

T.C.
AKDENİZ ÜNİVERSİTESİ



**SPİN-1 BLUME-CAPEL VE KARMA SPİN $(\frac{1}{2}, 1)$ ISING MODELLERİNİN
TERMODİNAMİK GEOMETRİ ÇERÇEVESİNDE İNCELENMESİ**

Tuğçe AKKURT

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

FİZİK ANABİLİM DALI

YÜKSEK LİSANS TEZİ

HAZİRAN 2024

ANTALYA

T.C.
AKDENİZ ÜNİVERSİTESİ



**SPİN-1 BLUME-CAPEL VE KARMA SPİN $(\frac{1}{2}, 1)$ ISING MODELLERİNİN
TERMODİNAMİK GEOMETRİ ÇERÇEVESİNDE İNCELENMESİ**

Tuğçe AKKURT

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

FİZİK ANABİLİM DALI

YÜKSEK LİSANS TEZİ

HAZİRAN 2024

ANTALYA

T.C.
AKDENİZ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

SPİN-1 BLUME-CAPEL VE KARMA SPİN ($\frac{1}{2}, 1$) ISING MODELLERİNİN
TERMODİNAMİK GEOMETRİ ÇERÇEVESİNDE İNCELENMESİ

Tuğçe AKKURT

FİZİK ANABİLİM DALI

YÜKSEK LİSANS TEZİ

HAZİRAN 2024

T.C.
AKDENİZ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

SPİN-1 BLUME-CAPEL VE KARMA SPİN ($\frac{1}{2}, 1$) ISING MODELLERİNİN
TERMODİNAMİK GEOMETRİ ÇERÇEVESİNDE İNCELENMESİ

Tuğçe AKKURT

FİZİK ANABİLİM DALI

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Bu tez/...../20... tarihinde jüri tarafından Oybirliği ile kabul edilmiştir.

Prof. Dr. Rıza ERDEM (Danışman)

Prof. Dr. Cesur EKİZ

Doç. Dr. Yusuf KÜÇÜKAKÇA

ÖZET

SPİN-1 BLUME-CAPEL VE KARMA SPİN $(\frac{1}{2}, 1)$ ISING MODELLERİNİN TERMODİNAMİK GEOMETRİ ÇERÇEVESİNDE İNCELENMESİ

Tuğçe AKKURT

Yüksek Lisans Tezi, Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Rıza ERDEM

Haziran 2024, 62 sayfa

Spin-1 Blume-Capel ve karma spin $(\frac{1}{2}, 1)$ Ising modelleri Ruppeiner formalizmindeki termodinamik geometri kullanılarak incelendi. Her iki modelin düzen parametresi uzayları için termal metrik tensörler türetildi ve karşılık gelen termodinamik eğrilikler veya Ricci skalerleri (R) hesaplandı. Bunlar, birinci- ve ikinci-dereceden faz geçişleri de dahil olmak üzere çeşitli parametre aralıkları için incelendi. İkinci-dereceden faz geçişine ve üçlü kritik noktaya yaklaşırken R sonsuza ($R \rightarrow +\infty$) doğru eğilim göstermektedir. Ricci skalerinde manyetik ve kristal alana bağımlı geniş ekstremumların yanı sıra birinci-dereceden faz geçişleriyle bağlantılı işaret değişikliklerine sahip sonlu sıçramalar da bulundu. Son olarak, kritik topolojiyi içeren geometrik faz diyagramları sunuldu.

ANAHTAR KELİMELER: Blume-Capel modeli, Geometrik faz diyagramı, Karma spin Ising modeli, Ricci skaleri, Ruppeiner metriği, Termodinamik geometri.

JÜRİ: Prof. Dr. Rıza ERDEM

Prof. Dr. Cesur EKİZ

Doç. Dr. Yusuf KÜÇÜKAKÇA

ABSTRACT

INVESTIGATION OF SPIN-1 BLUME-CAPEL AND MIXED SPIN $(\frac{1}{2}, 1)$ ISING MODELS IN THE FRAMEWORK OF THERMODYNAMIC GEOMETRY

Tuğçe AKKURT

MSc. Thesis in PHYSICS

Supervisor: Prof. Dr. Rıza ERDEM

June 2024, 62 pages

Spin-1 Blume-Capel and mixed spin $(\frac{1}{2}, 1)$ Ising models are studied making use of thermodynamic geometry in the Ruppeiner formalism. Thermal metric tensors are derived and corresponding thermodynamic curvatures or Ricci scalars (R) are computed for the order parameter spaces of both models. These are investigated for various parameter regimes, including the first- and second-order phase transitions. R tends towards plus infinity ($R \rightarrow +\infty$) while approaching the second-order phase transition and tricritical point. Finite jumps with sign changes connected with first-order phase transitions as well as magnetic and crystal field dependent broad extrema in the Ricci scalar are also found. Finally, geometric phase diagrams including critical topology are presented.

KEYWORDS: Blume-Capel model, Geometric phase diagram, Mixed spin Ising model, Ricci scalar, Ruppeiner metric, Thermodynamic geometry.

COMMITTEE: Prof. Dr. Rıza ERDEM

Prof. Dr. Cesur EKİZ

Assoc. Prof. Dr. Yusuf KÜÇÜKAKÇA

ÖNSÖZ

Yüksek lisans eğitimim boyunca yapabileceğime inanıp yol göstermesi, motive etmesiyle, gece gündüz demeden zamanını ayırıp çalışmalarımın ilerlemesinde büyük yardımlarını gördüğüm ve öğrencisi olmaktan gurur duyduğum değerli hocam Prof. Dr. Rıza Erdem'e sonsuz teşekkür ederim.

Akademik hayatımın şekillenmesinde bana ışık tutan saygıdeğer hocam Prof. Dr. Yusuf Sucu'ya çok teşekkür ederim. Dertlerimi paylaşıp çözümler bulmaya çalışan ve karşılaştığım sorunlarda her zaman yanımda olan değerli arkadaşım Taner Tarık Aytaş'a bir teşekkürü borç bilirim.

Doğduğum andan beri sevgi ve saygı içinde büyüttükleri, aldığım her kararda bana olan güvenleri ile arkamda durup beni destekledikleri ve her anlamda verdikleri emekleri için canım aileme sonsuz teşekkür ediyorum.

Bu tez çalışmasına yaptığı katkılarından dolayı Türkiye Bilimsel ve Teknik Araştırma Kurumu'na (TÜBİTAK) (Program No: 2210-A) teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

ÖZET	i
ABSTRACT	ii
ÖNSÖZ	iii
AKADEMİK BEYAN	v
SİMGELER VE KISALTMALAR	vi
ŞEKİLLER DİZİNİ	viii
ÇİZELGELER DİZİNİ	xi
1. GİRİŞ	1
2. KAYNAK TARAMASI	4
3. MATERYAL VE METOT	7
3.1. Spin-1 Blume-Capel Modeli	7
3.2. Karma Spin ($\frac{1}{2}$, 1) Ising Modeli	13
3.3. Termodinamik Geometri	20
4. BULGULAR VE TARTIŞMA	33
4.1. Spin-1 Blume-Capel Modelinin Termodinamik Geometri Özellikleri	33
4.2. Karma Spin ($\frac{1}{2}$, 1) Ising Modelinin Termodinamik Geometri Özellikleri	41
5. SONUÇLAR	54
6. KAYNAKLAR	55
ÖZGEÇMİŞ	

AKADEMİK BEYAN

Yüksek Lisans Tezi olarak sunduğum “Spin-1 Blume-Capel ve Karma Spin ($\frac{1}{2}$, 1) Ising Modellerinin Termodinamik Geometri Çerçevesinde İncelenmesi” adlı bu çalışmanın, akademik kurallar ve etik değerlere uygun olarak bulunduğunu belirtir, bu tez çalışmasında bana ait olmayan tüm bilgilerin kaynağını gösterdiğimi beyan ederim.

07/06/2024

Tuğçe AKKURT



SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler:

$\mathcal{H}$	: Hamiltonyen
N	: Örgü noktası sayısı veya spin sayısı
S	: Spin
μ_i	: A alt örgüsü için spin değişkeni
S_i	: B alt örgüsü için spin değişkeni
J	: Bilineer etkileşme sabiti
D	: Kristal alan sabiti (tek-iyon anizotropi parametresi)
G	: Gibbs enerji fonksiyoneli
E	: İç enerji
T	: Mutlak sıcaklık
S	: Entropi
H	: Dış manyetik alan
σ	: A alt örgüsü için dipolar düzen parametresi
m	: B alt örgüsü için dipolar düzen parametresi
q	: Kuadрупolar düzen parametresi
d	: Blume-Capel modeli için indirgenmiş kristal alan
α	: Karma spin modeli için indirgenmiş kristal alan
h	: İndirgenmiş manyetik alan
θ	: İndirgenmiş sıcaklık
k_B	: Boltzmann sabiti
g_{ij}	: Kovaryant metrik tensör bileşenleri
g^{ij}	: Kontravaryant metrik tensör bileşenleri
Γ_{jk}^i	: Christoffel sembolleri
R_{jkl}^i	: Riemann eğrilik tensörü
R_{ij}	: Ricci tensörü
R	: Ricci skaleri veya termodinamik eğrilik
$\mathcal{D}$	: Boyut

Kısaltmalar:

BC	: Blume-Capel
BEG	: Blume-Emery-Griffiths
EFT	: Etkin Alan Teorisi
FM	: Ferromanyetik
GFD	: Geometrik Faz Diyagramı
MC	: Monte Carlo
MFA	: Ortalama Alan Yaklaşımı
PM	: Paramanyetik
RG	: Renormalizasyon Grup
TCP	: Üçlü Kritik Nokta
TG	: Termodinamik Geometri

ŞEKİLLER DİZİNİ

- Şekil 3.1** BC modeli için manyetik alan varlığında ($h \neq 0$) ve yokluğunda ($h = 0$) farklı d değerleri kullanılarak elde edilen m ve q 'nun indirgenmiş sıcaklık θ 'ya göre değişimi. Düşey noktalı çizgiler faz geçiş sıcaklıklarını ve yatay noktalı çizgiler ise $q = 2/3$ değerini gösterir. $0 \leq d < 0.50$ 9
- Şekil 3.2** BC modeli için manyetik alan yokluğunda ($h = 0$) farklı d değerleri kullanılarak elde edilen m ve q 'nun θ 'ya göre değişimi. Yatay noktalı çizgi ise $q = 2/3$ değerini gösterir. $0.50 \leq d \leq 1$ 10
- Şekil 3.3** BC modelinde, $h = 0$ için m ve q 'nun farklı sıcaklıklarda d 'ye göre değişimi. Düşey noktalı çizgiler faz geçişlerinin meydana geldiği d değerlerini gösterir. (a) $\theta = 0.293$, (b) $\theta_C = 0.451$ 10
- Şekil 3.4** BC sisteminin (d, θ) düzlemindeki faz diyagramı. Noktalı ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçişine karşılık gelmektedir. Mavi nokta üçlü kritik nokta TCP'yi göstermektedir 11
- Şekil 3.5** BC modeli için $d = 0.40$ değerinde farklı θ değerleri kullanılarak elde edilen m ve q 'nun manyetik alan h 'ye göre değişimi. Düşey noktalı çizgiler $h = 0$ durumunu gösterir 12
- Şekil 3.6** Karma spin sistemi için $h \neq 0$ ve $h = 0$ durumlarında farklı α değerleri kullanılarak elde edilen düzen parametrelerinin θ 'ya göre değişimi. Düşey noktalı çizgiler ikinci-derece faz geçiş sıcaklığını veya TCP'yi, yatay noktalı çizgiler ise $q = 2/3$ değerini gösterir. $0 \leq \alpha \leq 1.85$ 15
- Şekil 3.7** Karma spin modeli için $h = 0$ durumunda farklı α değerleri kullanılarak elde edilen σ , m ve q 'nun θ 'ya göre değişimi. Düşey noktalı çizgiler birinci-derece faz geçiş sıcaklığını ve yatay noktalı çizgiler ise $q = 2/3$ değerini gösterir. $\alpha > 1.85$ 16
- Şekil 3.8** Karma spin modeli için dış manyetik alan varlığında ($h = 0.02$) farklı α değerleri kullanılarak elde edilen σ , m ve q 'nun θ 'ya göre değişimi. Yatay noktalı çizgiler $q = 2/3$ değerini gösterir. $1.3 < \alpha < 2.28$ 17

