışmasında, ısı çevriminin 2. ve 4. evrelerinin adyabatik olduğunu ve ideal adyabatik süreçler için geçerli olduğunu varsaydık. Genel olarak, bir ısı makinesinde ısıdan işe dönüşümü tartışmak için, sistemi bir denge konfigürasyonundan diğerine yönlendiren tersinir dönüşümler ele alınmaktadır.

Ancak, sistem termalizasyon süresinden daha hızlı itilirse, bu tür dönüşümler geri döndürülemez. Öte yandan, gerçek kuantum ısı makinesi protokollerinde, entropi veya spinler arasındaki etkileşim nedeniyle iç sürtünmeler ortaya çıkabilir. İdeal protokolümüzde, sistemin enerji düzeylerinin E_i değerinden yavaşça E_f değerine değiştirildiğini ancak bulunma olasılıklarının değişmediğini varsayıyoruz.

3.2.4. Modele ait İş ve Verim

Termal sistemde Şekil 3.8 de görüldüğü üzere 3 yolu boyunca absorbe edilen ısı Q_{in} , 1 yolu boyunca açığa çıkan ısı Q_{out} , iş W ve verim η olarak gösterilmiştir ve aşağıdaki denklemler aracılığı ile hesaplanabilir [79, 125]:

- Absorbe edilen ısı miktarı:

$$Q_{in} = \sum_n E_n^H [P_n(T_H) - P_n(T_L)] \quad (3.12)$$

- Açığa çıkan ısı miktarı:

$$Q_{out} = \sum_n E_n^L [P_n(T_L) - P_n(T_H)] \quad (3.13)$$

- İş miktarı:

$$W = Q_{\text{in}} + Q_{\text{out}} = \sum_n [E_n^H - E_n^L] [P_n(T_H) - P_n(T_L)] \quad (3.14)$$

• Verim:

$$\eta = \frac{W}{Q_{\text{in}}} \quad (3.15)$$



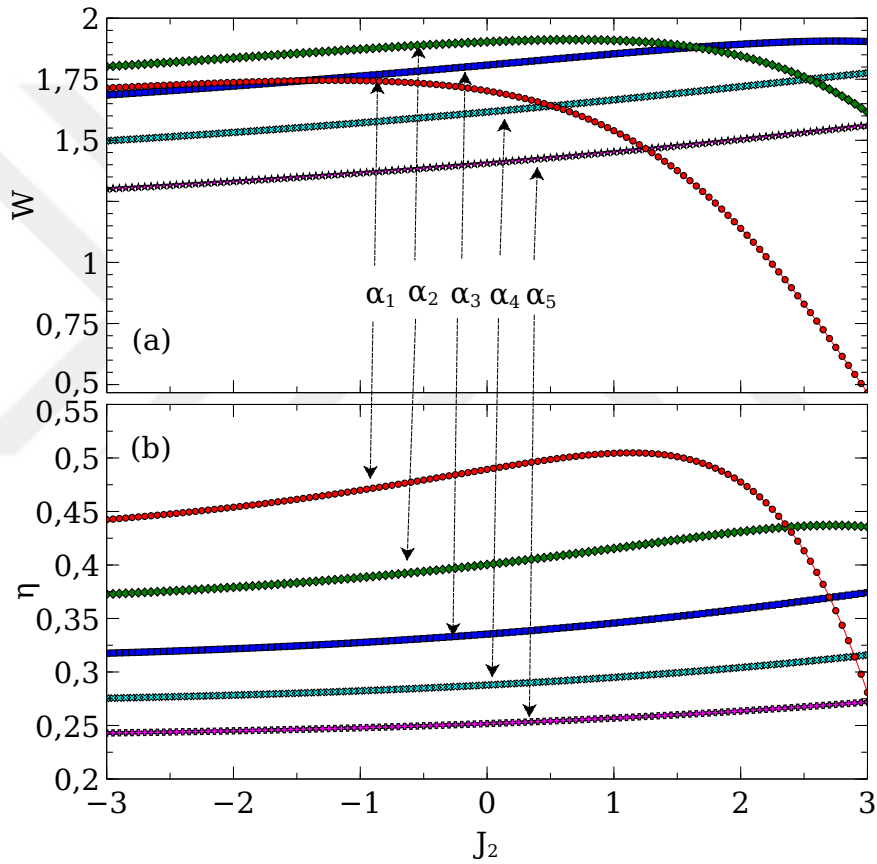
4. BULGULAR

Bu bölümde, farklı manyetik etkileşimler için Şekil 3.1’de verilen basit bir üçgen hücre üzerindeki Heisenberg XXZ karma $(1/2, 1, 1/2)$ spin sistemini inceleyeceğiz. Kuantum termodinamik döngülerin tüm aşamaları için ele aldığımız kuantum sistemin iş ve verimliliğini, çeşitli fiziksel parametrelere bağlı olarak Denklem 3.9 ile verilen Hamiltonyana ait enerji özdeğerlerini ve bulunma olasılıklarını kullanarak hesaplayacağız. Kuantum Otto ısı makinesinin termodinamiksel çevrimi incelendiğinde ısı değişimi birinci ve üçüncü evrelerde meydana gelirken iş bu çevrimin ikinci ve dördüncü evrelerinde oluşmaktadır. Termodinamiksel çevrimde, ısı Q_{in} , iş $W \equiv \Delta W$ ve verim η , Denklem 2.34a - 2.37 ve Denklem 3.11 yardımıyla hesaplanmaktadır. Yapılan tüm nümerik hesaplamalarda sıcaklıkları $T_H = 6$, $T_L = 1$ ve manyetik alanları $B_H = B_L = 0,8$ değerlerinde belirledik.

4.1. 1. DURUM: $J_1 > 0$ VE $-J < J_2 < +J$

Burada $J_1 > 0$ ve $-J < J_2 < +J$ değerleri için ele aldığımız kuantum ısı makinesinin yaptığı işi ve verimliliğini inceleyeceğiz. Spin-spin etkileşim sabitleri $J_1 > 0$ ve $J_2 < 0$ seçildiğinde $\Pi_{\langle i,j \rangle}$ hücre üzerindeki tüm spinlerin çarpımını ifade etmek üzere $\Pi_{\langle i,j \rangle} J_{ij} < 0$ koşulu sağlandığından sistemin manyetik fazı spin-cam olmaktadır. Ancak spin-spin etkileşim sabitleri $J_1 > 0$ ve $J_2 > 0$ olarak seçildiğinde, aynı yöndeki spin yönlenmeleri nedeniyle sistemin manyetik durumu ferromanyetik bir düzen gibi davranır. Kuantum ısı makinesi çevriminin ilk evresinde, sistem T_H sıcaklığında bir ısı rezervuarı ile temas halindedir ve diğer tüm fiziksel parametreler sabit olarak seçilmektedir. Yeteri kadar beklendiğinde her bir özvektörün bulunma olasılığı p_{i0} ’dan p_{i1} ’e değişirken enerji özdeğerleri E_{i1}^H değerinde sabit tutulmaktadır. Bu işlem, yalnızca Q_{in} ısının aktarıldığı basit bir kuantum izokorik işlemidir. Model ile ısı rezervuarı arasında ısı alışverişi olsa da, izokorik süreçte iş yapılmaz. Kuantum ısı makinesi çevriminin ikinci evresinde sabit J_2 ve $B_H = B_L$ değerleri için sıcaklık T_H ’dan T_L ’a spin etkileşim sabiti ise J_{1H} ’dan J_{1L} ’a değişmektedir. Bu evrede kuantum adyabatik süreç geçerlidir. Kuantum adyabatik süreçler çok yavaş ilerlediğinden olasılık dağılımları değişmeyecektir. Ayrıca kuantum adyabatik süreçlerde sistemle ısı rezervuarı arasında ısı alışverişi gerçekleşmez ancak enerji seviyeleri arasındaki fark değiştiğinden

sistem iş yapacaktır. Kuantum ısı makinesi çevriminin üçüncü evresinde, izokorik sistem T_L sıcaklıkta bir ısı rezervuarı ile temas halindedir ve diğer tüm fiziksel parametreler sabit olarak seçilmektedir. Bu evrede her bir özvektörün bulunma olasılığı p_{i1} 'den p_{i2} 'ye değişir, sistem iş üretmez ancak bir miktar Q_{out} ısıyı bırakır. Kuantum ısı makinesi çevriminin dördüncü ve son evresinde sıcaklık T_L 'den T_H 'ye, spin etkileşim sabiti J_{1L} 'den J_{1H} 'a değişmektedir. Bu evrede sistemle ısı rezervuarı arasında ısı alışverişi gerçekleşmez, sistem iş yapar. Tüm çevrimlerin sonunda kuantum sistemin ısı Q_{in} , yapılan iş W ve verim η değerleri hesaplanacaktır.



Şekil 4.1: Üzerine çalışılan Heisenberg karma spin sisteminin spin cam faz ($J_1 > 0$ & $J_2 < 0$) ve ferromanyetik faz ($J_1 > 0$ & $J_2 > 0$) durumları için ısı makinesi olarak (a) iş ve (b) verim davranışı grafiği. Burada, iş ve verim $\alpha_i = J_{1H}/J_{1L} = 2, 1.6, 1.5, 1.4, 1.3$, $i = 1, 2, 3, 4, 5$, $J_{1H} = \{4, 5, 6, 7, 8\}$ ve $J_{1L} = \{2, 3, 4, 5, 6\}$, $T_H = 6$, $T_L = 1$ ve $B_H = B_L = 0.8$ değerleri için J_2 değerine göre elde edilmiştir.

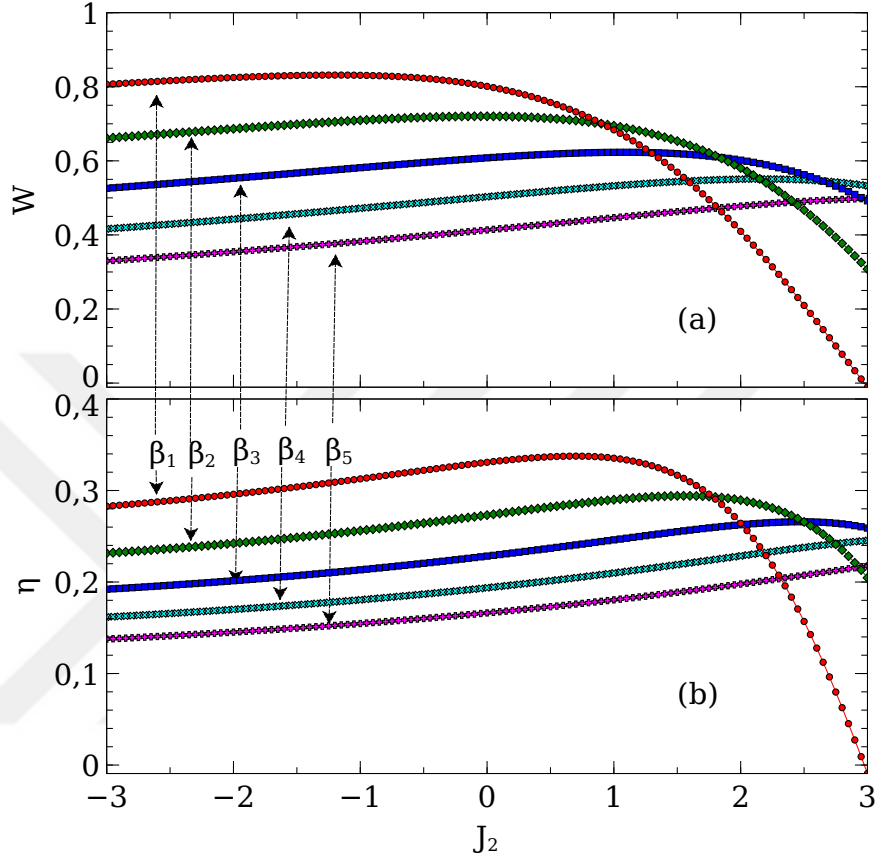
Kuantum ısı makinesi çevrimini spin etkileşim sabiti J_2 'nin değerini $-J < J_2 < +J$ aralığında farklı ve sabit değerler altında inceledik. $J_1 > 0$ & $J_2 < 0$ değerleri için kuantum spin sistemin spin-cam, $J_1 > 0$ & $J_2 > 0$ değerleri için ise spin sistemin ferromanyetik