- Şekil 3.9** Karma spin modelinde, $h = 0$ için σ , m ve q 'nun farklı sıcaklıklarda α 'ya göre değişimi. Düşey noktalı çizgiler faz geçişlerinin meydana geldiği α değerlerini gösterir. **(a)** $\theta = 0.65$, **(b)** $\theta_{TCP} = 0.92$ ve **(c)** $\theta = 1.3$ 19
- Şekil 3.10** Karma spin sisteminin (α, θ) düzlemindeki faz diyagramı. Noktalı ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçişine karşılık gelmektedir. Mavi nokta üçlü kritik nokta TCP'yi göstermektedir 20
- Şekil 4.1** BC modelinde, **(a)-(c)** farklı d değerleri için Ricci skaleri R 'nin indirgenmiş sıcaklık θ 'ya göre değişimi. Düşey renkli ve noktalı çizgiler faz dönüşüm sıcaklıklarını gösterir. **(d)** Sistemin (d, θ) düzlemindeki geometrik faz diyagramı: Mavi sürekli eğri ikinci-derece faz geçiş eğrisini, mavi noktalı eğri birinci-derece faz geçiş eğrisini, kırmızı eğri $R = 0$ eğrisini, yeşil sürekli ve yeşil kesikli eğriler sırasıyla R_P ve R_M 'nin yerleşimlerini göstermektedir. $h = 0$. . . 36
- Şekil 4.2** BC modelinde, **(a)** $h = 0$ için farklı θ değerlerinde, **(b)** $\theta = 0.5$ için farklı h değerlerinde R 'nin d 'ye göre değişimi. Düşey renkli ve noktalı çizgiler faz geçiş noktalarına, yatay noktalı çizgiler $R = 0$ durumuna karşılık gelir 38
- Şekil 4.3** BC modelinde, **(a)** $d = 0.40$ için $h = 0$ ve bazı h değerleri seçilerek ve **(b)** $h = 0.05$ için farklı d değerleri seçilerek elde edilen $R - \theta$ eğrileri, **(c)** $d = 0.40$ için farklı θ değerleri seçilerek elde edilen $R - h$ eğrileri, **(d)** $h = 0.01$ durumunda $R = 0$, R_P ve R_M eğrilerinin (d, θ) düzlemindeki yerleşimleri. Kırmızı sürekli eğri $R = 0$ eğrisini, yeşil sürekli ve yeşil kesikli eğriler sırasıyla R_P ve R_M 'nin yerleşimini göstermektedir 39
- Şekil 4.4** BC modelinde, $R = 0$, R_P ve R_M eğrilerinin (h, θ) düzlemindeki yerleşimleri. Kırmızı eğriler $R = 0$ eğrilerini, yeşil sürekli ve yeşil kesikli eğriler sırasıyla R_P ve R_M 'nin yerleşimlerini göstermektedir. $d = 0.40$ 40

- Şekil 4.5** Karma spin modelinde, **(a)-(d)** $h = 0$ için farklı α değerlerinde, **(e)** $\alpha = 1.0$ için $h = 0$ ve farklı manyetik alan değerlerinde, **(f)** $h = 0.03$ için farklı α değerlerinde elde edilen R 'nin θ 'ya göre değişimi. Düşey renkli ve noktalı çizgiler faz geçiş sıcaklıklarına ve yatay noktalı çizgiler $R = 0$ 'a karşılık gelir 48
- Şekil 4.6** Karma spin modelinde, bazı θ değerleri için **(a)** $h = 0$ ve **(b)** $h = 0.01$ durumlarında R 'nin α 'ya göre değişimi; **(c), (d)** $\alpha = 2.0$ için farklı θ değerlerinde R 'nin h 'ye göre değişimi. Düşey renkli ve noktalı çizgiler faz geçiş noktalarına ve yatay noktalı çizgiler $R = 0$ 'a karşılık gelir 51
- Şekil 4.7** Karma spin modelinde, **(a)** $h = 0$ için (α, θ) düzleminde geometrik faz diyagramı, **(b)** $h = 0.02$ için (α, θ) düzleminde $R = 0$, R_P ve R_M eğrilerinin yerleşimleri. Mavi noktalı ve mavi sürekli eğriler sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçişlerine karşılık gelir. Kırmızı sürekli eğriler $R = 0$, yeşil kesikli eğriler R_M ve yeşil sürekli eğriler R_P 'nin maksimum olduğu durumu gösterir. **(c)** bazı α değerleri için (h, θ) düzleminde $R = 0$ ve R_P eğrilerinin yerleşimleri 52

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 4.1	Karma spin $(\frac{1}{2}, 1)$ Ising sisteminde, 8 farklı koordinat için termodinamik potansiyel tanımı	41
Çizelge 4.2	Karma spin $(\frac{1}{2}, 1)$ Ising sisteminde, 8 farklı koordinat için metrik yazılması	42
Çizelge 4.3	Karma spin $(\frac{1}{2}, 1)$ Ising sisteminde, metrik bileşenleri ve termodinamik eğrilikler. Türevler denge durumlarında alınır	42



1. GİRİŞ

Fiziksel kooperatif olayların anlaşılabilmesi için tek veya karma spin sistemlerinin termodinamiği ve bunların manyetik özelliklerinin incelenmesi oldukça önemlidir. Bu amaca yönelik olarak, fizikte birçok teori ve model geliştirilmiştir. Manyetizma için vazgeçilmez bir araç olan Ising modeli, bunların başında gelir. Bu fiziksel model ilk yıllarında, bilim insanlarından bazıları tarafından temel teorilerle çeliştiği düşünülerek kabul görmezken, büyük çoğunluğu tarafından gerçekçi bulundu. Ising modeline yönelik bu tutumlar, modelin gelişimine önemli bir fırsat sundu. Dolayısıyla Ising modeli, kuantum mekaniğinin doğuşuyla birlikte daha sağlam teorik temeller üzerine kuruldu ve temsil ettiği fiziksel olayları açıklama açısından büyük değişimler geçirdi. Önceden Lenz-Ising modeli şeklinde adlandırılan bu spin modeli, ferromanyetik malzemelerde faz geçişini açıklayabilmek için Ising'e doktora tezi konusu olarak verilmesine dayanır. Böylece, Ising bu problemi bir-boyutta spini $S = 1/2$ olan manyetik momentlerden oluşan bir zincir üzerinde ele alarak kesin çözümünü yaptı (Ising 1925). Çözüm sonucuna göre, Ising sadece sıfır sıcaklıkta faz dönüşümünün ortaya çıktığını gördü fakat sonlu sıcaklıkta faz geçişinin meydana gelmeyeceğini düşünerek yüksek boyutlu örgüler için hatalı bir varsayımda bulundu. Bu hatalı varsayım, modelin iki-boyutlu kare örgü üzerinde tek düzen parametrelili spin- $\frac{1}{2}$ Ising modelinin tam çözümü Onsager tarafından yapılabildiye kadar yaklaşık yirmi yıl boyunca araştırılmasını kısıtladı. Böylece, spinler arası etkileşimin kısa menzilli karakterine rağmen sıfır manyetik alanda faz geçiş sıcaklığının elde edilmesinin ardından durum olumlu yönde değişmiş oldu (Onsager 1944). Daha sonra ilginin giderek artmasıyla Domb (1960) tarafından bal peteği ve üçgen örgüler üzerinde de çözümleri yapılarak model önemli derecede zenginleşti. İlerleyen yıllarda Ising modeli, yeni çeşitlerinin ortaya çıkması ve bunların fizikte pek çok olayla örtüşen yanlarının olması ile günümüzde halen çalışılan aktif bir saha haline gelmiştir.

Bilindiği gibi Ising modeli, spin değerinin artmasıyla ($S > 1/2$) Hamiltonyeninde bulunan etkileşme parametrelerine ve içerdiği düzen parametresi sayısına göre farklı isimler alır. Örneğin bilineer (J) ve bikuadratik (K) etkileşim parametrelerini içeren spin modeli kristal alan (D) varlığında iki düzen parametrelili Blume-Emery-Griffiths (BEG) modeli olarak adlandırılır (Blume vd 1971). $K = 0$ durumunda BEG modeli,

Blume-Capel (BC) modeline dönüşür (Blume 1966; Capel 1966). Günümüzde, tek spin değerine sahip spin- $\frac{1}{2}$ Ising, BEG ve BC modellerinden farklı olarak değişik spin değerleri içeren karma spinli ve ikiden fazla düzen parametrelili Ising modelleri de istatistik fiziğin yoğun çalışılan konuları arasında bulunmaktadır. Karma spinli sistemler, A ve B gibi iç içe geçmiş iki alt örgü üzerinde tanımlanırlar ve eş olmayan spin değerlerine ($S_A \neq S_B$) sahiptirler. Fazla üzerinde durulmasının nedenleri arasında, tek örgülü spin sistemlerine göre daha az öteleme simetrisine sahip olmaları ve bunlarda görülmeyen birçok yeni fiziksel olayların gözlenmesidir. Örneğin, ferrimanyetik yapıya sahip bileşiklerde kompanzasyon (telafi) sıcaklıklarının varlığı gibi karmaşık olayların incelenmesi için çok durumlu ve fazla sayıda düzen parametresi içeren bir karma spin modeline gereksinim duyulur. İkinci neden olarak, karma spinli sistemlerin moleküler tabanlı manyetik malzemeleri çalışmak için faydalı özellikler sunması gösterilebilir (Kaneyoshi ve Nakamura 1998).

Diğer taraftan, fiziksel sistemler için termodinamik parametre uzayı tanımlama ve Ricci skaleri (R) hesabının maddenin faz yapısına etkili bir geometrik bakış açısı getirdiği bilinmektedir (Ruppeiner 1995; Kaviani ve Dalafi-Rezaie 1999; Mirza ve Mohammadzadeh 2008; Ruppeiner vd 2012; May vd 2013; de Leon ve Vega 2022). Termodinamik eğrilik ya da eğrilik skaleri adı da verilen bu matematiksel nicelik, denge istatistik teori ve termodinamik geometrinin birleştirilmesiyle ortaya çıkan bir yöntemle bulunabilmektedir. Bu yol ile yakın zamanda, tek spin modellerinden ferromanyetik ve antiferromanyetik spin- $\frac{1}{2}$ Ising modelleri için sırasıyla iki-boyutlu ($2D$) ve üç-boyutlu ($3D$) düzen parametresi uzayları seçilerek metrikler türetildi ve bu metriklerle elde edilen termodinamik eğriliklerin sırasıyla Curie ve Néel sıcaklıkları yakınlarındaki davranışları araştırıldı (Erdem 2018a,b, 2019). Daha sonra, aynı işlemler spin-1 BEG modeline genişletilerek, $2D$ düzen parametresi uzayında türetilen R niceliğinin kritik, üçlü kritik ve çoklu kritik nokta yakınlarındaki davranışları nümerik olarak incelendi (Erdem ve Alata 2020; Alata 2022; Alata vd 2023).

Yukarıdaki referanslar ışığında hazırlanan tezde, daha önce sadece spin zincirleri olarak R -diyagramları elde edilen (Uğurlu 2019) $S = 1$ BC modeli ve daha karmaşık bir yapıya sahip olan karma spin $(\frac{1}{2}, 1)$ Ising sistemi Ruppeiner formalizmine dayalı termodinamik geometri (TG) kullanılarak kapsamlı olarak incelendi. Önce, BC modeli için $2D$ düzen parametresi uzayı ve daha sonra karma spin sistemi için $3D$ düzen parametresi

uzayı seçilerek Gibbs serbest enerji fonksiyonelleri vasıtasıyla metrik tensörler belirlendi. Tensör bileşenleri ve bunların türevleri yardımıyla da sırasıyla Christoffel Sembolleri, Riemann Eğrilik Tensörü, Ricci Tensörü ve Ricci skaleri ayrı ayrı türetildi. R 'nin indirgenmiş sıcaklığa, indirgenmiş kristal alana ve indirgenmiş manyetik alana göre değişimleri özellikle çok düşük sıcaklıklardaki ve faz dönüşüm noktaları yakınlarındaki davranışları incelendi. Ortaya çıkan şekillerden, R 'nin düzenli ve düzensiz fazlardaki işareti, varsa yapmış olduğu maksimum ve minimum noktaları tespit edildi. Tüm sonuçlar, geometrik faz diyagramlarında toplanarak ayrıntılı analizi yapıldı. Ele alınan her iki spin sisteminin sonuçlarının birbirleriyle benzerliği ve diğer spin sistemleri ile uyumlu olup olmadığı araştırıldı.

Bu giriş bilgilerinden sonra 2. bölümde, kaynak taraması yapılarak tezde kullanılan iki spin sistemi ve termodinamik geometri ile ilgili günümüze kadar yapılmış olan önemli çalışmalar hakkında literatür bilgisi verildi. 3. Bölümde, $S = 1$ BC ve karma spin $(\frac{1}{2}, 1)$ Ising modelleri ve bunların denge özellikleri ile termodinamik geometri hakkında genel bilgi sunuldu. 4. Bölümde tezde elde edilen bulgular detaylandırılarak analiz edildi. Son bölümde tezde yapılanlar ve ortaya çıkarılan sonuçlar kısaca özetlenerek gelecekte konu ile ilgili yapılabilecek çalışmalar hakkındaki görüşler sıralandı.