fazda davranış göstereceğini söylemiştik. $J_{1H} > 0$ ve $J_{1L} > 0$ koşulu altında sıcaklık değerininin $T_H = 6$, $T_L = 1$, manyetik alan şiddetinin $B_H = B_L = 0.8$ seçimi altında sistemin yaptığı iş W ve verim η değerlerinin spin etkileşim sabiti J_2 'ye göre değişimi Şekil 4.1 de gösterilmektedir. Burada $\alpha_i = J_{1H}/J_{1L} = 2, 1.6, 1.5, 1.4, 1.3$ ve $i = 1, 2, 3, 4, 5$, $J_{1H} = \{4, 5, 6, 7, 8\}$, $J_{1L} = \{2, 3, 4, 5, 6\}$ 'dir. Kuantum termodinamik çevrim tamamlandığında seçilen spin düzeninin Şekil 4.1(a) ve (b)'de görüldüğü gibi pozitif iş ve verim ürettiği ortaya çıkmaktadır. Spin-cam fazında J_2 değeri arttığında $\alpha_i = 2, 1.6, 1.5, 1.4, 1.3$ değerleri için iş ve verim değerleri neredeyse doğrusal olarak artmaktadır. Bununla birlikte, ferromanyetik fazda, artan J_2 değerleri için iş ve verim değerleri sıfıra gitmektedir. Bununla birlikte yeterince büyük J_2 değerlerinde ferromanyetik faz için iş ve verim değerlerinin yok olduğu diğer yandan da bu termodinamik büyüklüklerin α_i değerlerine açık olarak bağlılığı görülmektedir. Örneğin, spin-cam faz için iş ve verim değerleri α_i 'ın büyük değerlerinde yüksek değerlere sahiptir. Ancak ferromanyetik fazda bu değerler α_i oranının büyük değerleri için hızla sıfıra inmektedir. Ayrıca, ferromanyetik fazda iş ve verim α_i oranının büyük değerleri için erken sıfıra gittiği görülmektedir. Sonuç olarak üçgen bir örgü üzerindeki Heisenberg XXZ karma $(1/2, 1, 1/2)$ spin sistemi $J_1 > 0$ & $J_2 < 0$ spin-cam fazı ve $J_1 > 0$ & $J_2 > 0$ ferromanyetik fazı için bir kuantum ısı makinesi gibi çalıştığı ve pozitif iş ürettiği görülmektedir.

4.2. 2. DURUM: $J_1 < 0$ VE $-J < J_2 < +J$

Burada $J_1 < 0$ ve $-J < J_2 < +J$ değerleri için ele aldığımız kuantum ısı makinesinin yaptığı işi ve verimliliğini inceleyeceğiz. Spin etkileşim sabitlerini $J_1 < 0$ & $J_2 < 0$ değerlerinde seçtiğimizde $\prod_{\langle i,j \rangle} J_{ij} < 0$ koşulu sağlandığından kuantum sistemin manyetik fazı spin-cam olmaktadır. Ancak spin etkileşim sabitlerini $J_1 < 0$ & $J_2 > 0$ olarak seçtiğimizde sistem, spinlerin farklı yönlerdeki yönelimleri nedeniyle ferrimagnetik fazda bulunur. 2. Durum için oluşturulan kuantum ısı makinesi çevriminin ikinci evresinde, sistemin sıcaklığı T_H 'dan T_L 'ye ve spin etkileşim sabiti J_1 ise $-J_{1H}$ 'den $-J_{1L}$ 'ye değişmektedir. Dördüncü evrede, sistemin sıcaklığı T_L 'den T_H 'ye spin etkileşim sabiti ise $-J_{1L}$ 'den $-J_{1H}$ 'ye değişmektedir. Sisteme ait hesaplanan iş ve verim fonksiyonları parametrik olarak J_2 'ye ($-J < J_2 < +J$) bağlıdır. Spin sistemi $J_1 < 0$ & $J_2 < 0$ değerleri için spin-cam fazda, $J_1 < 0$ & $J_2 > 0$ değerleri için ise ferrimanyetik fazda bulunur. Sıcaklık değerleri $T_H = 6$, $T_L = 1$, manyetik alan şiddetleri $B_H = B_L = 0.8$ seçilerek $J_{1H} < 0$ ve $J_{1L} < 0$ değerleri için

sistem incelenmiş ve Şekil 4.2 elde edilmiştir. Burada iş ve verim fonksiyonları $\beta_i = -J_{1L}/-J_{1H} = 2, 1.6, 1.5, 1.4, 1.3$ $i = 1, 2, 3, 4, 5$, $J_{1L} = \{-4, -5, -6, -7, -8\}$ ve $J_{1H} = \{-2, -3, -4, -5, -6\}$ değerleri için spin etkileşim sabiti J_2 'ye göre hesaplanmıştır.



Şekil 4.2: Üzerine çalışılan Heisenberg karma spin sisteminin spin cam faz ($J_1 < 0$ & $J_2 < 0$) ve ferrimanyetik faz ($J_1 < 0$ & $J_2 > 0$) durumları için ısı makinesi olarak (a) iş ve (b) verim davranışı grafiği. Burada, iş ve verim $\beta_i = -J_{1L}/-J_{1H} = 2, 1.6, 1.5, 1.4, 1.3$, $i = 1, 2, 3, 4, 5$, $J_{1L} = \{-4, -5, -6, -7, -8\}$ ve $J_{1H} = \{-2, -3, -4, -5, -6\}$, $T_H = 6$, $T_L = 1$ ve $B_H = B_L = 0.8$ değerleri için J_2 değerine göre elde edilmiştir.

Şekil 4.2 (a) ve (b) incelendiğinde kuantum spin sisteminin her iki spin düzeninde de pozitif iş ve verim üretmekte olduğu görülmektedir. $\beta_i = 2, 1.6, 1.5, 1.4, 1.3$ değerleri için spin-cam fazda pozitif iş ve verim değerleri spin etkileşim sabiti olan J_2 arttıkça doğrusal olarak artarken ferrimanyetik faz için sıfıra doğru azalmaktadır. Diğer yandan iş ve verim fonksiyonlarının β_i oranına açıkça bağlılığı da görülmektedir. Örneğin, spin-cam faz için iş ve verim değerleri büyük β_i değerleri için büyüktür. Ancak ferrimanyetik fazda bu fonksiyonların değerleri aynı β_i oranları için yavaş bir şekilde sıfıra gitmektedir. Sonuç olarak üçgen bir örgü üzerindeki Heisenberg XXZ karma $(1/2, 1, 1/2)$ spin sistemi $J_1 < 0$

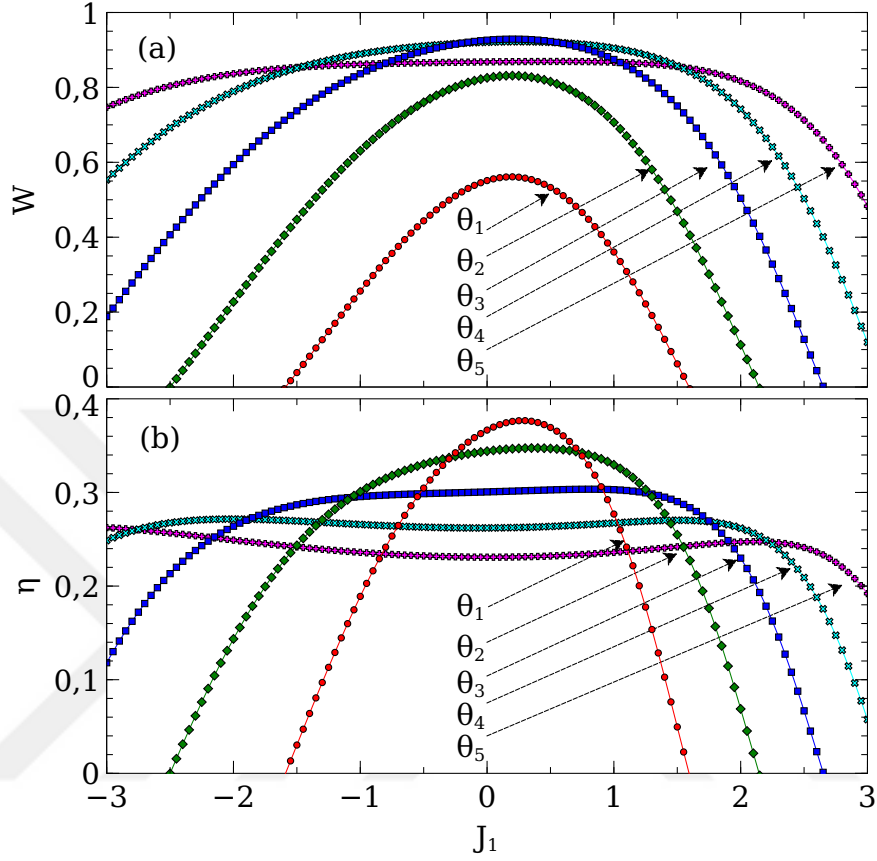
& $J_2 < 0$ spin-cam fazı ve $J_1 < 0$ & $J_2 > 0$ ferrimanyetik fazı için bir kuantum ısı makinesi gibi çalıştığı ve pozitif iş ürettiği görülmektedir. Ancak farklı faz durumları için iş ve verim üretme konusunda farklı ısı makineleri şeklinde çalıştıkları ortaya çıkmaktadır.

Bu sonuçlarla birlikte üst başlıkta incelenen 1. Durum ve bu başlıkta incelediğimiz 2. Durum arasında iş ve verim fonksiyonlarının değişimlerinin karakteristik olarak benzer oldukları görülmektedir. Ancak 2. Durum'da elde edilen iş ve verim fonksiyonları nümerik olarak 1. Durum için elde edilenlerden daha büyüktür. Bu fark, spin sisteminde yer alan ve büyük spin değeri olan spin-1'in 2.Durum'da spin-spin etkileşimlerinde baskın olmasından kaynaklanmaktadır.

4.3. 3. DURUM: $J_2 > 0$ VE $-J < J_1 < +J$

Burada $J_2 > 0$ ve $-J < J_1 < +J$ değerleri için ele aldığımız kuantum ısı makinesinin yaptığı işi ve verimliliğini inceleyeceğiz. Spin etkileşim sabitleri $J_2 > 0$ ve $J_1 < 0$ seçildiğinde kuantum spin sistemin net manyetizasyonu sıfırdan farklı bir değer alacağı için manyetik fazı ferrimanyetik olmaktadır. Ancak spin etkileşim sabitleri $J_2 > 0$ ve $J_1 > 0$ olarak seçildiğinde spinlerin yönelimi aynı yönde olacağından sistemin manyetik fazı ferromanyetik olmaktadır. 3. Durum için oluşturulan kuantum ısı makinesi çevriminin ikinci evresinde, sistemin sıcaklığı T_H 'den T_L 'ye ve spin etkileşim sabiti J_2 ise J_{2H} 'den J_{2L} 'ye değişmektedir. Kuantum ısı makinesinin ikinci evresinden farklı olarak üçüncü evresinde sistemin sıcaklığı T_L 'den T_H 'ye ve spin etkileşim sabiti J_2 ise J_{2L} 'den J_{2H} 'ye değişmektedir. Sıcaklık değerleri $T_H = 6$, $T_L = 1$, manyetik alan şiddetleri $B_H = B_L = 0.8$ seçilerek $J_{2H} > 0$ ve $J_{2L} > 0$ değerleri için sistem incelenmiş ve Şekil 4.3 elde edilmiştir. Burada iş ve verim fonksiyonlarının $\theta_i = J_{2H}/J_{2L} = 2, 1.6, 1.5, 1.4, 1.3$, $i = 1, 2, 3, 4, 5$, $J_{2H} = \{4, 5, 6, 7, 8\}$ ve $J_{2L} = \{2, 3, 4, 5, 6\}$ değerleri için spin etkileşim sabiti J_2 'ye göre değişimi ele alınmıştır. Şekil 4.3 (a) ve (b) incelendiğinde kuantum spin sisteminin her iki spin düzeninde de pozitif iş ve verim üretmekte olduğu görülmektedir. Bununla birlikte, ferrimanyetik faz durumu için artan J_1 değerlerinde büyük θ_i değerleri için iş ve verim fonksiyonlarının maksimum bir değere ulaştığı da görülmektedir. Ancak küçük θ_i değerleri için iş ve verim fonksiyonları maksimum değere ulaştıktan sonra neredeyse sabit bir değere ulaşmaktadırlar. Ortaya çıkan diğer bir ilginç davranış ise θ_i oranları büyüdükçe verim fonksiyonunun maksimum değerinin artmasıdır. Ferromanyetik faz durumu için artan J_1 değerleri için iş ve verim fonksiyonu sıfıra

gitmektedir. Benzer olarak ferrimanyetik faz durumunda J_1 değeri sıfıra giderken küçük θ_i oranları için iş ve verim fonksiyonları neredeyse sabit bir forma girmektedir.



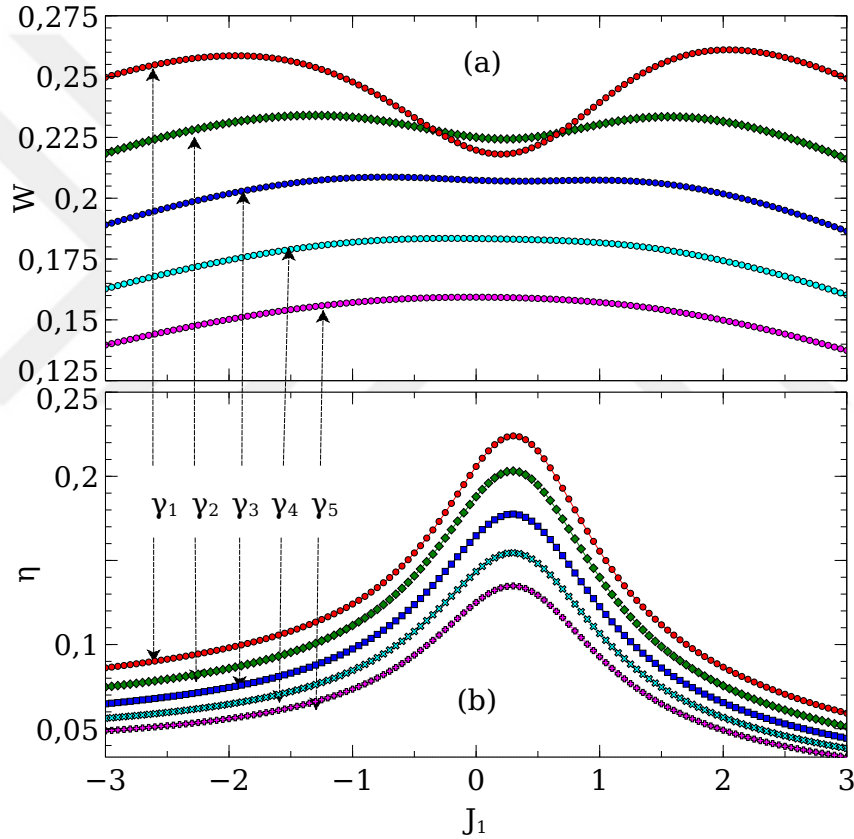
Şekil 4.3: Üzerine çalışılan Heisenberg karma spin sisteminin ferrimanyetik faz ($J_2 > 0$ & $J_1 < 0$) ve ferromanyetik faz ($J_2 > 0$ & $J_1 > 0$) durumları için ısı makinesi olarak (a) iş ve (b) verim davranışı grafiği. Burada, iş ve verim $\theta_i = J_{2H}/J_{2L} = 2, 1.6, 1.5, 1.4, 1.3$, $i = 1, 2, 3, 4, 5$, $J_{2H} = \{4, 5, 6, 7, 8\}$ ve $J_{2L} = \{2, 3, 4, 5, 6\}$, $T_H = 6$, $T_L = 1$ ve $B_H = B_L = 0.8$ değerleri için J_1 değerine göre elde edilmiştir.

Sonuç olarak üçgen bir örgü üzerindeki Heisenberg XXZ karma $(1/2, 1, 1/2)$ spin sistemi $J_2 < 0$ & $J_1 < 0$ ferrimanyetik fazı ve $J_2 < 0$ & $J_1 > 0$ ferromanyetik fazı için bir kuantum ısı makinesi gibi çalıştığı ve pozitif iş ürettiği görülmektedir. Ancak farklı faz durumları için iş ve verim üretme konusunda farklı ısı makineleri şeklinde çalıştıkları ortaya çıkmaktadır.

4.4. 4. DURUM: $J_2 < 0$ VE $-J < J_1 < +J$

Burada $J_2 < 0$ ve $-J < J_1 < +J$ değerleri için ele aldığımız kuantum ısı makinesinin yaptığı işi ve verimliliğini inceleyeceğiz. Spin etkileşim sabitlerinin $J_2 < 0$ & $J_1 < 0$ ve $J_2 < 0$

& $J_1 > 0$ olması koşulu altında spin sistemi bunalımlı (frustrated) hale gelir, bu durumda sistemin manyetik fazı spin-cam olmaktadır. 4. Durum için oluşturulan kuantum ısı makinesi çevriminin ikinci evresinde, sistemin sıcaklığı T_H 'den T_L 'ye ve spin etkileşim sabiti J_2 ise $-J_{2H}$ 'den $-J_{2L}$ 'ye değişmektedir. Bu evrede kuantum adyabatik süreç geçerli olur, sistemle ısı rezervuarı arasında ısı alışverişi gerçekleşmez ancak sistem iş yapmaktadır. Diğer yandan kuantum ısı makinesi çevriminin son evresinde sistemin sıcaklığı T_L 'den T_H 'ye ve spin etkileşim sabiti J_2 ise $-J_{2L}$ 'den $-J_{2H}$ 'ye değişmektedir. Sıcaklık değerleri $T_H = 6$, $T_L = 1$, manyetik alan şiddetleri $B_H = B_L = 0.8$ seçilerek $J_{2H} < 0$ ve $J_{2L} < 0$ değerleri için sistem incelenmiş ve Şekil 4.4 elde edilmiştir.



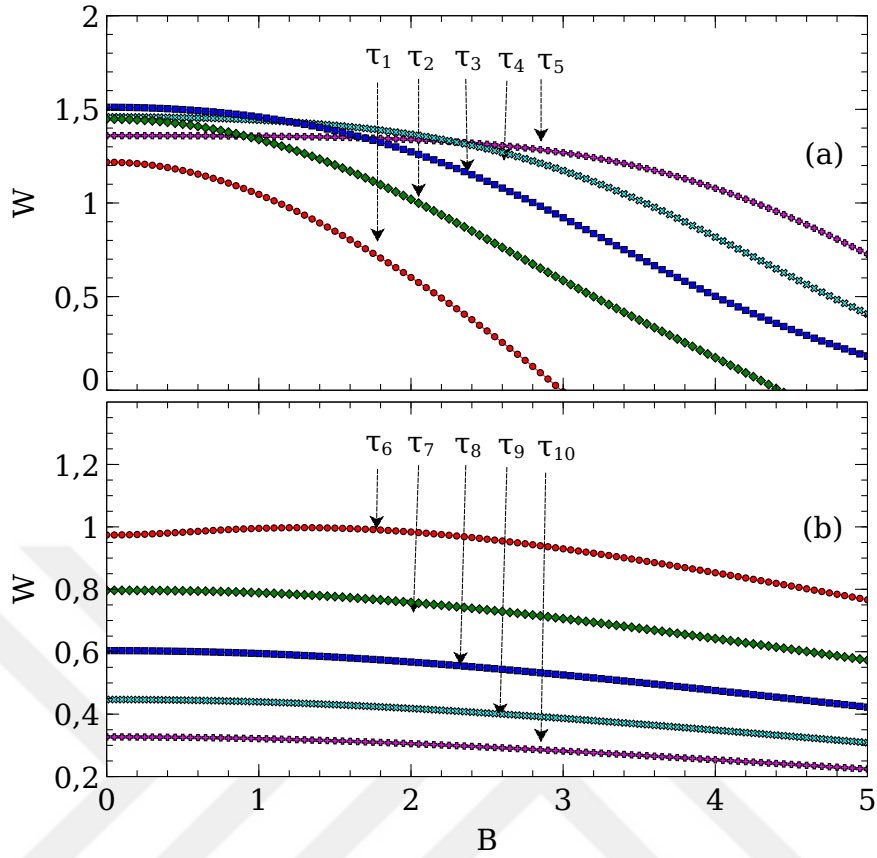
Şekil 4.4: Üzerine çalışılan Heisenberg karma spin sisteminin spin cam faz ($J_2 < 0$ ve $J_1 < 0$ veya $J_2 < 0$ ve $J_1 > 0$) durumları için ısı makinesi olarak (a) iş ve (b) verim davranışı grafiği. Burada, iş ve verim $\gamma_i = -J_{2L} / -J_{2H} = 2, 1.6, 1.5, 1.4, 1.3, i = 1, 2, 3, 4, 5, J_{2L} = \{-4, -5, -6, -7, -8\}$ ve $J_{2H} = \{-2, -3, -4, -5, -6\}$, $T_H = 6$, $T_L = 1$ ve $B_H = B_L = 0.8$ değerleri için J_1 değerine göre elde edilmiştir.