2. KAYNAK TARAMASI

Birçok fiziksel sistemde ortaya çıkan faz geçişlerinin incelenebilmesi için, en az üç durumlu ve iki düzen parametrelili bir spin modeline ihtiyaç duyulur. Bu modellerden birisi ve en basit olanı kuadropolar etkileşme olmadığı durumda tanımlanan spin-1 BC modelidir. İlk olarak Blume (1966) ve Capel (1966) tarafından birbirinden bağımsız olarak ileri sürülmüştür. Spin-1 BC modeli, bu ana kadar istatistik mekanikte geliştirilen birçok farklı yaklaşım ve simülasyon metotları ile incelendi. En çok kullanılan tekniklerden ortalama alan yaklaşımı (MFA) (Capel 1967; Kaufman ve Kanner 1990; Plascak vd 1993; Ekiz vd 2001), Bethe-Peierls yaklaşımı (Du vd 2003), etkin alan teorisi (EFT) (Siqueira ve Fittipaldi 1986a; Costabile vd 2014), renormalizasyon grubu (RG) (De Alcantara Bonfim 1985; Branco ve Boechat 1997), Monte-Carlo (MC) simülasyonu (Kimel vd 1987; Deserno 1997; Lara ve Plascak 1998; Silva vd 2006; Zierenberg vd 2017) ve seri açılımları (Saul vd 1974) modelin denge özelliklerini açıkça ortaya koymuştur. Bu özelliklerden bazıları, üçlü kritik noktanın varlığı, birinci-derece faz geçişleri, yeniden girilme olayları, yarı kararlı ve kararsız durumların meydana gelmesi şeklinde sıralanabilir. Ayrıca, BC modeli yüzey merkezli kübik örgü (Jain ve Landau 1980), basit kübik örgü (Wang ve Kimel 1991), kare örgü (Yüksel vd 2009), Bethe örgüsü (Albayrak 2011), üçgen örgü (Theodorakis ve Fytas 2012; Žukovič ve Bobák 2013), elmas örgü (Santos vd 2017) ve Cayley ağacı (Ekiz ve Önderişik 2021) gibi çeşitli örgü türleri üzerinde de çalışıldı. Tek spin sistemlerine paralel olarak ortaya çıkan ve gelişen iki alt örgüye sahip karma spin $(\frac{1}{2}, 1)$ Ising modeli de kritik olaylar açısından BC modeliyle benzer özelliklere sahiptir. Özellikle, MFA (Plascak 1993; Ekiz ve Keskin 2003; Kasama vd 2006; Bahmad vd 2008), EFT (Siqueira ve Fittipaldi 1986b; Kaneyoshi 1987; Bobák ve Jurčisin 1997; Ertaş ve Keskin 2015), RG (Boechat vd 2000; Akimenko vd 2021), MC (Zhang ve Yang 1993; Oitmaa 2005; Selke ve Oitmaa 2010; Gharaibeh vd 2022) ve seri açılımları (Schofield ve Bowers 1981; Oitmaa ve Enting 2006) ile yapılan çalışmalarda BC modelinde görülen üçlü kritik nokta yanında yeniden girilme davranışı bulundu. Bunların dışında, tek spin sistemlerinde görülmeyen ancak karma spin sistemlerinde ortaya çıkan kompanzasyon sıcaklığının varlığı farklı metotlar ile doğrulandı (Kaneyoshi ve Chen 1991; Godoy vd 2004). İlave olarak, aynı model çeşitli örgü türleri üzerinde de çözümlendi. Bunlardan bal

peteği örgüsü (Benyoussef vd 1994a; Xin vd 1998), kare örgü (Benayad vd 1989; Benyoussef vd 1994b), lineer zincir yaklaşımı (Strečka vd 2004), Cayley ağacı (Ekiz 2005), dekore edilmiş örgü (Strečka vd 2009) ve Bethe örgüsü (da Silva ve Salinas 1991; Ekiz vd 2009; Strečka ve Ekiz 2012) üzerinde yapılan çözümler faz geçişleri ile ilgili çeşitli özgün fiziksel sonuçlar içermektedir.

Diğer taraftan, Öklid-dışı geometrilere biri olan Riemann geometrisine dayanarak geliştirilen termodinamik geometri, günümüzde faz geçişleri ve kritik olaylara geometrik bir bakış açısı kazandırmaktadır. Termodinamikte geometrik yaklaşımın dikkate alınmasıyla metrik bir yapının tanımlanması, önce Weinhold (1975) tarafından başlatıldı ve sonra Ruppeiner (1979, 1995) tarafından ısısal dalgalanma teorisiyle ilişkilendirilerek genişletildi. Böylece, bir termodinamik sistemin Riemann uzayının manifoldları ile tanımlanabileceği ve bu manifoldların eğriliğinin (R), termodinamik potansiyellerin türevleri yardımıyla hesaplanabileceği gösterildi. Bu alandaki ilk eğrilik hesapları, klasik ideal ve ideal paramanyetik gazlar için yapıldı (Mijatović vd 1987; Ruppeiner ve Davis 1990). Daha sonra, faz geçişleri ve kritik olayların meydana geldiği termodinamik sistemler TG yardımıyla incelenmeye başlandı. Bu bağlamda, gerçek gazlar ve bazı basit manyetik sistemler için R hesabı yapılarak kritik nokta yakınlarında R 'nin $+\infty$ 'a doğru bir eğilim gösterdiği gözlemlendi (Janyszek 1990). Aynı ıraksama özelliği iki bileşenli bir sıvı karışımı için de gösterildi (Ginoza 1993). Yapılan tüm bu çalışmalar ışığında, R eğriliği fiziksel olarak parçacıklar arasındaki etkileşimin bir ölçüsü olarak tanımlandı ve ayrıca, işaretinin de moleküllerarası etkileşimlerin çekici ($R < 0$) veya itici ($R > 0$) olduğunu belirlemede önemli olduğu vurgulandı (Ruppeiner 2012). Sonra, bir Lennard-Jones sistemi için hesaplanan termodinamik eğrilik ifadesi kullanılarak $R > 0$ ve $R < 0$ arasındaki geçişler faz diyagramlarında açıkça gösterildi (May vd 2013). Dolayısıyla, termodinamik faz diyagramlarını $R > 0$ ve $R < 0$ bölgeleri olarak $R = 0$ çizgisi (yani sıfır eğrilik çizgisi) ile ayırmak mümkün hale geldi. Böylece ortaya çıkan yeni faz diyagramına "Geometrik Faz Diyagramı" ismi verildi (Brody ve Hook 2008).

Son yıllarda yukarıda değinilen çalışmalar haricinde, spin modellerinin TG ile incelenmesinde sürekli bir artış oldu. 1989 yılında bu konuyla ilgili yapılan ilk çalışmada, kısa menzilli $1D$ Ising modeli ve uzun menzil etkileşimli ortalama alan spin- $\frac{1}{2}$ Ising modeli ele alındı (Janyszek ve Mrugała 1989). Her iki model için birer skaler eğrilik türe-

tilerek bunların kritik nokta civarında $+\infty$ 'a doğru bir ıraksama davranışı gösterdikleri doğrulandı. Ayrıca, aynı çalışmada böyle bir analizin istatistiksel mekaniğe matematiksel olarak bir bakış açısı kazandırdığı vurgulandı ve R 'nin birçok model için de uygulanabileceği yorumu yapıldı. Bu yorum ile, verilen kısa bir aradan sonra manyetik modellerde eğrilik skalerinin incelenmesine 2000'li yıllarda tekrar başlandı. Aynı konudaki çalışmalar hızlanarak devam etti (Brody ve Ritz 2003; Mirza ve Talaei 2013; Dey vd 2013). 2018 yılında, ferromanyetik ve antiferromanyetik Ising modelleri için Bethe tipi bir serbest enerji yardımıyla termodinamik eğrilik ifadesi hesaplanarak sırasıyla Curie ve Néel sıcaklıkları yakınlarındaki davranışı analitik olarak irdelendi (Erdem 2018a,b). Daha sonra, ferromanyetik Ising modeli için manyetizasyon ve korelasyon fonksiyonunun oluşturduğu iki-boyutlu bir faz uzayında metrik tanımlanarak Ricci skaleri örgü koordinasyon sayısı cinsinden türetildi (Erdem 2019). Aynı metot yardımıyla, izotropik BEG modeli üzerinde Ricci skalerinin sıcaklıkla değişimi çeşitli çiftlenim oran sabitleri için incelendi. Yine bu model için bulunan sonuçlarda, R 'nin ıraksama ve atlama davranışlarının olduğu görüldü (Erdem ve Alata 2020). Bu çalışmanın bir devamı, kristal alan altında spin-1 BEG modeli için kritik ve çoklu kritik topolojiyi içeren geometrik faz diyagramları şeklinde sunuldu (Alata vd 2023). 2022 yılında, $1D$ BEG modeli için üç-boyutlu sıcaklık, manyetik alan ve kristal alandan oluşan bir uzay tanımlanarak Ricci skalerinin davranışı kapsamlı şekilde gösterildi (Sanwari ve Sahay 2022a,b). Bir başka araştırmada ise, spin ötesi geçiş özelliği gösteren katılar Ruppeiner formalizmine dayalı TG yardımıyla çalışıldı (Erdem 2022). Mıknatıslanma ve sıcaklığın oluşturduğu termodinamik parametre uzayında Ricci skaleri R türetildi ve bu niceliğin yüksek spin/düşük spin geçiş çizgisi boyunca davranışı incelendi.

3. MATERYAL VE METOT

Sunulan tezde, araştırma materyali olarak ferromanyetik durumda tek örgülü spin-1 Blume-Capel modeli ve iki alt örgülü karma spin $(\frac{1}{2}, 1)$ Ising sistemi seçildiğinden bu bölümde önce söz konusu spin sistemlerinin Hamiltonyenleri, denge durumunda sergiledikleri davranışlar ve ortaya çıkan faz diyagramları verildi, daha sonra metot olarak kullanılan termodinamik geometri hakkındaki temel bilgiler ve bunların bazı basit örnekleri özetlendi.

3.1. Spin-1 Blume-Capel Modeli

Spin sayısı N olan bir örgü üzerinde tanımlanan spin-1 BC sistemi için kullanılan Hamiltonyen manyetik alan (H) varlığında (Ekiz vd 2001)

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

şeklinde. Burada her bir örgü noktasındaki spinler $S_i = -1, 0, +1$ değerlerinden birini alabilirler. Hamiltonyendeki ilk terim i ve j noktalarında bulunan spinler arasında olan bilineer etkileşmeyi, ikinci terim kristal alanı yani tek iyon anizotropiyi ve son terim ise dış manyetik alanı temsil etmektedir. E, T, S, M ve Q sırasıyla iç enerji, mutlak sıcaklık, entropi, dipol moment ve kuadrupol moment olmak üzere Gibbs enerji fonksiyonelinin genel ifadesi aşağıdaki gibidir:

$$G = E - TS - HM + DQ. \quad (3.2)$$

Burada $S = Ns$, $M = Nm$ ve $Q = Nq$ olup sistemin düzen parametreleri

$$m \equiv \langle S_i \rangle, \quad q \equiv \langle (S_i)^2 \rangle, \quad (3.3)$$

şeklinde tanımlanırken s spin başına entropiyi temsil eder. (3.3)'teki $\langle \dots \rangle$ gösterimi ise "termal beklenen değer" anlamına gelir. (3.2) ifadesi, MFA altında düzen parametrelerinin bir fonksiyonu olarak

$$f(m, q) = \frac{G}{JN} = -\frac{1}{2}m^2 + \theta \left[\left(\frac{m+q}{2} \right) \ln \left(\frac{m+q}{2} \right) + (1-q) \ln(1-q) + \left(\frac{q-m}{2} \right) \ln \left(\frac{q-m}{2} \right) \right] - hm + dq, \quad (3.4)$$

şeklinde yazılabilir. (3.4)'de $\theta = k_B T / J$ indirgenmiş sıcaklığı (k_B Boltzmann sabiti), $h = H / J$ indirgenmiş manyetik alanı ve $d = D / J$ indirgenmiş kristal alanı temsil eder. Sistem dengede olduğu zaman serbest enerji minimum olacağından düzen parametrelerinin denge durumu değerleri

$$\left(\frac{\partial f}{\partial m} \right)_q = 0, \quad \left(\frac{\partial f}{\partial q} \right)_m = 0, \quad (3.5)$$

eşitlikleri kullanılarak bulunur. Böylece (3.5) eşitliklerinden

$$\frac{m}{q} = \tanh\left(\frac{m+h}{\theta}\right), \quad e^{d/\theta} = \frac{2(1-q)}{q \operatorname{sech}\left(\frac{m+h}{\theta}\right)}, \quad (3.6)$$