Burada iş ve verim fonksiyonlarının $\gamma_i = -J_{2L} / -J_{2H} = 2, 1.6, 1.5, 1.4, 1.3, i = 1, 2, 3, 4, 5, J_{2L} = \{-4, -5, -6, -7, -8\}$ ve $J_{2H} = \{-2, -3, -4, -5, -6\}$ değerleri için spin etkileşim sabiti J_2 'ye göre değişimi ele alınmıştır. Şekil 4.4 (a) ve (b) incelendiğinde kuantum spin

sisteminin her iki spin düzeninde de pozitif iş ve verim üretmekte olduğu görülmektedir. Küçük γ_i oranlarında artan J_1 değerleri için spin etkileşim sabitlerinin $J_2 < 0$ & $J_1 < 0$ olduğu durumda iş fonksiyonu maksimum bir değere ulaşırken $J_2 < 0$ & $J_1 > 0$ olduğu durumda azalmaktadır. γ_i oranının büyük olduğu değerler için iş fonksiyonu sıfıra yakın bir değer olarak hesaplanmaktadır. İş fonksiyonunun tersine verim fonksiyonu bütün γ_i oranı değerlerinde sıfıra yakın maksimum noktaları bulunmaktadır. Sonuç olarak üçgen bir örgü üzerindeki Heisenberg XXZ karma $(1/2, 1, 1/2)$ spin sistemi spin-cam fazında $J_2 < 0$ & $J_1 < 0$ ve $J_2 < 0$ & $J_1 > 0$ için bir kuantum ısı makinesi gibi çalıştığı ve pozitif iş ürettiği görülmektedir. Ancak farklı faz durumları için iş ve verim üretme konusunda farklı ısı makineleri şeklinde çalıştıkları ortaya çıkmaktadır.

4.5. İŞ-MANYETİK ALAN

Bu alt başlıkta son olarak, kuantum sistemin davranışını araştırmak için iki farklı durum için iş fonksiyonunun manyetik alan bağılılığı incelenmektedir. İlk olarak kuantum ısı makinesi çevriminin ikinci evresinde sabit olarak seçilen T_H ve B değerleri için spin etkileşim sabitlerinin sırasıyla $J_{1H} > 0$ ve $J_{2H} > 0$ değerlerinden $J_{1L} > 0$ ve $J_{2L} > 0$ değerlerine değişimi incelenmektedir. Bununla birlikte aynı sabit değerler altında çevrimin dördüncü evresinde spin etkileşim sabitleri sırasıyla J_{1L} ve J_{2L} değerlerinden J_{1H} ve J_{2H} değerlerine değişmektedir. Bu durumda, kuantum spin sistemi bu spin-spin etkileşimleri altında ferromanyetik faz davranışında bulunur. İkinci olarak ise spin etkileşim sabitlerinin sırasıyla $J_{1H} < 0$ ve $J_{2H} < 0$ değerlerinden $J_{1L} < 0$ ve $J_{2L} < 0$ değerlerine değişimi incelenmektedir. Burada da çevrimin dördüncü evresinde spin etkileşim sabitleri sırasıyla $J_{1L} < 0$ ve $J_{2L} < 0$ değerlerinden $J_{1H} < 0$ ve $J_{2H} < 0$ değerlerine değişmektedir. Bu durumda, kuantum spin sistemi bu spin-spin etkileşimleri altında spin-cam faz davranışında bulunur. İki farklı durum için iş fonksiyonunun manyetik alan bağılılığı Şekil 4.5 (a) ve (b) ile verilmektedir. Şekil 4.5 (a) grafiğinde sıcaklık $T_H = 6$, $T_L = 1$, spin etkileşim sabitleri oranı ise $\tau_i = J_{1H}/J_{1L} = J_{2H}/J_{2L} = 2, 1.6, 1.5, 1.4, 1.3$, $i = 1, 2, 3, 4, 5$, $J_{1H} = \{4, 5, 6, 7, 8\}$ ve $J_{1L} = \{2, 3, 4, 5, 6\}$ değerlerinde Şekil 4.5 (b) grafiğinde sıcaklık $T_H = 6$, $T_L = 1$ ve spin etkileşim sabitleri oranı ise $\tau_i = -J_{1L}/-J_{1H} = -J_{2L}/-J_{2H} = 2, 1.6, 1.5, 1.4, 1.3$, $i = 6, 7, 8, 9, 10$, $J_{1L} = \{-4, -5, -6, -7, -8\}$ ve $J_{1H} = \{-2, -3, -4, -5, -6\}$ değerlerinde dikkate alınmaktadır.



Şekil 4.5: Üzerine çalışılan Heisenberg karma spin sisteminin a) $\tau_i = J_{1H}/J_{1L} = J_{2H}/J_{2L} = 2, 1.6, 1.5, 1.4, 1.3$, $i = 1, 2, 3, 4, 5$, $J_{1H} = \{4, 5, 6, 7, 8\}$ ve $J_{1L} = \{2, 3, 4, 5, 6\}$ değerleri için b) $\tau_i = -J_{1L}/-J_{1H} = -J_{2L}/-J_{2H} = 2, 1.6, 1.5, 1.4, 1.3$, $i = 6, 7, 8, 9, 10$, $J_{1L} = \{-4, -5, -6, -7, -8\}$ ve $J_{1H} = \{-2, -3, -4, -5, -6\}$ değerleri için iş (W)-manyetik alan (B) ilişkisi grafiği.

Şekil 4.5 incelendiğinde dış manyetik alan şiddeti artırıldığında iş fonksiyonunun azaldığı görülmektedir. Manyetik alan şiddeti olan B 'nin büyük değerleri için iş fonksiyonu ferromanyetik faz durumunda hızla azalırken spin- cam faz durumunda yavaş bir şekilde azalmaktadır. Karşımıza çıkan bir diğer ilginç davranış ise Şekil 4.5 (a)'da τ_i oranının küçük değerlerinde iş fonksiyonunun büyük değerler alması, Şekil 4.5 (b)'de ise τ_i oranının büyük değerlerinde küçük değerlere sahip olmasıdır.

5. TARTIŞMA VE SONUÇ

Bu tez çalışmasında, üçgen bir hücre üzerinde bulunan $(1/2, 1, 1/2)$ gibi üç spinden oluşan karma Heisenberg XXZ spin sistemi için dış homojen manyetik alan altında spinler arası etkileşim sabiti olan J parametresi değerlerinin değişimi ile oluşturulan bunalımlı manyetik sistemin bir kuantum ısı makinesi gibi çalıştığını göstererek bu değişim ile belirlenen spin-cam, antiferromanyetik ve ferromanyetik faz durumları ve birbirleri arasındaki geçişleri inceledik. Dört çevrimli kuantum Otto çevrimi şeklinde ele aldığımız kuantum spin sistemine ait yapılan iş ve verim büyüklüklerini hesaplayarak çeşitli parametrelere göre bu büyüklüklerin değişimlerini tartıştık. İlk olarak, ikinci bölümde, tezin amacına yönelik olarak kullanılan kuantum termodinamiğin 1. yasası, kuantum termodinamik süreçler, klasik ve kuantum ısı makineleri detaylı olarak ele alınmıştır. Üçüncü bölümde, kuantum Heisenberg spin sistemleri tanıtılarak manyetik fazlardan spin-cam fazı ayrıntılı olarak incelenmiştir. Daha sonra üçgen hücre üzerinde yer alan ve dış homojen manyetik alan altında üç spinli karma Heisenberg XXZ modeli kullanılarak sistemin spin-cam, antiferromanyetik ve ferromanyetik faz durumlarının değişimleri sistemin yaptığı iş ve sahip olduğu verim kavramları üzerinden hesaplanarak belirlenmiştir. Dördüncü bölümde, üçüncü bölümde modele ait iş ve verim durumlarını incelediğimiz Heisenberg XXZ spin sistemine ait bulgulara yer verilmiştir. Tezin son bölümü olan beşinci bölümde ise yaptığımız hesaplamalar sonucu elde ettiğimiz bulgular tartışılmıştır. Öncelikle, yapılan tüm nümerik hesaplamalarda sıcaklıkları $T_H = 6$, $T_L = 1$ ve manyetik alanları $B_H = B_L = 0,8$ değerlerinde belirledik.

$J_1 > 0$ ve $-J < J_2 < +J$ değerleri için ele aldığımız kuantum ısı makinesinin yaptığı işi ve verimliliğini incelediğimizde spin-spin etkileşim sabitleri $J_1 > 0$ ve $J_2 < 0$ seçildiğinde $\Pi_{\langle i,j \rangle}$ hücre üzerindeki tüm spinlerin çarpımını ifade etmek üzere $\Pi_{\langle i,j \rangle} J_{ij} < 0$ koşulu sağlandığından sistemin manyetik fazının spin-cam olduğunu, spin-spin etkileşim sabitleri $J_1 > 0$ ve $J_2 > 0$ olarak seçildiğinde ise aynı yöndeki spin yönlenmeleri nedeniyle sistemin manyetik durumunun ferromanyetik olduğunu belirledik. Kuantum ısı makinesi çevrimini spin etkileşim sabiti J_2 'nin değerini $-J < J_2 < +J$ aralığında farklı ve sabit değerler altında incelediğimizde $J_{1H} > 0$ ve $J_{1L} > 0$ koşulu altında sıcaklık değerininin $T_H = 6$, $T_L = 1$,

manyetik alan şiddetinin $B_H = B_L = 0.8$ seçimi altında sistemin yaptığı iş W ve verim η değerlerinin spin etkileşim sabiti J_2 'ye göre değişiminin anlaşılması için Şekil 4.1 elde edilmiştir. Burada, spin-cam fazı için J_2 değeri arttığında kuantum ısı makinesinin iş ve veriminin doğrusala yakın bir şekilde arttığı ferromanyetik fazda ise artan J_2 değerleri için iş ve verim değerlerinin sıfıra yaklaştığı tespit edilmiştir. Böylelikle $J_1 > 0$ & $J_2 < 0$ spin-cam fazı ve $J_1 > 0$ & $J_2 > 0$ ferromanyetik fazı için kuantum sistemin bir kuantum ısı makinesi gibi çalıştığı ve pozitif iş ürettiği ortaya çıkmıştır.

$J_1 < 0$ ve $-J < J_2 < +J$ seçildiğinde ise $J_1 < 0$ & $J_2 < 0$ değerlerinde kuantum sistemin manyetik fazı spin-cam spin etkileşim sabitlerini $J_1 < 0$ & $J_2 > 0$ olarak seçtiğimizde sistem, spinlerin farklı yönlerdeki yönelimleri nedeniyle ferrimagnetik fazda bulunur. Sisteme ait hesaplanan iş ve verim fonksiyonları parametrik olarak J_2 'ye ($-J < J_2 < +J$) bağlı olarak incelediğimizde Şekil 4.2 elde edilmiştir. Burada, kuantum spin sisteminin her iki spin düzeninde de pozitif iş ve verim üretmekte olduğu tespit edilmiştir. Spin-cam fazda pozitif iş ve verim değerleri spin etkileşim sabiti olan J_2 arttıkça doğrusal olarak artarken ferrimanyetik faz için sıfıra doğru azaldığı görülmüştür. Sonuç olarak üçgen bir örgü üzerindeki Heisenberg XXZ karma $(1/2, 1, 1/2)$ spin sistemi $J_1 < 0$ & $J_2 < 0$ spin-cam fazı ve $J_1 < 0$ & $J_2 > 0$ ferrimanyetik fazı için bir kuantum ısı makinesi gibi çalıştığı ve pozitif iş ürettiği belirlenmiştir. Ancak farklı faz durumları için iş ve verim üretme konusunda farklı ısı makineleri şeklinde çalıştıkları ortaya çıkmaktadır.