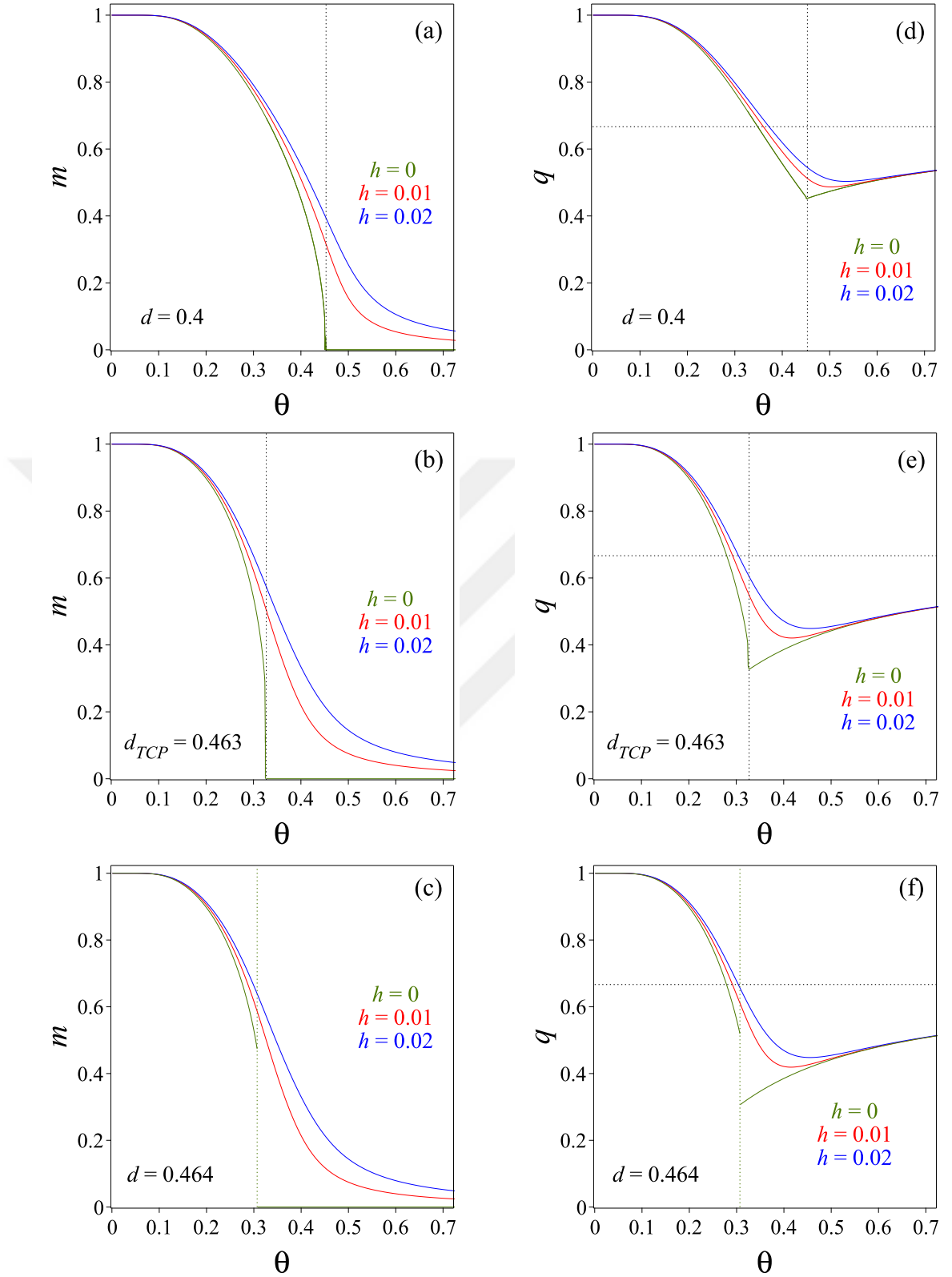
elde edilir. Bunların matematiksel bir düzenleme ile aşağıdaki öz-uyumlu denklem takımı ile özdeş olduğu gösterilebilir:

$$m = \frac{2 \sinh(\beta J m + \beta h)}{2 \cosh(\beta J m + \beta h) + e^{\beta J d}}, \quad (3.7)$$

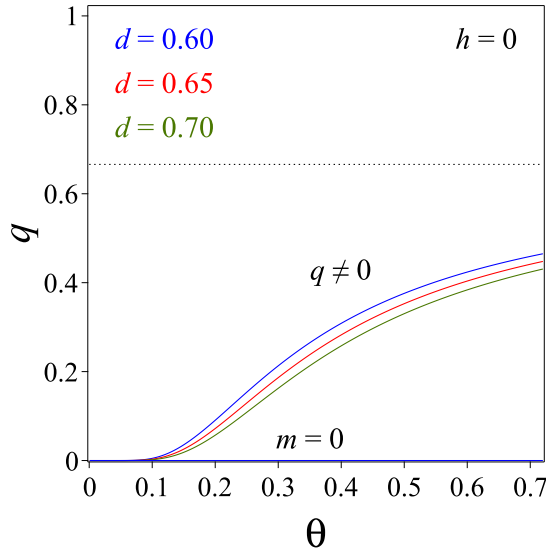
$$q = \frac{2 \cosh(\beta J m + \beta h)}{2 \cosh(\beta J m + \beta h) + e^{\beta J d}}. \quad (3.8)$$

Burada $\beta = 1/k_B T$ 'dir. (3.7) ve (3.8) denklemlerinin nümerik çözümlerinden m ve q 'nin (θ, d, h) parametrelerine göre değişimleri bulunabilir. Ortaya çıkan grafiksel sonuçlardan sistemin denge özellikleri yani kararlı, yarı kararlı ve kararsız durumları tespit edilebilir. (3.7) ve (3.8) denklemlerinin nümerik çözümleri Ekiz vd (2001)'de sunularak kararlı, yarı kararlı ve kararsız durumlar, serbest enerji analizi ve durulma eğrileri kullanılarak sınıflandırılmıştır. Bu çalışma esas alınarak aşağıda manyetik alan varlığında ($h \neq 0$) ve yokluğunda ($h = 0$) sadece kararlı çözümler tekrar elde edildi.

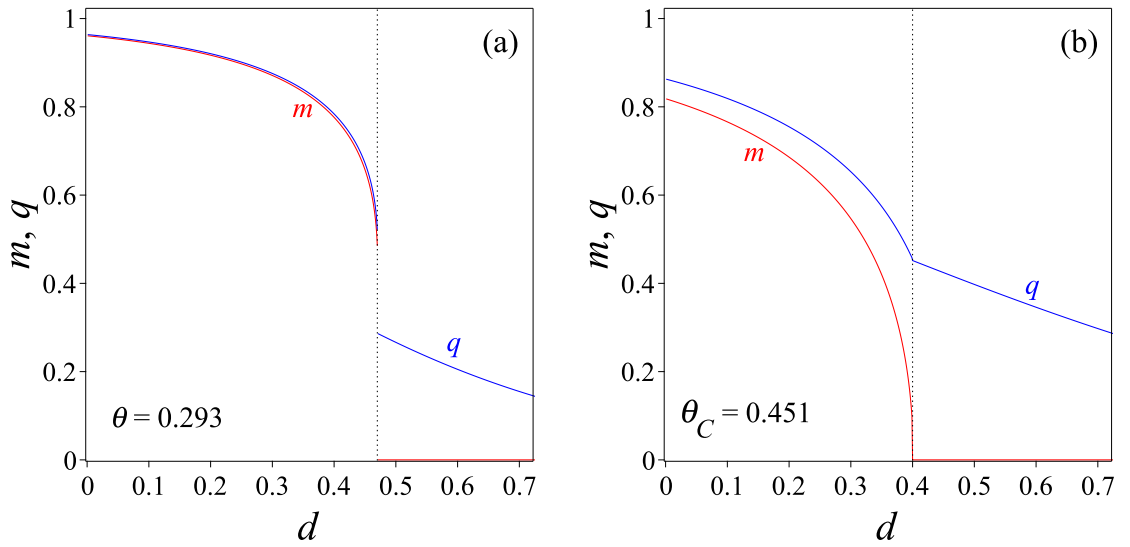
İlk olarak, seçilen bazı d değerleri için m ve q 'nin indirgenmiş sıcaklık θ 'ya göre değişimleri Şekil 3.1 ve Şekil 3.2'de gösterildi. Buna göre, $0 \leq d < 0.50$ aralığında elde edilen sonuçlarda $h = 0$ durumunda m ve q kendi doyum değerlerinden ($m \approx 1$ ve $q \approx 1$) başlayarak sıcaklık arttıkça sürekli olarak azalırlar (Şekil 3.1'deki tüm yeşil eğriler). Sırasıyla Şekil 3.1 (a) ve (d)'de görüldüğü gibi, bir kritik sıcaklıkta m sıfır olurken q sonlu bir değerde sivri uç yapar ardından $q = 2/3$ değerine doğru artmaya başlar. $0 \leq d < 0.463$ aralığında meydana gelen bu fiziksel olaya ferromanyetik (FM) fazdan ($m > 0, q > 0$) paramanyetik (PM) faza ($m = 0, q > 0$) sürekli (ikinci-derece) faz geçişi adı



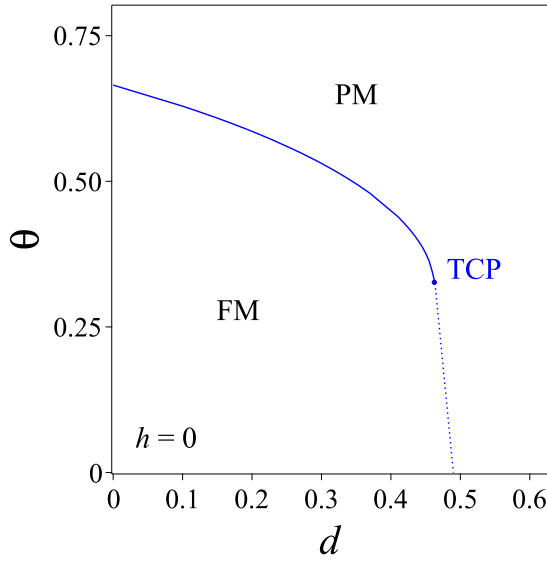
Şekil 3.1. BC modeli için manyetik alan varlığında ($h \neq 0$) ve yokluğunda ($h = 0$) farklı d değerleri kullanılarak elde edilen m ve q 'nin indirgenmiş sıcaklık θ 'ya göre değişimi. Düşey noktalı çizgiler faz geçiş sıcaklıklarını ve yatay noktalı çizgiler ise $q = 2/3$ değerini gösterir. $0 \leq d < 0.50$



Şekil 3.2. BC modeli için manyetik alan yokluğunda ($h = 0$) farklı d değerleri kullanılarak elde edilen m ve q 'nin θ 'ya göre değişimi. Yatay noktalı çizgi ise $q = 2/3$ değerini gösterir. $0.50 \leq d \leq 1$



Şekil 3.3. BC modelinde, $h = 0$ için m ve q 'nin farklı sıcaklıklarda d 'ye göre değişimi. Düşey noktalı çizgiler faz geçişlerinin meydana geldiği d değerlerini gösterir. **(a)** $\theta = 0.293$, **(b)** $\theta_C = 0.451$