$J_2 > 0$ ve $-J < J_1 < +J$ seçildiğinde $J_2 > 0$ ve $J_1 < 0$ değerlerinde kuantum spin sistemin net manyetizasyonu sıfırdan farklı bir değer alacağı için manyetik fazının ferrimanyetik olduğu, spin etkileşim sabitleri $J_2 > 0$ ve $J_1 > 0$ olarak seçildiğinde ise spinlerin yönelimi aynı yönde olacağından sistemin manyetik fazı ferromanyetik olduğu tespit edilmiştir. Sisteme ait hesaplanan iş ve verim fonksiyonları parametrik olarak $J_{2H} > 0$ ve $J_{2L} > 0$ değerleri için sistem incelenmiş ve Şekil 4.3 elde edilmiştir. Burada, kuantum spin sisteminin her iki spin düzeninde de pozitif iş ve verim üretmekte olduğu ve ferrimanyetik faz durumu için artan J_1 değerlerinde büyük θ_i değerleri için iş ve verim fonksiyonlarının maksimum bir değere ulaştığı ancak küçük θ_i değerleri için iş ve verim fonksiyonlarının maksimum değere ulaştıktan sonra neredeyse sabit bir değere ulaştığı tespit edilmiştir. Ayrıca θ_i oranları büyüdükçe verim fonksiyonunun maksimum değeri artmakta ve ferromanyetik faz durumu için artan J_1 değerleri için iş ve verim fonksiyonu sıfıra giderken ferrimanyetik faz durumunda J_1 değeri sıfıra giderken küçük θ_i oranları için iş ve verim fonksiyonları

neredeyse sabit bir forma gelmekte olduğu anlaşılmıştır. Burada da önceki sonuçlara benzer olarak iki farklı faz için kuantum sistemin bir kuantum ısı makinesi gibi çalıştığı ve pozitif iş ürettiği görülmüştür.

$J_2 < 0$ ve $-J < J_1 < +J$ seçildiğinde $J_2 < 0$ & $J_1 < 0$ ve $J_2 < 0$ & $J_1 > 0$ değerlerinde spin sisteminin bunalımlı (frustrated) hale geldiği, bu durumda sistemin manyetik fazının spin-cam olduğu belirlenmiştir. Sisteme ait hesaplanan iş ve verim fonksiyonları parametrik olarak $J_{2H} < 0$ ve $J_{2L} < 0$ değerleri için sistem incelenmiş ve Şekil 4.4 elde edilmiştir. Burada, kuantum spin sisteminin her iki spin düzeninde de pozitif iş ve verim üretmekte olduğu, küçük γ_i oranlarında artan J_1 değerleri için spin etkileşim sabitlerinin $J_2 < 0$ & $J_1 < 0$ olduğu durumda iş fonksiyonunun maksimum bir değere ulaşırken $J_2 < 0$ & $J_1 > 0$ olduğu durumda azaldığı gözlenmiştir. İş fonksiyonunun tersine verim fonksiyonunun bütün γ_i oranı değerlerinde sıfıra yakın maksimum noktaları bulunduğu da ortaya çıkmıştır.

Kuantum sistemin ısı motoru davranışını araştırmak için iki farklı faz durumu için iş fonksiyonunun manyetik alan bağılılığı da Şekil 4.5 (a) ve (b) ile incelenmiştir. Sabit olarak seçilen T_H ve B değerleri için spin etkileşim sabitlerinin sırasıyla $J_{1H} > 0$ ve $J_{2H} > 0$ değerlerinden $J_{1L} > 0$ ve $J_{2L} > 0$ değerlerine değişimi incelenmiştir. Şekil 4.5 incelendiğinde dış manyetik alan şiddeti artırıldığında iş fonksiyonunun azaldığı tespit edilmiştir. Manyetik alan şiddeti olan B 'nin büyük değerleri için iş fonksiyonu ferromanyetik faz durumunda hızla azalırken spin-cam faz durumunda yavaş bir şekilde azaldığı belirlenmiştir. Burada ilginç olarak Şekil 4.5 (a)'da τ_i oranının küçük değerlerinde iş fonksiyonunun büyük değerler aldığı Şekil 4.5 (b)'de ise τ_i oranının büyük değerlerinde küçük değerlere sahip olduğu gözlenmiştir.

Bu sonuçlarla birlikte $J_1 > 0$ ve $-J < J_2 < +J$ ve $J_1 < 0$ ve $-J < J_2 < +J$ ile oluşturulan sistemler için iş ve verim fonksiyonlarının değişimlerinin karakteristik olarak benzer oldukları görülmektedir. Ancak $J_1 < 0$ ve $-J < J_2 < +J$ seçildiğinde elde edilen iş ve verim fonksiyonları nümerik olarak $J_1 > 0$ ve $-J < J_2 < +J$ için elde edilenlerden daha büyüktür. Bu fark, spin sisteminde yer alan ve büyük spin değeri olan spin-1'in spin-spin etkileşimlerinde daha baskın olmasından kaynaklandığı dikkate alınmıştır.

Şekil 4.1-4.5 ile verilen grafiklerden de anlaşıldığı gibi üzerine çalıştığımız kuantum sistem, bir ısı rezervuarı ile etkileşimdeyken tüm termodinamiksel çevrimler için pozitif iş ve verim üretmektedir. Son olarak, farklı spin-spin etkileşim sabitleri dikkate alınarak ısı

makinesi şeklinde çalışan kuantum sistem için yapılan iş'in manyetik alan bağımlılığını da araştırdık ve tüm sonuçları tartıştık. Burada, Heisenberg XXZ spin modelinin kuantum ısı makinesini incelemek için bir model olduğunu vurgulamalıyız. Ancak bu model, farklı spin-spin etkileşim sabitlerinin dikkate alınmasıyla ortaya çıkan farklı manyetik fazların kuantum ısı makinesi davranışını tartışmak için kullanılabilir. Örneğin, ferromanyetik, anti-ferromanyetik veya spin-cam gibi farklı manyetik fazlar için iş ve verim kolaylıkla analiz edilebilir. Bunların dışında, Heisenberg spin modelleri, kuantum bilgi teorisi, parçacık fiziği, optik örgü üzerindeki ultra soğuk atomlar, çok cisim fiziği ve katı hal fiziği gibi fiziğin farklı alanlarındaki birçok sorunu analiz etmek için kullanılmaktadır. Bu anlamda, ele aldığımız kuantum Heisenberg spin modeli, bahsedilen alanlardaki olası kuantum ısı makinesi mekanizmalarının anlaşılmasına ışık tutabilir. Bununla birlikte spin cam benzeri davranış gösteren biyolojik sistemlerde (insan beynindeki nöron ağları, biyolojik sistemlerdeki hiyerarşi, moleküler evrim ve konfigürasyon vb.) de spin cam sistemlerdekine benzer klasik/kuantum ısı makinesinin davranışının varlığını araştırmak bu tez araştırmasının sürekliliğini artıracak açık problemlerdir.

KAYNAKLAR

- [1]. Carnot, S., 1824, Réflexions sur la puissance motrice du feu et sur les machines propres à développer cette puissance, *Gauthier-Villars*, **55**.
- [2]. Hänggi, P., Ingold, G-L., 2006, Quantum Brownian motion and the Third Law of thermodynamics, *Acta Phys. Pol.*, **37**, 1537.
- [3]. Serreli, V., Lee, C-F., Kay, E.R., Leigh, D.A., 2007, A molecular information ratchet, *Nature*, **445**, 523.
- [4]. Ragazzon, G., Baroncini, M., Silvi, S., Venturi, M., Credi, A., 2015, Light-powered autonomous and directional molecular motion of a dissipative self-assembling system, *Nature Nano.*, **10**, 70.
- [5]. Blickle, V., Bechinger, C., 2011, Realization of a micrometre-sized stochastic heat engine, *Nature Phys.*, **8**, 143.
- [6]. Dechant, A., Kiesel, N., Lutz, E., 2015, All-Optical Nanomechanical Heat Engine, *Phys. Rev. Lett.*, **114**, 183602.
- [7]. Rings, D., Schachoff, R., Selmke, M., Cichos, F., Kroy, K., 2010, Hot Brownian Motion, *Phys. Rev. Lett.*, **105**, 090604.
- [8]. Millen, J., Deesuwana, T., Barker, P., Anders, J., 2014, Nanoscale temperature measurements using non-equilibrium Brownian dynamics of a levitated nanosphere, *Nature Nano.*, **9**, 425.
- [9]. Callen, H.B., 1985, Thermodynamics and an Introduction To Thermostatistics, *John Wiley Sons*.
- [10]. Atkins, P., 2010, The laws of thermodynamics: A very short introduction, *Oxford University Press*.
- [11]. Seifert, U., 2012, Stochastic thermodynamics, fluctuation theorems and molecular machines, *Rep. Prog. Phys.*, **75**, 126001.
- [12]. Eisert, J., Friesdorf, M., Gogolin, C., 2015, Quantum many-body systems out of equilibrium, *Nature Physics*, **11**, 124–130.
- [13]. Mehboudi, M., Moreno-Cardoner, M., De Chiara, G., Sanpera, A., 2015, Thermometry precision in strongly correlated ultracold lattice gases, *New J. Phys.*, **17**, 055020.
- [14]. Viisanen, K.L., Suomela, S., Gasparinetti, S., Saira, O-P., Ankerhold, J., Pekola, J.P., 2015, Incomplete measurement of work in a dissipative two level system, *New J. Phys.*, **17**, 055014.