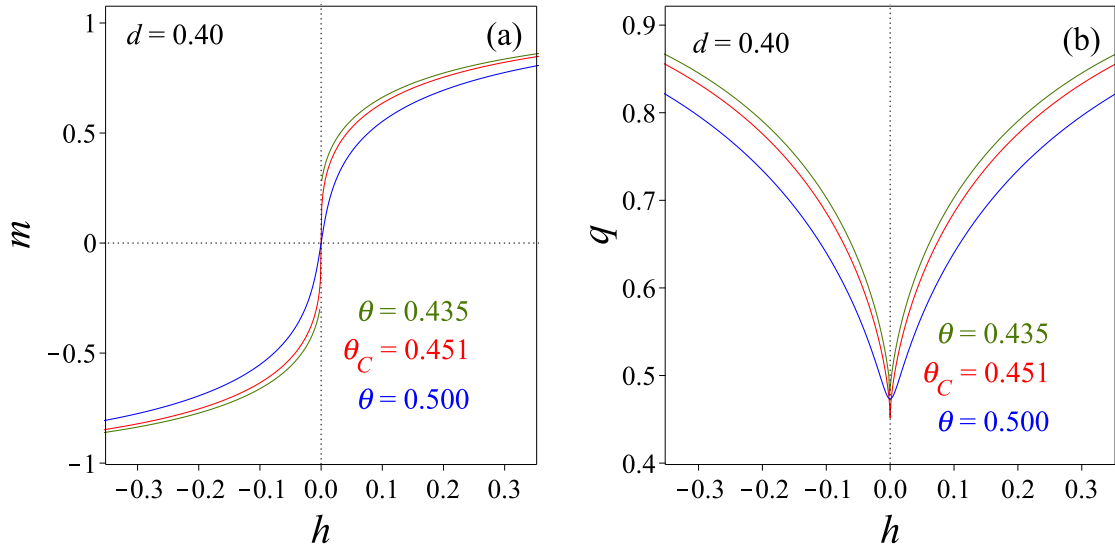


Şekil 3.4. BC sisteminin (d, θ) düzlemindeki faz diyagramı. Noktalı ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçişine karşılık gelmektedir. Mavi nokta üçlü kritik nokta TCP'yi göstermektedir

verilir. $d = 0.463$ değerinde, sürekli faz geçişi sonlanır ve spin sistemi bir üçlü kritik noktaya (TCP) sahiptir (Şekil 3.1 (b) ve (e)). Öte yandan, $0.463 < d < 0.50$ aralığında m düzen parametresi belli bir sıcaklık değerinde aniden sıfıra düşerken (Şekil 3.1 (c)) q düzen parametresi aynı sıcaklıkta daha küçük başka bir sonlu değere (Şekil 3.1 (f)) atlar. Bu fiziksel olay ise, süresiz (birinci-derece) faz geçişi olarak bilinir. Süresizliğin ortaya çıktığı noktadan sonra daima $m = 0$ olurken, q parametresi $2/3$ değerine kadar yükselir. Manyetik alan varlığında, sistemde meydana gelen tüm faz geçişleri kaybolur ve her zaman $m > 0$ ve $q > 0$ (Şekil 3.1'deki tüm kırmızı ve mavi eğriler). Faz geçişinin olmadığı bir başka durum ($m = 0, q > 0$) sıfır manyetik alanda $0.50 \leq d \leq 1$ aralığı için yapılan hesaplamalarda gözlenir (Şekil 3.2).

İkinci olarak, m ve q parametrelerinin d 'ye bağıllığı da incelenebilir (Şekil 3.3). Buna göre, $\theta = 0.293$ seçildiğinde $d = 0.470$ değerinde birinci-derece (Şekil 3.3 (a)) ve $\theta_C = 0.451$ olduğunda $d_C = 0.4$ değerinde ikinci-derece (Şekil 3.3 (b)) faz geçişi meydana gelir. Ayrıca, şekillerden θ değerleri arttıkça m ve q 'nun doyum değerlerinin azaldığı farkedilir.

Buraya kadar bahsedilen faz geçişi özellikleri, Şekil 3.4'deki (d, θ) düzlemi üzerinde verilen faz diyagramında da açıkça görülebilir. Şekle göre, spin-1 BC modeli ikinci-



Şekil 3.5. BC modeli için $d = 0.40$ değerinde farklı θ değerleri kullanılarak elde edilen m ve q 'nun manyetik alan h 'ye göre değişimi. Düşey noktalı çizgiler $h = 0$ durumunu gösterir

derece faz geçişine ilave olarak birinci-derece faz geçişi içermesinden dolayı spin-1/2 Ising modeline göre daha zengin bir faz diyagramına sahiptir. Birinci- ve ikinci-derece faz geçişi çizgileri, $(d, \theta) = (0.463, 0.327)$ noktasında konumlanan TCP'de birleşmektedir. Spin sistemi, bu birleşik çizginin altında FM fazında, üzerinde PM fazında bulunur.

Son olarak, Şekil 3.5'de $d = 0.40$ değeri kullanılarak üç farklı θ değeri için m ve q 'nun indirgenmiş manyetik alan h 'ye göre değişimi gösterildi. Şekil 3.5 (a)'daki yeşil renkteki mıknatıslanma eğrisinde $h = 0$ 'da $m < 0$ durumundan $m > 0$ durumuna birinci-dereceden bir faz geçişi ortaya çıkar. Kırmızı eğriye bakıldığında $\theta = \theta_C = 0.451$ değeri bir kritik sıcaklık olup, sistem $h = 0$ 'da ikinci-dereceden faz geçişine sahiptir. $\theta > \theta_C$ olduğunda ise sistem, paramanyetik fazda bulunur (Şekil 3.5 (a)'daki mavi eğri). Bu sonuçların bir başka yönü, Şekil 3.5 (b)'de de görülebilir. Buradan, q 'nun h 'ye göre değişiminin bir çift fonksiyon olduğu ve böylece manyetik alanın yöneliminden etkilenmediği anlaşılır ($q(-h) = q(h)$).

3.2. Karma Spin $(\frac{1}{2}, 1)$ Ising Modeli

Örgü noktası sayıları N_A ve N_B olan A ve B alt örgüleri üzerinde tanımlanan karma spin $(\frac{1}{2}, 1)$ Ising sisteminin Hamiltonyeni literatürde şu şekilde verilmektedir (Kaneyoshi 1987; Ekiz ve Keskin 2003; Selke ve Oitmaa 2010):

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \mu_i^A S_j^B + D \sum_j (S_j^B)^2 - H \left(\sum_i \mu_i^A + \sum_j S_j^B \right). \quad (3.9)$$

Spinler arasındaki etkileşimler sadece farklı türden örgü noktalarındaki en yakın komşu çiftler arasında $(\langle ij \rangle)$ olup A alt örgüsünün her bir noktasındaki spinler $\mu_i = -1, +1$ değerlerinden birini alırken B alt örgüsünün her bir noktasındaki spinler $S_j = -1, 0, +1$ değerlerinden birini alabilir. (3.1)'de olduğu gibi J bilineer etkileşim sabitini, D tek-iyon anizotropiyi ve H dış manyetik alanı temsil eder. (3.2) eşitliğine benzer şekilde, sistem için Gibbs enerji fonksiyonelinin genel ifadesi aşağıdaki gibidir:

$$G = E - TS - HM - HM' + DQ. \quad (3.10)$$

Burada entropi, A alt örgüsü için dipol moment, B alt örgüsü için dipol moment ve B alt örgüsü için kuadrupol moment sırasıyla $S = (N_A + N_B)s$, $M' = N_A\sigma$, $M = N_Bm$ ve $Q = N_Bq$ şeklinde tanımlanırlar. Sistemin düzen parametreleri termal beklenen değerler cinsinden

$$\sigma \equiv \langle \mu_i^A \rangle, \quad m \equiv \langle S_j^B \rangle, \quad q \equiv \langle (S_j^B)^2 \rangle, \quad (3.11)$$

şeklinde yazılabilirler. Ortalama alan yaklaşımı altında Gibbs enerji fonksiyonelinin ifadesi düzen parametreleri cinsinden yeniden yazılırsa aşağıdaki eşitlik elde edilir:

$$\begin{aligned} f(\sigma, m, q) = \frac{G}{JN} = & -\sigma m + \frac{\theta}{2} \left[\frac{(1+\sigma)}{2} \ln \left(\frac{1+\sigma}{2} \right) + \frac{(1-\sigma)}{2} \ln \left(\frac{1-\sigma}{2} \right) \right. \\ & + \frac{(q-m)}{2} \ln \left(\frac{q-m}{2} \right) + \frac{(q+m)}{2} \ln \left(\frac{q+m}{2} \right) + (1-q) \ln(1-q) \Big] \\ & - \frac{1}{2} h \sigma - \frac{1}{2} h m + \frac{1}{2} \alpha q. \end{aligned} \quad (3.12)$$

(3.12)'de $\theta = k_B T/J$, $\alpha = D/J$ ve $h = H/J$ 'dir. Ayrıca, $N = N_A + N_B = \frac{N}{2} + \frac{N}{2}$

şeklindedir. σ , m ve q parametrelerinin denge değerleri için öz-uyumlu denklem takımı

$$\left(\frac{\partial f}{\partial \sigma}\right)_{m,q} = 0, \quad \left(\frac{\partial f}{\partial m}\right)_{q,\sigma} = 0, \quad \left(\frac{\partial f}{\partial q}\right)_{m,\sigma} = 0, \quad (3.13)$$

ifadeleri kullanılarak türetilir. (3.12)'nin (3.13)'de kullanılmasıyla doğrudan aşağıda verilen öz-uyumlu denklemler bulunur:

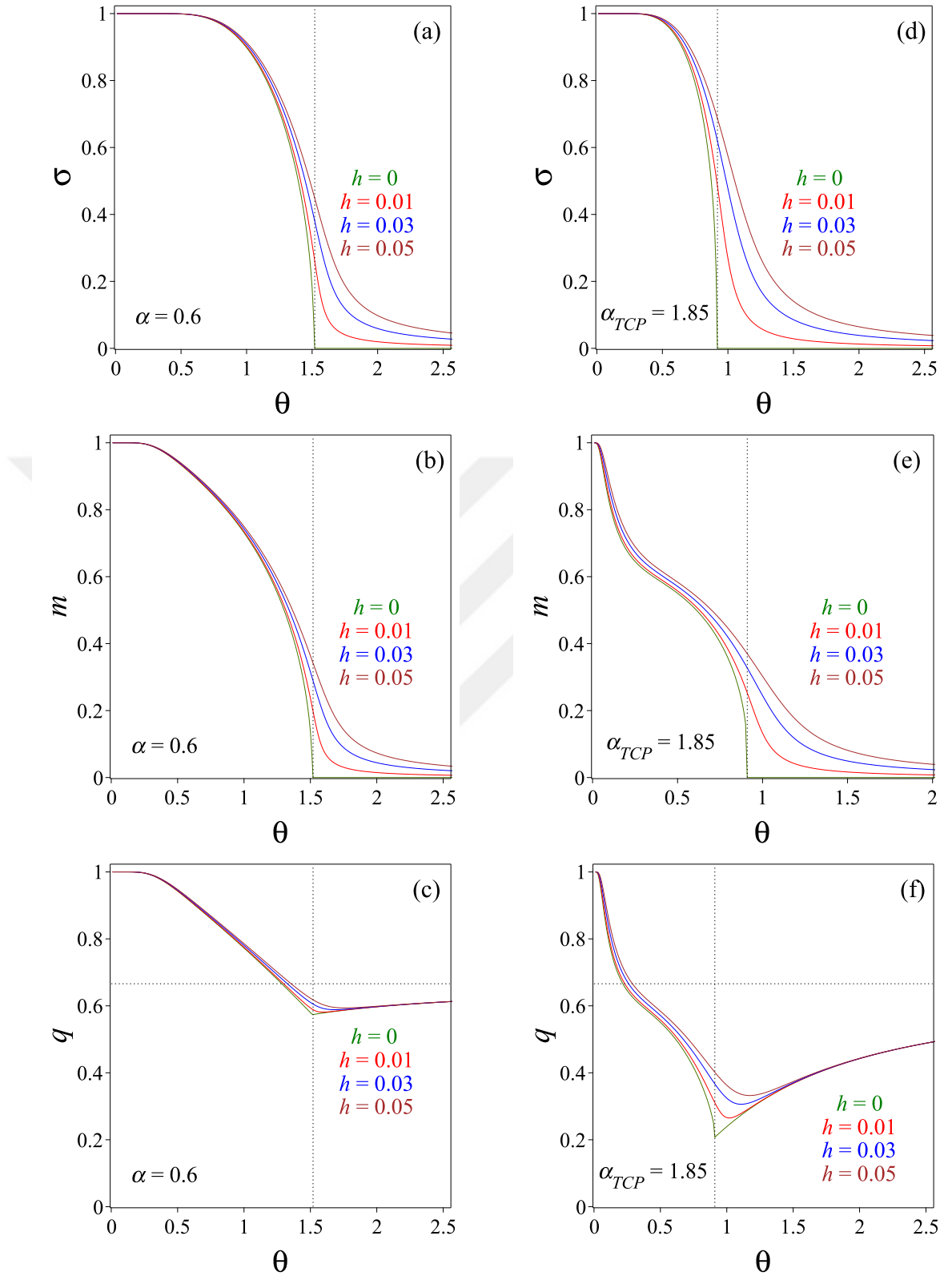
$$\begin{aligned} \sigma &= \tanh [\beta (2Jm + h)], \\ \frac{m}{q} &= \tanh [\beta (2J\sigma + h)], \\ e^{\frac{\alpha}{\theta}} &= \frac{2(1 - q)}{q \operatorname{sech} [\beta (2J\sigma + h)]}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

(3.14)'deki ikinci ve üçüncü ifadelerin aşağıdaki şekilde de yazılabileceği bilinmektedir:

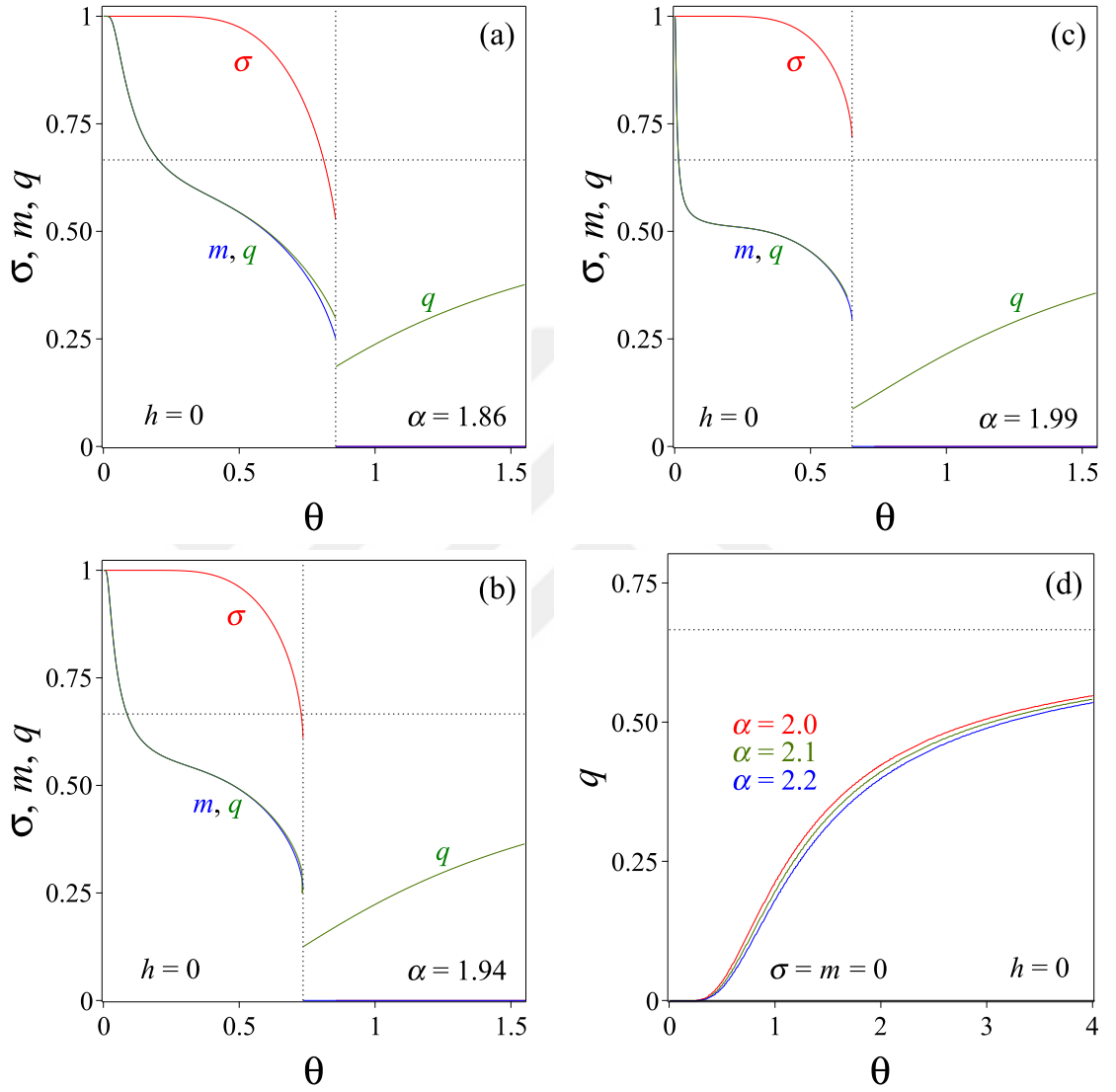
$$m = \frac{2 \sinh [\beta (2J\sigma + h)]}{e^{\beta J\alpha} + 2 \cosh [\beta (2J\sigma + h)]}, \quad q = \frac{2 \cosh [\beta (2J\sigma + h)]}{e^{\beta J\alpha} + 2 \cosh [\beta (2J\sigma + h)]}. \quad (3.15)$$

(3.14) denklemlerinin köklerinin hesaplanması ile σ , m ve q 'nin indirgenmiş niceliklere (θ, α, h) göre davranışları incelenebilir. Bu vesile ile sistemin denge özellikleri ve meydana gelen faz geçişleri tespit edilebilir. (3.14) denklemlerinin çözümleri ayrıntı ile Ekiz ve Keskin (2003)'te sunulmuştur. Bu çalışma esas alınarak, aşağıda $h = 0$ ve $h \neq 0$ durumlarında sadece kararlı çözümler tekrar elde edildi.

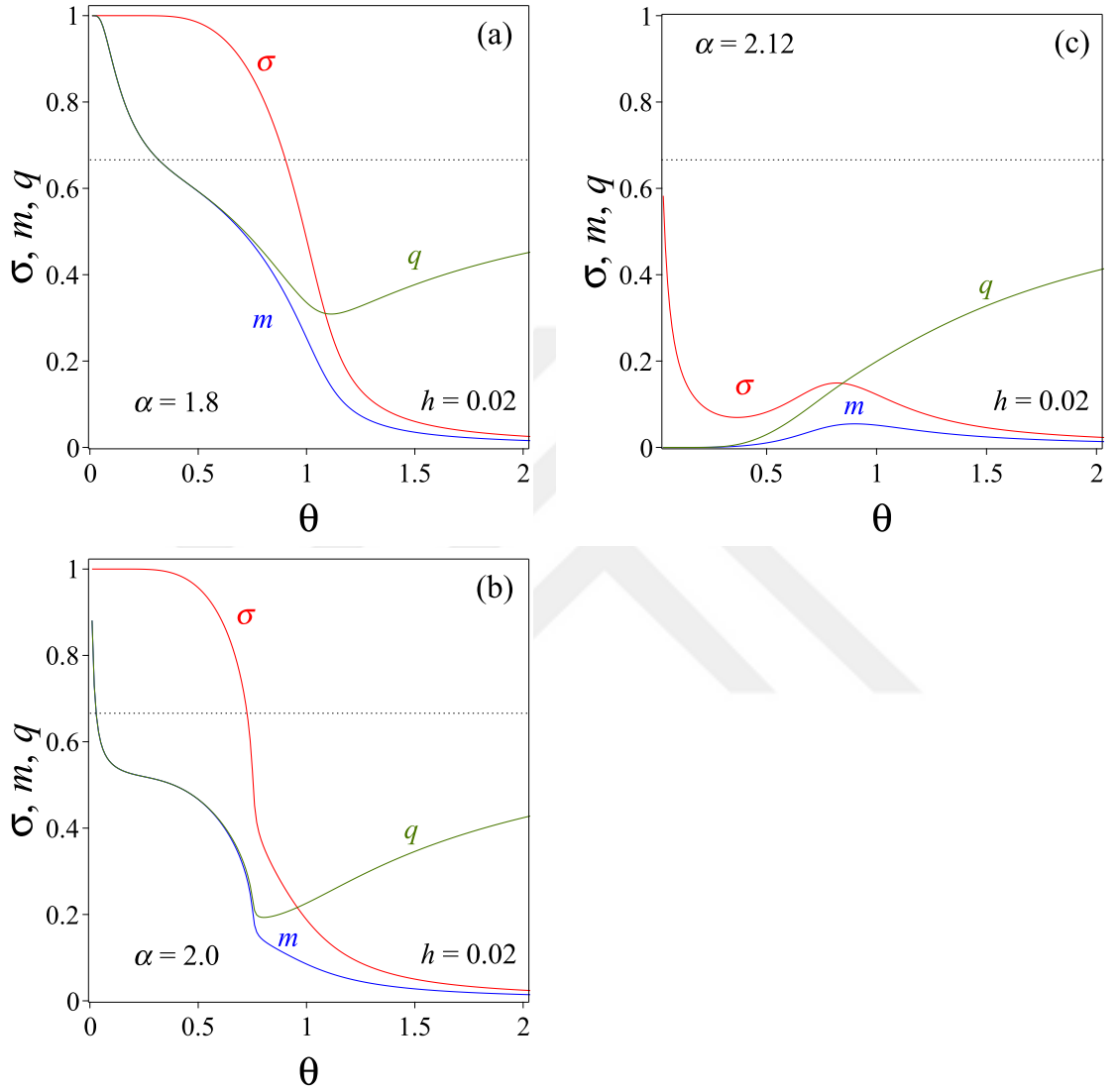
Önce, $\alpha \geq 0$ şartını sağlayan bazı α değerleri için σ , m ve q 'nin indirgenmiş sıcaklık θ 'ya göre değişimleri Şekil 3.6, Şekil 3.7 ve Şekil 3.8'de gösterildi. $h = 0$ durumunda $0 \leq \alpha < 1.85$ aralığında elde edilen sonuçlarda, A ve B alt örgülerine ait sırasıyla (σ, m) manyetizasyonları $\sigma \approx 1$ ve $m \approx 1$ değerlerinden başlayarak sıcaklık arttıkça sürekli olarak azalır. Bu azalma, kritik sıcaklıkta ikinci-derece faz geçişi meydana gelene kadar devam eder (Şekil 3.6 (a) ve (b)'deki yeşil eğriler). Diğer taraftan, B alt örgüsünde kuadрупolar düzen parametresi q , sıcaklığın artışıyla beraber sonlu bir değere kadar azalır ve bu değerde bir sivri uç yaparak ardından $q = 2/3$ değerine doğru artmaya başlar (Şekil 3.6 (c)). Üçlü kritik nokta $\alpha = 1.85$ ve $\theta = 0.92$ değerlerinde meydana gelir (Şekil 3.6 (d), (e) ve (f)'deki yeşil eğriler). $h \neq 0$ olduğu durumda ise, her zaman $\sigma > 0$, $m > 0$, $q > 0$ olduğu anlaşılır (Şekil 3.6'daki tüm kırmızı, mavi ve kahverengi eğriler). Şekil 3.1 (c) ve (f)'de olduğu gibi, $1.85 < \alpha < 2.0$ aralığında σ ve m düzen parametreleri birinci-derece faz geçişi sergileyerek belli bir sıcaklık değerinde aniden sıfıra düşerken q



Şekil 3.6. Karma spin sistemi için $h \neq 0$ ve $h = 0$ durumlarında farklı α değerleri kullanılarak elde edilen düzen parametrelerinin θ 'ya göre değişimi. Düşey noktalı çizgiler ikinci-derece faz geçiş sıcaklığını veya TCP'yi, yatay noktalı çizgiler ise $q = 2/3$ değerini gösterir. $0 \leq \alpha \leq 1.85$



Şekil 3.7. Karma spin modeli için $h = 0$ durumunda farklı α değerleri kullanılarak elde edilen σ , m ve q 'nin θ 'ya göre değişimi. Düşey noktali çizgiler birinci-derece faz geçiş sıcaklığını ve yatay noktali çizgiler ise $q = 2/3$ değerini gösterir. $\alpha > 1.85$