- [15]. Roßnagel, J., Tolazzi, K.N., Schmidt-Kaler, F., Singer, K., 2015, Fast thermometry for trapped ions using dark resonances, *New J. Phys.*, **17**, 045004.
- [16]. De Chiara, G., Roncaglia, A.J., Paz, J.P., 2015, Measuring work and heat in ultracold quantum gases, *New J. Phys.*, **17**, 035004.
- [17]. Scovil, H.E., du Bois, E.O.S., 1959, Three-level masers as heat engines, *Phys. Rev. Lett.*, **2**, 262–263.
- [18]. Geusic, J., du Bois, E.O.S., Grasse, R.D., Scovil, H.E., 1967, Quantum equivalence of the carnot cycle, *Phys. Rev.*, **156**, 343–351.
- [19]. Jarzynski, C., 2011, Equalities and Inequalities: Irreversibility and the Second Law of Thermodynamics at the Nanoscale, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.*, **2**, 329-351.
- [20]. Jarzynski, C., 1997, Nonequilibrium Equality for Free Energy Differences, *Phys. Rev. Lett.*, **78**, 2690.
- [21]. Jarzynski, C., 1997, Equilibrium free-energy differences from nonequilibrium measurements: A master-equation approach, *Phys. Rev. E*, **56**, 5018.
- [22]. Crooks, G.E., 1999, Entropy production fluctuation theorem and the nonequilibrium work relation for free energy differences, *Phys. Rev. Lett.*, **60**, 2721.
- [23]. Crooks, G.E., 2000, Path-ensemble averages in systems driven far from equilibrium, *Phys. Rev. Lett.*, **61**, 2361.
- [24]. Chernyak V., Mukamel S., 2004, Effect of quantum collapse on the distribution of work in driven single molecules, *Phys. Rev. Lett.*, **93**, 048302.
- [25]. Cuetara, G.B., Engel, A., Esposito, M., 2015, Stochastic thermodynamics of rapidly driven systems, *New J. Phys.*, **17**, 055002.
- [26]. Campisi, M., Hänggi, P., Talkner, P., 2011, Colloquium: Quantum fluctuation relations: Foundations and applications, *Rev. Mod. Phys.*, **83**, 771.
- [27]. Allahverdyan, A.E., Nieuwenhuizen, T.M., 2005, Fluctuations of work from quantum subensembles: The case against quantum work-fluctuation theorems, *Phys. Rev. E*, **71**, 066102.
- [28]. Huber, G., Schmidt-Kaler, F., Deffner, S., Lutz, E., 2008, Employing Trapped Cold Ions to Verify the Quantum Jarzynski Equality, *Phys. Rev. Lett.*, **101**, 070403.
- [29]. Dorner, R., Clark, S.R., Heaney, L., Fazio, R., Goold, J., Vedral, V., 2008, Extracting Quantum Work Statistics and Fluctuation Theorems by Single-Qubit Interferometry, *Phys. Rev. Lett.*, **110**, 230601.
- [30]. Mazzola, L., De Chiara, G., Paternostro, M., 2013, Measuring the Characteristic Function of the Work Distribution, *Phys. Rev. Lett.*, **110**, 230602.
- [31]. Heyl, M., Kehrein, S., 2012, Crooks Relation in Optical Spectra: Universality in Work Distributions for Weak Local Quenches, *Phys. Rev. Lett.*, **108**, 190601.

- [32]. Batalhão, T.B. ve diğ., 2014, Experimental Reconstruction of Work Distribution and Study of Fluctuation Relations in a Closed Quantum System, *Phys. Rev. Lett.*, **113**, 140601.
- [33]. An, S., Zhang, J-N., Um, M., Lv, D., Lu, Y., Zhang, J., Yin, Z-Q., Quan, H.T. ve Kim, K., 2015, Experimental test of the quantum Jarzynski equality with a trapped-ion system, *Nature Phys.*, **11**, 193.
- [34]. Brito, F., Rouxinol, F., LaHaye, M.D. ve Caldeira, A.O., 2015, Testing time reversal symmetry in artificial atoms, *New J. Phys.*, **17**, 075002.
- [35]. Goold, J., Poschinger, U. ve Modi, K., 2014, Measuring the heat exchange of a quantum process, *Phys. Rev. E*, **90**, 020101.
- [36]. Maruyama, K., Nori, F. ve Vedral, V., 2014, Colloquium: The physics of Maxwell's demon and information, *Rev. Mod. Phys.*, **81**, 1.
- [37]. Morikuni, Y. ve Tasaki, H., 2011, Quantum Jarzynski-Sagawa-Ueda Relations, *J. Stat. Phys.*, **143**, 1.
- [38]. Funo, K., Murashita, Y. ve Ueda, M., 2015, Quantum nonequilibrium equalities with absolute irreversibility, *New J. Phys.*, **17**, 075005.
- [39]. Ohzeki, M., 2010, Quantum annealing with Jarzynski equality, *Phys. Rev. Lett.*, **105**, 050401.
- [40]. Spilla, S., Hassler, F., Napoli, A. ve Splettstoesser, J., 2015, Quantum nonequilibrium equalities with absolute irreversibility, *New J. Phys.*, **17**, 065012.
- [41]. Horodecki, M., Oppenheim, J. ve Horodecki, R., 2002, Are the Laws of Entanglement Theory Thermodynamical?, *Phys. Rev. Lett.*, **89**, 240403.
- [42]. Brandão, F.G.S.L, Plenio, M.B., 2008, Entanglement Theory and the Second Law of Thermodynamics, *Nature Phys.*, **4**, 873.
- [43]. Lostaglio, M., Korzekwa, K., Jennings, D., Rudolph, T., 2015, Quantum Coherence, Time-Translation Symmetry, and Thermodynamics, *Phys. Rev. X*, **5**, 021001.
- [44]. Horodecki, M, Oppenheim, J., 2013, Fundamental limitations for quantum and nanoscale thermodynamics, *Nature Commun.*, **4**, 2059.
- [45]. Lostaglio, M., Jennings, D., Rudolph, T., 2015, Description of quantum coherence in thermodynamic processes requires constraints beyond free energy, *Nature Commun.*, **6**, 6383.
- [46]. Skrzypczyk, P., Short, A.J., Popescu, S., 2014, Work extraction and thermodynamics for individual quantum systems, *Nature Commun.*, **5**, 4185.
- [47]. Alicki, R., Fannes, M., 2013, Entanglement boost for extractable work from ensembles of quantum batteries, *Phys. Rev. E*, **87**, 042123.

- [48]. Huber, M., Perarnau-Llobet, M., Hovhannisyan, K.V., Skrzypczyk, P., Klöckl, C., Brunner, N., Acín, A., 2015, Work extraction and thermodynamics for individual quantum systems, *New J. Phys.*, **17**, 065008.
- [49]. Bruschi, D.E., Perarnau-Llobet, M., Friis, N., Hovhannisyan, K.V., Huber, M., 2015, Thermodynamics of creating correlations: Limitations and optimal protocols, *Phys. Rev. E*, **91**, 032118.
- [50]. Hovhannisyan, K.V., Perarnau-Llobet, M., Huber, M., Acin, A., 2013, Entanglement Generation is Not Necessary for Optimal Work Extraction, *Phys. Rev. Lett.*, **111**, 240401.
- [51]. Parrondo, J.M.R., Horowitz, J.M., Sagawa, T., 2015, Thermodynamics of information, *Nature Phys.*, **11**, 131.
- [52]. Goold, J., Huber, M., Riera, A., del Rio, L., Skrzypczyk, P., 2016, The role of quantum information in thermodynamics—a topical review, *J. Phys. A: Math. Theor.*, **49**, 143001.
- [53]. Toyabe, S., Sagawa, T., Ueda, M., Muneyuki, E., Sano, M., 2010, Experimental demonstration of information-to-energy conversion and validation of the generalized Jarzynski equality, *Nature Phys.*, **6**, 988.
- [54]. Roldan, E., Martinez, I.A., Parrondo, J.M.R., Petrov, D., 2014, Universal features in the energetics of symmetry breaking, *Nature Phys.*, **10**, 457.
- [55]. Koski, J.V., Maisi, V.F., Sagawa, T., Pekola, J.P., 2014, Experimental Observation of the Role of Mutual Information in the Nonequilibrium Dynamics of a Maxwell Demon, *Phys. Rev. Lett.*, **113**, 030601.
- [56]. Koski, J.V., Maisi, V.F., Pekola, J.P., Averin, D.V., 2014, Experimental realization of a Szilard engine with a single electron, *Proc. Natl Acad. Sci. USA*, **111**, 13786.
- [57]. Landauer, R., 1991, Information is Physical, *Phys. Today*, **44**, 23.
- [58]. Landauer, R., 1961, Irreversibility and Heat Generation in the Computing Process, *IBM J. Res. Dev.*, **5**, 183.
- [59]. Berut, A., Arakelyan, A., Petrosyan, A., Ciliberto, S., Dillenschneider, R., Lutz, E., 2011, Experimental verification of Landauer's principle linking information and thermodynamics, *Nature*, **483**, 187.
- [60]. Orlov, A.O., Lent, C.S., Thorpe, C.C., Boechler, G.P., Snider, G.L., 2012, Experimental Test of Landauer's Principle at the Sub-kBT Level, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **51**, 06FE10.
- [61]. Jun, Y., Gavrilov, M., Bechhoefer, J., 2014, High-Precision Test of Landauer's Principle in a Feedback Trap, *Phys. Rev. Lett.*, **113**, 190601.
- [62]. Snider, G.L., Blair, E.P., Thorpe, C.C., Appleton, B.T., Boechler, G.P., Orlov, A.O., Lent, C.S., 2012, There is no Landauer Limit: Experimental tests of the Landauer principle, *12th IEEE Conference on Nanotechnology (IEEE-NANO)*, **p1**.

- [63]. Jun, Y., Gavrilov, M., Bechhoefer, J., 1997, Quantum-mechanical Maxwell's demon, *Phys. Rev. A*, **56**, 3374.
- [64]. Zurek, W.H., 2003, Quantum discord and Maxwell's demons, *Phys. Rev. A*, **67**, 012320.
- [65]. Park, J.J., Kim, K-H., Sagawa, T., Kim, S.W., 2013, Heat Engine Driven by Purely Quantum Information, *Phys. Rev. Lett.*, **111**, 230402.
- [66]. Strasberg, P., Schaller, G., Brandes, T., Esposito, M., 2013, Thermodynamics of a Physical Model Implementing a Maxwell Demon, *Phys. Rev. Lett.*, **110**, 040601.
- [67]. Elouard, C., Richard, M., Auffèves, A., 2015, Reversible work extraction in a hybrid opto-mechanical system, *New J. Phys.*, **17**, 055018.
- [68]. Allahverdyan, A.E., Nieuwenhuizen, Th.M., 2000, Extraction of Work from a Single Thermal Bath in the Quantum Regime, *Phys. Rev. Lett.*, **85**, 1799.
- [69]. Allahverdyan, A.E., Nieuwenhuizen, Th.M., 2001, Breakdown of the Landauer bound for information erasure in the quantum regime, *Phys. Rev. E*, **64**, 056117.
- [70]. Hörhammer, C., Büttner, H., 2005, Thermodynamics of quantum Brownian motion with internal degrees of freedom: the role of entanglement in the strong-coupling quantum regime, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **38**, 7325.
- [71]. Hilt, S., Lutz, E., 2009, System-bath entanglement in quantum thermodynamics, *Phys. Rev. A*, **79**, 010101.
- [72]. Nieuwenhuizen, Th.M., Allahverdyan, A.E., 2002, Statistical thermodynamics of quantum Brownian motion: Construction of perpetuum mobile of the second kind, *Phys. Rev. E*, **66**, 036102.
- [73]. Hilt, S., Shabbir, S., Anders, J., Lutz, E., 2011, Landauer's principle in the quantum regime, *Phys. Rev. E*, **83**, 030102.
- [74]. Goold, J., Paternostro, M., Modi, K., 2015, Nonequilibrium Quantum Landauer Principle, *Phys. Rev. E*, **114**, 060602.
- [75]. Piechocinska, B., 2011, Information erasure, *Phys. Rev. A*, **61**, 062314.
- [76]. Silva, J.P. P., Sarthour, R.S., Souza, A.M., Oliveira, I.S., Goold, J., Modi, K., Soares-Pinto, D.O., Celeri, L.C., 2016, Experimental demonstration of information to energy conversion in a quantum system at the Landauer limit, *Proc. R. Soc. A*, **472**, 0813.
- [77]. del Rio, L., Aberg, J., Renner, R., Dahlsten, O., Vedral, V., 2011, The thermodynamic meaning of negative entropy, *Nature*, **476**, 476.
- [78]. Altintas, F., Hardal, A.U.C, Mustecaplioglu, O.E., 2014, Quantum correlated heat engine with spin squeezing, *Phys. Rev. E*, **90**, 032102.
- [79]. Quan, H.T., Liu, Y., Sun, C.P., Nori, F., 2007, Quantum thermodynamic cycles and quantum heat engines, *Phys. Rev. E*, **76**, 031105.