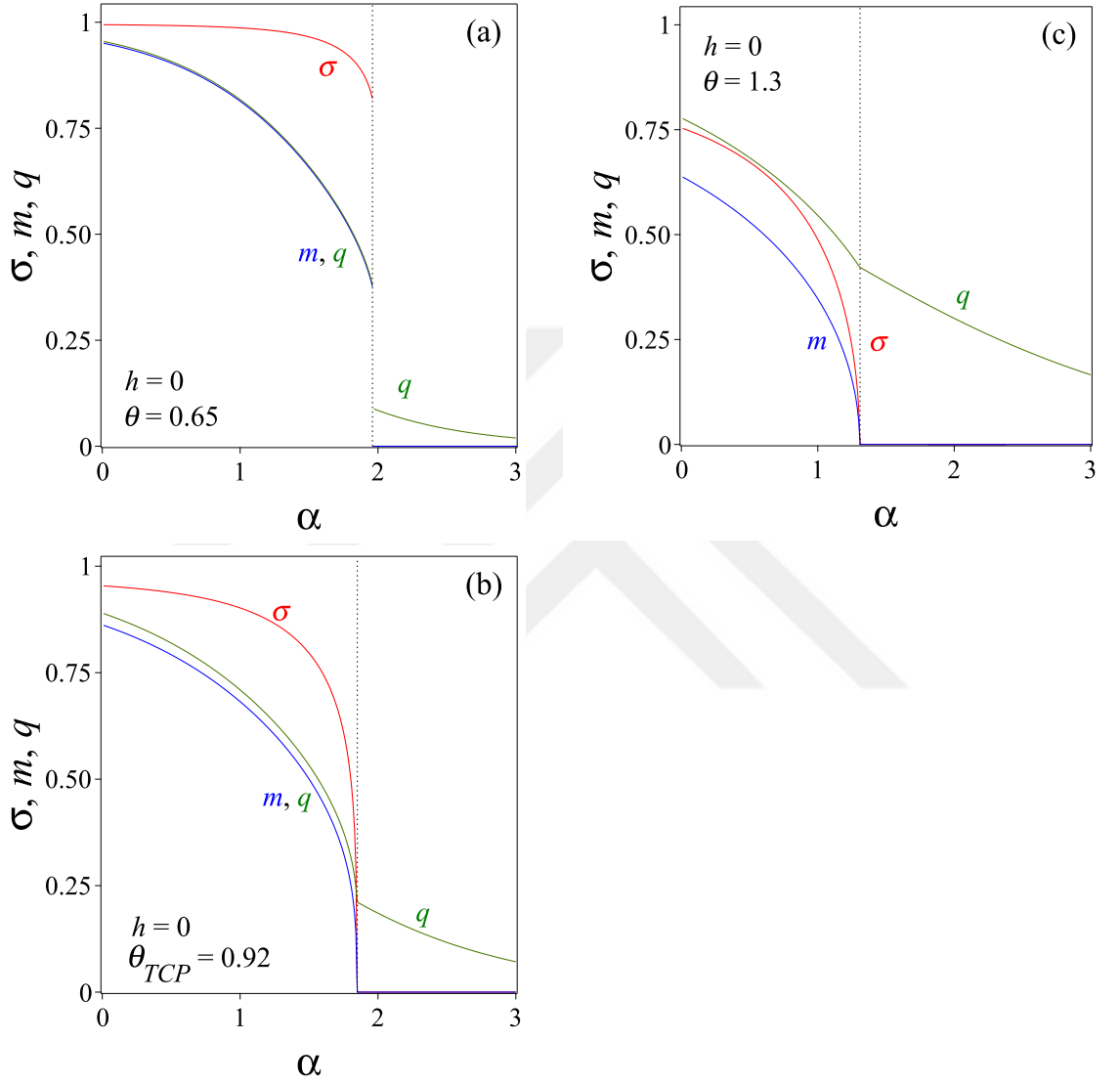


Şekil 3.8. Karma spin modeli için dış manyetik alan varlığında ($h = 0.02$) farklı α değerleri kullanılarak elde edilen σ , m ve q 'nin θ 'ya göre değişimi. Yatay noktalı çizgiler $q = 2/3$ değerini gösterir. $1.3 < \alpha < 2.28$

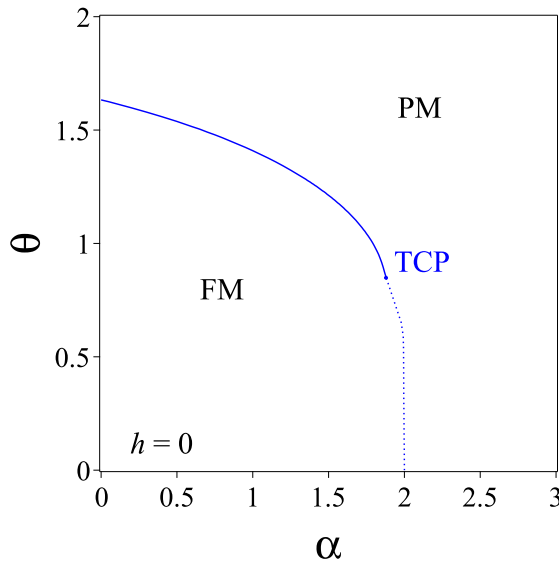
parametresi daha düşük pozitif bir değere atlar (Şekil 3.7 (a), (b) ve (c)). $\alpha \geq 2.0$ durumunda ise, $\sigma = m = 0$ olup sadece q düzen parametresi sıcaklık arttıkça 0'dan $2/3$ 'e kadar pürüzsüz şekilde yükselir. Dolayısıyla, q düzen parametresinde faz geçişi olmaz. Bu sonuçlardan farklı olarak, dış manyetik alan altında ($h = 0.02$) σ , m ve q 'nun θ 'ya göre değişimlerinde α 'ya bağlı olarak iki tipik davranış ortaya çıkar: (a) Tip 1 ($1.3 < \alpha \leq 2.0$): Şekil 3.8 (a) ve (b)'de görüldüğü gibi, σ ve m sıcaklık arttıkça azalır ve $\theta \rightarrow \infty$ için σ ve m sifira yaklaşır. Ancak q sıcaklık arttıkça önce belli bir değere düşer, sonra artmaya başlar ve $\theta \rightarrow +\infty$ için $2/3$ 'e yaklaşır. Bu nedenle, σ , m ve q 'nun kararlı durumunda beklenildiği gibi faz geçişi görülmez. (b) Tip 2 ($2.0 < \alpha < 2.28$): Şekil 3.8 (c)'de, B alt örgüsündeki düzen parametrelerinin (m ve q) kararlı durumu çok düşük sıcaklıklarda sıfırdır, ancak A alt örgüsündeki mıknatıslanma σ , $\theta = 0$ 'da sonlu bir değerden başlayarak θ artışı ile azalır. σ bir minimum değerine ulaştıktan sonra m ile birlikte sıcaklık artışı ile pik yapana kadar artmaya devam eder. Daha sonra, her iki parametre azalmaya başlayarak $\theta \rightarrow +\infty$ limitinde sifira yaklaşır. q parametresi ise, sıcaklık değiştikçe aynı limitte $2/3$ 'e kadar uzanır.

Şekil 3.9'da, diğer şekillerden farklı olarak σ , m ve q parametrelerinin θ yerine α 'ya göre değişimleri gösterildi. Şekil 3.9 (a), (b) ve (c)'deki eğriler sırasıyla birinci-derece faz geçişi, üçlü kritik nokta ve ikinci-derece faz geçişlerinin meydana geldiği sıcaklık değerleri kullanılarak elde edildi. Şekillerde ortaya çıkan sonuçlar yukarıda elde edilenlerle uyum halindedir.

Buraya kadar değinilen faz geçişi özellikleri Şekil 3.10'da verilen faz diyagramında da açıkça görülebilir. Şekle göre, birinci-derece ve ikinci-derece faz geçişi çizgileri, $(\alpha, \theta) = (1.85, 0.92)$ noktasında konumlanan TCP'de birleşmektedir. BC modelinde olduğu gibi, karma spin sistemi bu birleşik çizginin altında düzenli fazda, üzerinde düzensiz fazda bulunur.



Şekil 3.9. Karma spin modelinde, $h = 0$ için σ , m ve q 'nin farklı sıcaklıklarda α 'ya göre değişimi. Düşey noktalı çizgiler faz geçişlerinin meydana geldiği α değerlerini gösterir. (a) $\theta = 0.65$, (b) $\theta_{TCP} = 0.92$ ve (c) $\theta = 1.3$



Şekil 3.10. Karma spin sisteminin (α, θ) düzlemindeki faz diyagramı. Noktalı ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçişine karşılık gelmektedir. Mavi nokta üçlü kritik nokta TCP'yi göstermektedir

3.3. Termodinamik Geometri

Önce Weinhold (1975) tarafından önerilen ve daha sonra Ruppeiner (1979, 1995) tarafından geliştirilen TG matematikteki Riemann geometrisinin diline dayanır. TG ile denge termodinamiğine dalgalanma teorisi dahil edilerek bir fiziksel sistemin istatistiksel mekanik özellikleri araştırılabilmektedir. Başka bir ifadeyle, termodinamik parametre uzayında tanımlanan bir yüzey üzerinde bulunan denge durumları arası uzaklık termodinamik dalgalanma ile ilişkilendirilir. Yukarıda da belirtildiği gibi, TG'nin başlangıç noktasının Riemann geometrisi olmasından dolayı tezde kullandığımız metodolojinin sunulmasına Riemann geometrisi ve özelliklerinden başlandı.

Bilindiği gibi noktalar, çizgiler, açılar, yüzeyler ve bunların aralarındaki ilişkiler ile ilgilenen matematik dalı "geometri" olarak isimlendirilir. Öklid ile M. Ö. 300 yıllarında geliştirilmeye başlanan ve düzlemleri, katıları veya uzay geometrisini inceleyen geometriye "Öklid Geometrisi" denir. 19. yüzyılda, yeni bir geometri türü olan Öklid-dışı geometrilerin ortaya çıkmasıyla bu alandaki ilk büyük adım Gauss tarafından atılmıştır. Önce, Gauss'un diferansiyel geometriye olan ilgisiyle beraber 1827 yılında "Eğri Yüzeyler Üzerine Genel Araştırmalar" adlı makalesi yayınlandı. Gauss ile başlayan eğri yüzey-

lerin incelenmesi, diferansiyel geometri alanında bir dönüm noktası haline geldi. Gauss, özellikle yüzeyin kendi içinde oluşturduğu uzayın tüm özelliklerinin yüzeyin kendisi tarafından belirlendiğini gösterdi. Buna göre, yüzey kendi içinde bir uzay oluşturuyorsa yüzey üzerindeki eğriler jeodeziktir ve geometri Öklidyen olmaz. Aynı zamanda Gauss, kendi adıyla da bilinen iki-boyutlu bir yüzey için eğrilik (Gauss eğriliği) tanımladı. 19. yüzyılın en önemli matematiksel keşiflerinden biri de Gauss'un çalışmaları ışığında, Riemann tarafından ortaya konulan Riemann geometrisidir. Büyük ölçüde Gauss'tan etkilenen Riemann (1826-1866), Öklid uzayında bir yüzeyin geometrisinden yola çıkarak n -boyutlu uzayı bir manifold olarak ele aldı ve bu manifoldu $(\varphi^1, \varphi^2, \dots, \varphi^n)$ gibi değişkenlere birer değer atayarak oluşturdu. Söz konusu değişkenlere Riemann manifoldunun koordinatları denir. Daha açık şekilde, bu noktaların toplamı n -boyutlu manifoldu meydana getirir. Bu, bir yüzey üzerindeki tüm noktaların yüzeyi oluşturmaya benzer. Manifolddar diferansiyel geometride türev, integral hesabı ve eğriler veya yüzeylerin geometrisinin incelenmesinde bir temel oluşturur. Örneğin, bir eğri tek-boyutlu manifold ile tanımlanabilirken bir düzlem veya yüzey iki-boyutlu bir manifold ile temsil edilir. Dik koordinat sistemleri, üç-boyutlu Öklid uzayında incelenirken eğri bir yüzeyin incelenmesi için Riemann uzayına ihtiyaç duyulur. İki-boyutta bir düz yüzey Öklid uzayı iken, küresel ve silindirik yüzeyler Öklid uzayının kapsadığı birer iki-boyutlu Riemann uzaylarıdır. Öklid ve Riemann uzayları arasındaki bu temel fark metrik $(d\tau^2)$ tanımından da açıkça görülebilir. Buna göre, iki-boyutlu Öklid uzayında iki nokta arasındaki en kısa mesafe bir doğru iken bir eğri yüzey üzerinde yani Riemann uzayında bu mesafe bir jeodeziktir. Ayrıca, Öklid uzayı dik koordinat sistemi ile temsil edilen n -boyutlu bir geometriye dayanır. Riemann geometrisinde ise manifoldlar dik koordinat sistemine gömülebilir. Örneğin, bir küre yüzeyinin üç-boyutta dik koordinat sistemine gömülmesi için dönüşüm denklemleri yardımıyla kürenin her bir noktasının dik koordinat sistemindeki bir noktaya karşılık gelecek şekilde belirlenmesi gerekir. Yani, eğri bir yüzeyin dik koordinat sistemine gömülme işlemi ile bu yüzeyin geometrisi dik koordinatlar cinsinden bulunabilir. Çünkü, Riemann manifoldu üzerinde eğrisel koordinatlardan dik (kartezyen) koordinat sistemine dönüşüm yapmak mümkündür. Manifoldun belirlenmesinden sonra Riemann metriği yazılır ve Riemann eğriliği (ve Ricci skaleri) bu metrik yardımıyla hesaplanır. Önce, iki-boyutlu bir uzayda işlem yapılacak ve daha sonra bu işlem n -boyutlu uzaya genelleştirilecektir.