- [80]. Kosloff, R., 2013, Quantum Thermodynamics: A Dynamical Viewpoint, *Entropy*, **15** 2100-2128.
- [81]. Hänggi, P., Marchesoni, F., 2009, Artificial Brownian motors: Controlling transport on the nanoscale, *Rev. Mod. Phys.*, **81**, 387.
- [82]. Sánchez, R., Sothmann, B., Jordan, A.N., 2015, Heat diode and engine based on quantum Hall edge states, *New J. Phys.*, **17**, 075006.
- [83]. Kennes, D.M., Schuricht, D., Meden, V., 2013, Efficiency and power of a thermoelectric quantum dot device, *Europhys. Lett.*, **102**, 57003.
- [84]. Bergenfeldt, C., Samuelsson, P., Sothmann, B., Flindt, C., Büttiker, M., 2014, Hybrid Microwave-Cavity Heat Engine, *Phys. Rev. Lett.*, **112**, 076803.
- [85]. Sothmann, B., Sánchez, R., Jordan, A.N., 2015, Thermoelectric energy harvesting with quantum dots, *Nanotechnology*, **26**, 032001.
- [86]. van den Berg T.L., Brange, F., Samuelsson, P., 2015, Energy and temperature fluctuations in the single electron box, *New J. Phys.*, **17**, 075012.
- [87]. Sánchez, R., Sothmann, B., Jordan, A.N., Büttiker, M., 2013, Correlations of heat and charge currents in quantum-dot thermoelectric engines, *New J. Phys.*, **15**, 125001.
- [88]. Thierschmann, H. ve diğ., 2015, Three-terminal energy harvester with coupled quantum dots, *Nature Nano.*, **10**, 854.
- [89]. Brantut, J-P., Grenier, C., Meineke, J., Stadler, D., Krinner, S., Kollath, C., Esslinger, T., Georges, A., 2013, Three-terminal energy harvester with coupled quantum dots, *Science*, **342**, 713.
- [90]. Klemmt, S. ve diğ., 2015, Exciton-Polariton Gas as a Nonequilibrium Coolant, *Phys. Rev. Lett.*, **114**, 186403.
- [91]. Hossein-Nejad, H., O'Reilly, E.J., Olaya-Castro, A., 2015, Exciton-Polariton Gas as a Nonequilibrium Coolant, *New J. Phys.*, **17**, 075014.
- [92]. Åberg, J., 2014, Catalytic Coherence, *Phys. Rev. Lett.*, **113**, 150402.
- [93]. Ng, N.H.Y., Mancinska, L., Cirstoiu, C., Eisert, J., Wehner, S., 2015, Catalytic Coherence, *New J. Phys.*, **17**, 085004.
- [94]. Malabarba, A.S.L., Short, A.J., Kammerlander, P., 2015, Clock-driven quantum thermal engines, *New J. Phys.*, **17**, 045027.
- [95]. Brunelli, M., Xuereb, A., Ferraro, A., De Chiara, G., Kiesel, N., Paternostro, M., 2015, Out-of-equilibrium thermodynamics of quantum optomechanical systems, *New J. Phys.*, **17**, 035016.
- [96]. Uzdin, R., Kosloff, R., 2015, The multilevel four-stroke swap engine and its environment, *New J. Phys.*, **16**, 095003.

- [97]. Abah, O., Roßnagel, J., Jacob, G., Deffner, S., Schmidt-Kaler, F., Singer, K., Lutz, E., 2007, Single-Ion Heat Engine at Maximum Power, *Phys. Rev. Lett.*, **109** 203006.
- [98]. Alecce, A., Galve, F., Lo Gullo, N., DellAnna, L., Plastina, F., Zambrini, R., 2015, Quantum Otto cycle with inner friction: finite-time and disorder effects, *Phys. Rev. E*, **17** 075007.
- [99]. Campisi, M., Pekola, J., Fazio, R., 2015, Nonequilibrium fluctuations in quantum heat engines: theory, example, and possible solid state experiments, *New J. Phys.*, **17** 035012.
- [100]. Hübner, W., Lefkidis, G., Dong, C.D., Chaudhuri, D., Chotorlishvili, L., Berakdar, J., 2014, Spin-dependent Otto quantum heat engine based on a molecular substance, *Phys. Rev. B*, **90** 024401.
- [101]. Sothmann, B., Sánchez, R., Jordan, A.N., 2014, Quantum Nernst engines, *EPL*, **107** 47003.
- [102]. Wu, S.M., Pearson, J.E., Bhattacharya, A., 2015, Paramagnetic Spin Seebeck Effect, *Phys. Rev. Lett.*, **114** 186602.
- [103]. Gallego, R., Riera, A., Eisert, J., 2014, Thermal machines beyond the weak coupling regime, *New J. Phys.*, **16** 125009.
- [104]. Roßnagel, J., Abah, O., Schmidt-Kaler, F., Singer, K., Lutz, E., 2014, Nanoscale Heat Engine Beyond the Carnot Limit, *Phys. Rev. Lett.*, **112** 030602.
- [105]. Binder, F.C., Vinjanampathy, S., Modi, K., Goold, J., 2015, Quantacell: powerful charging of quantum batteries, *New J. Phys.*, **17**, 075015.
- [106]. Plastina, F., Alecce, A., Apollaro, T.J.G., Falcone, G., Francica, G., Galve, F., Lo Gullo, N., Zambrini, R., 2014, Irreversible Work and Inner Friction in Quantum Thermodynamic Processes, *Phys. Rev. Lett.*, **113**, 260601.
- [107]. del Campo, A., Goold, J., Paternostro, M., 2014, More bang for your buck: Super-adiabatic quantum engines, *Sci. Rep.*, **4**, 6208.
- [108]. Kosloff, R., Levy, A., 2014, Quantum Heat Engines and Refrigerators: Continuous Devices, *Ann. Rev. Phys. Chem.*, **65**, 365.
- [109]. Brunner, N., Huber, M., Linden, N., Popescu, S., Silva, R., 2014, Entanglement enhances cooling in microscopic quantum refrigerators, *Phys. Rev. E*, **89**, 032115.
- [110]. Szilard, L., 1929, über die entropieverminderung in einem thermodynamischen system bei eingriffen intelligenter wesen, *Z. Phys.*, **53**, 840–856.
- [111]. Kim, S. W., Sagawa, T., De Liberato, S., Ueda, M., 2011, Quantum Szilard engine, *Phys. Rev. Lett.*, **106**, 070401.
- [112]. Li, H., Zou, J., Li, J.-G., Shao, B., Wu, L.-A., 2012, Revisiting the quantum Szilard engine with fully quantum considerations, *Ann. Phys.*, **327**, 2955–2971.

- [113]. Cai, C. Y., Dong, H., Sun, C. P., 2012, Multiparticle quantum Szilard engine with optimal cycles assisted by a Maxwell's demon, *Phys. Rev. E*, **85**, 031114.
- [114]. Bengtsson, J. et al., 2018, Quantum Szilard engine with attractively interacting bosons, *Phys. Rev. Lett.*, **120**, 100601.
- [115]. Thomas, G., Das, D., Ghosh, S., 2018, Quantum heat engine based on level degeneracy, *Phys. Rev. E*, **100**, 012123.
- [116]. Aydinler, E., 2021, Quantum Szilard engine for the fractional power-law potentials, *Scientific Reports*, **11**, 1576.
- [117]. Masanes, L., Oppenheim, J., 2014, A general derivation and quantification of the third law of thermodynamics, *Nature Communications*, **8**, 14538.
- [118]. Cleuren, B., Rutten, B., Van den Broeck, C., 2012, Cooling by Heating: Refrigeration Powered by Photons, *Phys. Rev. Lett.*, **108**, 120603.
- [119]. Levy, A., Alicki, R., Kosloff, R., 2012, Cooling by Heating: Refrigeration Powered by Photons, *Phys. Rev. Lett.*, **109**, 248901.
- [120]. Levy, A., Alicki, R., Kosloff, R., 2012, Quantum refrigerators and the third law of thermodynamics, *Phys. Rev. Lett.*, **85**, 061126.
- [121]. Kolár, M., Gelbwaser-Klimovsky, D., Alicki, R., Kurizki, G., 2012, Quantum Bath Refrigeration towards Absolute Zero: Challenging the Unattainability Principle, *Phys. Rev. Lett.*, **109**, 090601.
- [122]. Esposito, M., Ochoa, M.A., Galperin, M., 2012, Quantum Thermodynamics: A Nonequilibrium Green's Function Approach, *Phys. Rev. Lett.*, **114**, 080602.
- [123]. Gasparinetti, S., Solinas, P., Braggio, A., Sasseti, M., 2014, Heat-exchange statistics in driven open quantum systems, *New J. Phys.*, **16**, 115001.
- [124]. Gaspard, P., 2015, Scattering approach to the thermodynamics of quantum transport, *New J. Phys.*, **17**, 045001.
- [125]. Kieu, T.D., 2004, The Second Law, Maxwell's Demon, and Work Derivable from Quantum Heat Engines, *Phys. Rev. Lett.*, **93**, 140403.
- [126]. Kieu, T.D., 2006, Quantum heat engines, the second law and Maxwell's daemon, *Eur. Phys. J. D*, **39**, 115.
- [127]. Scully, M.O., Zubairy, M.S., Agarwal, G.S., Walther, H., 2003, Extracting Work from a Single Heat Bath via Vanishing Quantum Coherence, *Science*, **299**, 862.
- [128]. He, J., Chen, J., Hua, B., 2002, Quantum refrigeration cycles using spin-1/2 systems as the working substance, *Phys. Rev. E*, **65**, 036145.
- [129]. Wu, F., Chen, L.G., Sun, F., Wu, C., Li, Q., 2006, Generalized model and optimum performance of an irreversible quantum Brayton engine with spin systems, *Phys. Rev. E*, **73**, 016103.

- [130]. Wu, F., Chen, L.G., Wu, S., Sun, F.R., Wu, C., 2006, Performance of an irreversible quantum Carnot engine with spin $1/2$, *Phys. Rev. E*, **124**, 214702.
- [131]. Feldmann, E., Kosloff, R., 2000, Performance of discrete heat engines and heat pumps in finite time, *Phys. Rev. E*, **61**, 4774.
- [132]. Feldmann, E., Kosloff, R., 2003, Quantum four-stroke heat engine: Thermodynamic observables in a model with intrinsic friction, *Phys. Rev. E*, **68** 016101.
- [133]. Feldmann, E., Kosloff, R., 2004, Characteristics of the limit cycle of a reciprocating quantum heat engine, *Phys. Rev. E*, **70** 046110.
- [134]. He, J., Xin, Y., He, X., 2007, Performance optimization of quantum Brayton refrigeration cycle working with spin systems, *Appl. Energy*, **84**, 176.
- [135]. Geva, E., Kosloff, R., 1992, A quantum-mechanical heat engine operating in finite time. A model consisting of spin- $1/2$ systems as the working fluid, *J. Chem. Phys.*, **96** 3054; **97** 4398; Rezek, Y., Kosloff, R., 2006, Irreversible performance of a quantum harmonic heat engine, *New J. Phys.*, **8** 83.
- [136]. Lin, B., Chen, J., 2003, Performance analysis of an irreversible quantum heat engine working with harmonic oscillators, *Phys. Rev. E*, **67**, 046105.
- [137]. Wang, J., He, J., Mao, Z., 2007, Performance of a quantum heat engine cycle working with harmonic oscillator systems, *Sci. Chin. Ser. G: Phys. Mech. Astro.*, **50**, 163.
- [138]. He, J., He, X., Tang, W., 2009, The performance characteristics of an irreversible quantum Otto harmonic refrigeration cycle, *Sci. Chin. Ser. G: Phys. Mech. Astro.*, **52**, 1317.
- [139]. Rezek, Y., Kosloff, R., 2006, Irreversible performance of a quantum harmonic heat engine, *New J. Phys.*, **8**, 83.
- [140]. Bender, C.M., Brody, D.C., Meister, B.K., 2000, Quantum mechanical Carnot engine, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **33**, 4427.
- [141]. Scully, M.O., 2001, Extracting Work from a Single Thermal Bath via Quantum Negentropy, *Phys. Rev. Lett.*, **87**, 220601.
- [142]. Quan, H.T., Zhang, P., Sun, C.P., 2006, Quantum-classical transition of photon-Carnot engine induced by quantum decoherence, *Phys. Rev. E*, **73**, 036122.
- [143]. Henrich, M.J., Mahler, G., Michel, M., 2007, Driven spin systems as quantum thermodynamic machines: Fundamental limits, *Phys. Rev. E*, **75**, 051118.
- [144]. Albayrak, E., 2013, The Entangled Quantum Heat Engine in the Various Heisenberg Models for a Two-Qubit System, *International Journal of Quantum Information*, **11**, 1350021.
- [145]. Xiani, H., Jizhou, H., Zheng, J., 2012, Thermal entangled quantum heat engine, *Physica A*, **391**, 6594.

- [146]. Bender, C.M., Brody, D.J., Meister, B.K., 2002, Entropy and temperature of a quantum Carnot engine, *Proc. R. Soc. Lond. A*, **458**, 1519.
- [147]. Rostovtsev, Y.V. ve diğ., 2003, Improving engine efficiency by extracting laser energy from hot exhaust gas, *Phys. Rev. A*, **67**, 053811.
- [148]. Opatrný, T., Scully, M.O., 2002, Enhancing Otto-mobile Efficiency via Addition of a Quantum Carnot Cycle, *Progress of Phys.*, **50**, 657.
- [149]. Lee, L., 2001, Carnot cycle for photon gas?, *Am. J. Phys.*, **69**, 874.
- [150]. Tonner, F., Mahler, G., 2005, Autonomous quantum thermodynamic machines, *Phys. Rev. E*, **72**, 066118.
- [151]. Feldmann, T., Geva, E., Kosloff, R., 1996, Heat engines in finite time governed by master equations, *Am. J. Phys.*, **64** 485.
- [152]. Quan, H.T., Zhang, P., Sun, C.P., 2005, Quantum heat engine with multilevel quantum systems, *Phys. Rev. E*, **72** 056110.
- [153]. Kitagawa, M., Ueda, M., 1993, Squeezed spin states, *Phys. Rev. A*, **47**, 5138.
- [154]. D. Gross, H.E., Microcanonical Thermodynamics, Phase Transitions in “Small” Systems (World Scientific, Singapore, 2001).
- [155]. Wootters, W.K., Entanglement of Formation of an Arbitrary State of Two Qubits, *Phys. Rev. Lett.*, **80**, 2245.
- [156]. Olliver, H., Zurek, W.H., Quantum Discord: A Measure of the Quantumness of Correlations, *Phys. Rev. Lett.*, **88**, 017901.
- [157]. Henderson, L., Vedral, V., Classical, quantum and total correlations, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **34**, 6899.
- [158]. Vidal, G., Werner, R.F., Computable measure of entanglement, *Phys. Rev. A*, **65**, 032314.
- [159]. Ji-Zhou, H., Xian, H., Jie, Z., Entangled quantum heat engine based on two-qubit Heisenberg XY model, *Chin. Phys. B*, **21**, 050303.
- [160]. Mukherjee, V., Niedenzu, W., Kofman, A.G., Kurizki, G., 2016, Speed and efficiency limits of multilevel incoherent heat engines, *Phys. Rev. E*, **94** 062109.
- [161]. Uzdin, R., Levy, A., Kosloff, R., 2015, Equivalence of Quantum Heat Machines, and Quantum-Thermodynamic Signatures, *Phys. Rev. X*, **5** 031044.
- [162]. Orszag, M., 1999, Quantum Optics, *Springer, Berlin*.
- [163]. Lindblad, G., 1976, On the generators of quantum dynamical semigroups, *Comm. in Math. Phys.*, **48** 119–130; Weiss, U., 1999, Quantum Dissipative Systems, *World Scientific, Singapore*.
- [164]. Ising, E., 1925, Contribution to the Theory of Ferromagnetism, *Z. Phys.*, **31** 253-258.

- [165]. Sachdev, S., 1999, Quantum Phase Transitions, *Cambridge University Press*.
- [166]. Bethe, H., 1931, Zur Theorie der Metalle, *Zeitschrift für Physik*, **71**, 205.
- [167]. Hulthén, L., 1938, *Arkiv. Mat. Astron. Fysik* 26A, 11, 1.
- [168]. Cloizeaux, J.d., Pearson, J.J., 1962, Spin-Wave Spectrum of the Antiferromagnetic Linear Chain, *Phys. Rev.*, **128** 2131.
- [169]. Yang, C.N., Yang, C.P., 1966, Ground-State Energy of a Heisenberg-Ising Lattice, *Phys. Rev.*, **147** 303.
- [170]. Baxter, R.J., 1972, One-dimensional anisotropic Heisenberg chain, *Ann. of Phys.*, **70** 323.
- [171]. Ruderman, M. A., Kittel, C., 1954, Indirect Exchange Coupling of Nuclear Magnetic Moments by Conduction Electrons, *Physical Rev.*, **96** 99.
- [172]. Cannella, V., Mydosh, J.A., 1972, Magnetic Ordering in Gold-Iron Alloys, *Phys. Rev. B*, **6** 4240.
- [173]. Toulouse, G., Vannimenus, J., Maillard, J.M., 1977, Spin glasses and roughening transition, *Journal de Physique Lettres*, **38** 459.
- [174]. Palmer, R.G., 1982, Broken ergodicity, *Advances in Physics*, **31** 669.
- [175]. Mattis, D.C., 1976, Solvable spin systems with random interactions, *Phys. Lett. A*, **56** 421.
- [176]. Venkataraman, G., Athithan, G., 1991, Spin glass, the travelling salesman problem, neural networks and all that, *Pramana*, **36** 1.
- [177]. Parisi, G., 1979, Infinite Number of Order Parameters for Spin-Glasses, *Phys. Rev. Lett.*, **43** 1754.
- [178]. Parisi, G., 1980, The order parameter for spin glasses: a function on the interval 0-1, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **13** 1101.
- [179]. Parisi, G., 1983, Order Parameter for Spin-Glasses, *Phys. Rev. Lett.*, **50** 1946.
- [180]. Pauling, L., 1935, The Structure and Entropy of Ice and of Other Crystals with Some Randomness of Atomic Arrangement, *J. Am. Chem. Soc.*, **57** (12), 2680.

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler	
Adı Soyadı	Seyit Deniz HAN
Doğum Yeri	
Doğum Tarihi	
Uyruğu	☒ T.C. ☐ Diğer:
Telefon	
E-Posta Adresi	
Web Adresi	http://



Eğitim Bilgileri	
Lisans	
Üniversite	İstanbul Üniversitesi
Fakülte	Fen Fakültesi
Bölümü	Fizik
Mezuniyet Yılı	2010

Yüksek Lisans	
Üniversite	İstanbul Üniversitesi
Enstitü Adı	Fen Bilimleri
Anabilim Dalı	Fizik Anabilim Dalı
Programı	Yüksek Enerji ve Plazma Fiziği Programı
Mezuniyet Tarihi	2013

Doktora	
Üniversite	İstanbul Üniversitesi
Enstitü Adı	Fen Bilimleri
Anabilim Dalı	Fizik Anabilim Dalı
Programı	Yüksek Enerji ve Plazma Fiziği Programı
Mezuniyet Tarihi	2021

Makale ve Bildiriler
Makaleler Aydiner, E., Han, S.D., 2018, Quantum heat engine model of mixed triangular spin system as a working, <i>Physica A</i>, 509 766-776. Han, S.D., Tüfekci, T., Spiller, T.P., Aydinler, E., 2017, Entanglement in (1/2,1) Mixed-Spin XY Model with Long-Range Interaction, <i>Int. J. Theor. Phys.</i>, 56 1474–1483. Han, S.D., Aydinler, E., 2015, Oscillating Casimir force of trapped Bose gas in

electromagnetic field, arXiv:1508.01040.

Han, S.D., Aydinler, E., 2014, Thermal entanglement in the mixed three-spin XXZ Heisenberg model on a triangular cell, *Chinese Phys. B*, **23** 050305.

Uzar, N., Han, S.D., Tüfekci, T., Aydinler, E., 2012, Solutions of the Gross-Pitaevskii and time-fractional Gross-Pitaevskii equations for different potentials with Homotopy Perturbation Method, arXiv:1203.3352.

Bildiriler

Han, S.D., Aydinler, E., 2017, Quantum Heat Engine with a Mixed Triangular Spin System, Fifth Quantum Thermodynamics Conference, Oxford, UK

Han, S.D., Aydinler, E., 2016, Quantum Heat Engine Behaviour of a Simple Spin-Glass System, Conference on New Trends in Quantum Heat and Thermoelectrics, ICTP, Italy

Deveci, D.G., Han, S.D., Aydinler, E., 2015, Information entropy of two-electron atomic models, 9. Balkan Fizik Derneği Uluslararası Öğrenci Konferansı, İstanbul, Türkiye

Han, S.D., Aydinler, E., 2015, Oscillating Casimir Force of Trapped Spinless Boson Particles in Electrical and Magnetic Fields, 9. Balkan Fizik Derneği Uluslararası Öğrenci Konferansı, İstanbul, Türkiye

Han, S.D., Aydinler, E., 2014, Casimir effect of trapped ideal bose gas with harmonic potential plus electrical and magnetic potentials, 31. Türk Fizik Derneği Uluslararası Fizik Kongresi, Bodrum-Türkiye.

Han, S.D., Aydinler, E., 2013, Thermal entanglement and quantum phase transition in the mixed three spin XXZ Model on a triangular cell, 30. Türk Fizik Derneği Uluslararası Fizik Kongresi, İstanbul-Türkiye.

Han, S.D., Tüfekci, T., Spiller, T.P., Aydinler, E., 2012, Entanglement in (1/2,1) mixed-spin XY model with Calogero-Moser-Sutherland interaction types, 29. Türk Fizik Derneği Uluslararası Fizik Kongresi, İstanbul-Türkiye.

Han, S.D., 2009, Wave-Particle Duality, Balkan Fizik Derneği Uluslararası Öğrenci Konferansı, Bodrum-Türkiye.