Önce u ve v 'nin bağımsız değişken olduğu iki-boyutlu eğri bir yüzey düşünelim. Seçilen bu eğri yüzey üzerinde, u ve v yüzeyin enlem ve boylamlarını oluşturan değişkenlerdir. Dolayısıyla, yüzey üzerinde bir noktanın kartezyen koordinatları $x(u, v)$, $y(u, v)$ ve $z(u, v)$ olarak belirtilir. Bu koordinatların diferansiyel formları

$$\begin{aligned} dx &= \frac{\partial x}{\partial u} du + \frac{\partial x}{\partial v} dv, \\ dy &= \frac{\partial y}{\partial u} du + \frac{\partial y}{\partial v} dv, \\ dz &= \frac{\partial z}{\partial u} du + \frac{\partial z}{\partial v} dv, \end{aligned} \quad (3.16)$$

şeklindedir. Herhangi bir iki-boyutlu yüzey için temel nicelik olan (u, v) koordinatlarında yay uzunluğunun karesi aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$d\tau^2 = g_{11}(u, v)du^2 + 2g_{12}(u, v)dudv + g_{22}(u, v)dv^2. \quad (3.17)$$

Bu ifadeye iki-boyutlu (u, v) uzayının metriği denir ve yüzey üzerindeki birbirine sonsuz yakın iki nokta arasındaki mesafenin $(d\tau)$ u ve v yüzey koordinatları cinsinden ifade edilmesini sağlar. Burada g_{11} , g_{12} ve g_{22} "metrik tensör bileşenleri" adını alır. (3.17) metriğinin tanımladığı uzaya ise "Riemann Uzayı" adı verilir. (3.16)'daki ifadeler üç-boyutlu Öklid metriğinde $(d\tau^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2)$ yerine yazılırsa metrik

$$d\tau^2 = \left(\frac{\partial x}{\partial u} du + \frac{\partial x}{\partial v} dv \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial u} du + \frac{\partial y}{\partial v} dv \right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial u} du + \frac{\partial z}{\partial v} dv \right)^2, \quad (3.18)$$

şeklini alır. Metrik bileşenleri, metriğin değişmezliği kullanılarak (3.17) ve (3.18) bağıntılarından

$$\begin{aligned} g_{11} &= \left(\frac{\partial x}{\partial u} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial u} \right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial u} \right)^2, \\ g_{12} &= g_{21} = \frac{\partial x}{\partial u} \frac{\partial x}{\partial v} + \frac{\partial y}{\partial u} \frac{\partial y}{\partial v} + \frac{\partial z}{\partial u} \frac{\partial z}{\partial v}, \\ g_{22} &= \left(\frac{\partial x}{\partial v} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial v} \right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial v} \right)^2, \end{aligned} \quad (3.19)$$

olarak elde edilir. İki-boyutta diagonal metrikler ($g_{12} = 0$) için bir yüzeyin eğriliği

$$R(u, v) = \frac{1}{\sqrt{g}} \left[\frac{\partial}{\partial u} \left(\frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial g_{22}}{\partial u} \right) + \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial g_{11}}{\partial v} \right) \right], \quad (3.20)$$

formülünden bulunabilir. Ancak, metrik diagonal değilse ($g_{12} \neq 0$) yüzeyin eğriliği için

$$R(u, v) = -\frac{1}{\sqrt{g}} \left[\frac{\partial}{\partial u} \left(\frac{g_{12}}{g_{11}\sqrt{g}} \frac{\partial g_{11}}{\partial v} - \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial g_{22}}{\partial u} \right) + \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{2}{\sqrt{g}} \frac{\partial g_{12}}{\partial u} - \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial g_{11}}{\partial v} - \frac{g_{12}}{g_{11}\sqrt{g}} \frac{\partial g_{11}}{\partial u} \right) \right], \quad (3.21)$$

bağıntısı kullanılır. Her iki eğrilik bağıntısında da metriğin determinanı

$$g = \det g_{ij} = g_{11}g_{22} - g_{12}^2 \quad (3.22)$$

şeklindedir. (3.17) metriğinin n -boyutlu $(\varphi^1, \varphi^2, \dots, \varphi^n)$ uzayına genelleştirilmiş şekli ise kısaca

$$d\tau^2 = g_{ij} d\varphi^i d\varphi^j, \quad (3.23)$$

ile ifade edilir. Burada, söz konusu uzayın metrik tensör bileşenleri

$$g_{ij} = \delta_{ab} \frac{\partial x^a}{\partial \varphi^i} \frac{\partial x^b}{\partial \varphi^j}, \quad (3.24)$$

şeklindedir. Burada, $x^a = (x^1, x^2, \dots, x^n)$ n -boyutlu Kartezyen koordinatlar ve δ_{ab} ise $n \times n$ Kronecker deltadır. (3.24)'e göre, g_{ij} seçilen uzayın koordinatlarının bir fonksiyonudur. (3.23) bağıntısının sağ tarafı $d\varphi^i$ 'nin bileşenlerinin tüm olası değerleri için her zaman pozitif olacaktır. Öklid metrik uzayı, genel vektör uzayının özel bir durumudur. Böylece Riemann, g_{ij} metriğinin koordinatların bir fonksiyonu olmasına izin vererek uzayın doğasının noktadan noktaya değişebilmesini sağlamıştır. Riemann manifoldu üzerindeki bir eğri n tane fonksiyon kümesi ile tanımlanır:

$$\varphi^1 = \varphi^1(t), \quad \varphi^2 = \varphi^2(t), \dots, \varphi^n = \varphi^n(t). \quad (3.25)$$

Böylece, $t = t_1$ ve $t = t_2$ arasındaki eğrinin uzunluğu

$$L = \int_{t_1}^{t_2} d\tau = \int_{t_1}^{t_2} \frac{d\tau}{dt} dt = \int_{t_1}^{t_2} \sqrt{g_{ij} \frac{d\varphi^i}{dt} \frac{d\varphi^j}{dt}} dt, \quad (3.26)$$

şeklindedir. Verilen iki nokta $t = t_1$ ve $t = t_2$ arasındaki en kısa eğri, yani jeodezik, varyasyonlar hesabı yöntemiyle belirlenir. Bu yöntemde jeodezik denklemi $\delta L = 0$ olan eğridir. Daha sonra, iki nokta arasındaki bu en kısa yolu sağlayan (3.25) fonksiyonlarının belirlenmesi gerekir. Öncelikle bir vektör uzayının tanımlanması için bazı genel

kavramlardan bahsetmek önemlidir. n -boyutlu uzayda, $X(a^1, a^2, \dots, a^n)$ noktası vektörün başlangıcı ve $Y(b^1, b^2, \dots, b^n)$ noktası vektörün sonu ise, $\overrightarrow{XY}$ vektörü X noktasından Y noktasına olan vektördür. Bu iki nokta arasındaki uzaklık

$$\tau = XY = \left[(b^1 - a^1)^2 + (b^2 - a^2)^2 + \dots + (b^n - a^n)^2 \right]^{1/2}, \quad (3.27)$$

ifadesi ile tanımlanır. Böyle bir vektör uzayına "Öklid metrik uzayı" denir. Birbirlerine sonsuz yakın $X(\varphi^1, \dots, \varphi^n)$ ve $Y(\varphi^1 + d\varphi^1, \dots, \varphi^n + d\varphi^n)$ noktaları durumunda, yay uzunluğunun karesi $d\tau^2$ (3.23) eşitliğindeki gibi olur.

Şimdi eğrilik skalerinin nasıl türetildiği hakkında kısaca bilgi verelim. Öncelikle g_{ij} metrik tensör bileşenleri yardımıyla Γ_{jk}^i Christoffel sembolleri (veya bağlantı katsayıları)

$$\Gamma_{jk}^i = \frac{1}{2} g^{il} \left(\frac{\partial g_{lj}}{\partial \varphi^k} + \frac{\partial g_{lk}}{\partial \varphi^j} - \frac{\partial g_{jk}}{\partial \varphi^l} \right), \quad (3.28)$$

şeklinde tanımlanır. Riemann eğrilik tensörü bağıntısı

$$R_{jkl}^i = \partial_k \Gamma_{jl}^i - \partial_l \Gamma_{jk}^i + \Gamma_{mk}^i \Gamma_{jl}^m - \Gamma_{ml}^i \Gamma_{jk}^m, \quad (3.29)$$

şeklinde dir. Bu bağıntıdan, kontravaryant indisin (i) ikinci kovaryant indisle (k) daraltılmasıyla, Ricci tensörü olarak adlandırılan kovaryant tensör aşağıdaki gibi oluşturulur:

$$R_{ij} = R_{ikj}^k = -R_{ijk}^k. \quad (3.30)$$

Ricci tensörü kullanılarak Ricci skaleri:

$$R = g^{ij} R_{ij} = g^{ij} g^{lk} R_{likj}, \quad (3.31)$$

şeklinde türetilir. R 'nin işaretli bir büyüklük olması fiziksel sistemlerin yorumlanmasında oldukça önemlidir.

Yukarıda bahsedilen matematiksel formülasyona örnek olması amacıyla torus yüzeyinin eğriliğinin nasıl bulunduğu gösterilecektir. Bir torusu tanımlayan parametreler tüpün merkezinden torusun merkezine olan uzaklık ve tüpün yarıçapı (O, a), azimutal ve polar açılarıdır (ϕ, ψ). Burada, ϕ ve ψ açıları tam bir daire çizen açılar olup değerleri aynı

noktada başlar ve biter ($\phi, \psi \in [0, 2\pi)$). Dolayısıyla yarıçap sabit alınırsa metrik elemanı aşağıdaki gibi yazılır:

$$d\tau^2 = (O + a \cos \phi)^2 d\psi^2 + a^2 d\phi^2. \quad (3.32)$$

Torus yüzeyi için kovaryant ve kontravaryant metrik tensör bileşenleri sırasıyla,

$$g_{ij} = \begin{bmatrix} (O + a \cos \phi)^2 & 0 \\ 0 & a^2 \end{bmatrix}, \quad g^{ij} = \begin{bmatrix} \frac{1}{(O + a \cos \phi)^2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{a^2} \end{bmatrix}, \quad (3.33)$$

şeklindedir. Sıfır olmayan Christoffel sembolleri, (3.28) bağıntısı yardımıyla aşağıdaki gibi bulunur:

$$\Gamma_{12}^1 = \Gamma_{21}^1 = -\frac{a \sin \phi}{O + a \cos \phi}, \quad (3.34)$$

$$\Gamma_{11}^2 = \frac{(O + a \cos \phi) \sin \phi}{a}. \quad (3.35)$$

İki-boyutlu uzayda, sıfırdan farklı Riemann tensör bileşenleri (3.29) bağıntısından

$$R_{212}^1 = -R_{221}^1 = \frac{a \cos \phi}{O + a \cos \phi},$$

$$R_{121}^2 = -R_{112}^2 = \frac{(O + a \cos \phi) \cos \phi}{a}, \quad (3.36)$$

olarak bulunur. Yine sıfırdan farklı Ricci tensör bileşenleri (3.30)'dan

$$R_{11} = \frac{(O + a \cos \phi) \cos \phi}{a},$$

$$R_{22} = \frac{a \cos \phi}{O + a \cos \phi}, \quad (3.37)$$

bulunur. Son olarak, torus için eğrilik skaleri (3.31) bağıntısından

$$R = \frac{2 \cos \phi}{a(O + a \cos \phi)}, \quad (3.38)$$

elde edilir. Geometrideki temel örnekler olan küre ve silindir yüzeylerinin eğrilikleri sabit olmasından dolayı torusun eğriliğini hesaplamak oldukça ilginç bulunmaktadır. Tüm

torus yüzeyleri için daima $O > a$ olacağından (3.38)'in paydası pozitif değerler alır. Bu durumda, eğriliğin işareti sadece $\cos \phi$ tarafından belirlenir. Sonuç olarak, torus farklı eğrilik bölgelerine sahiptir: torusun dış kısmında eğrilik pozitif, iç kısmında negatif, üst ve alt dairelerde ise sıfırdır.

Günümüzde Riemann geometrisinin denge termodinamiğine uygulanması ile "Termodinamik Geometri (TG)" adıyla fizikte yeni bir metodoloji ortaya çıkmıştır. Geometrideki "uzay" kavramı yerine termodinamik geometride "durum uzayı" veya "parametre uzayı" kullanılır. Burada, termodinamik parametre uzayının eğriliği "termodinamik eğrilik" olarak adlandırılır ve genellikle R harfi ile temsil edilir (Alata 2022). R eğriliği, durum uzayındaki $d\tau$ uzaklığını tanımlayan g_{ij} bileşenlerinden hesaplanır. g_{ij} kovaryant metrik bileşenlerinin hesaplanabilmesi için ise TG'de Weinhold ve Ruppeiner metrikleri olmak üzere iki tür tanım yapılmıştır. Weinhold'a göre g_{ij} bileşenleri iç enerjinin Hessian matrisi yardımıyla, Ruppeiner'e göre herhangi bir serbest enerji ifadesinin Hessianı kullanılarak türetilir. Aşağıda, Ruppeiner metriğinin kullanıldığı örnekler yer almaktadır. Önce, $d\tau$ uzaklığını hesaplamak için de bir durum uzayı (manifold) tanımlamak gerekir. Örneğin T , $-P$ ve H sırasıyla sıcaklık, basınç ve manyetik alanı temsil etmek üzere $(\varphi^1, \varphi^2, \varphi^3) = (T, -P, H)$ koordinat sistemi "ideal paramanyetik gaz" için üç-boyutlu bir manifold olarak seçilebilir (Mijatović vd 1987). Termodinamikteki Gibbs serbest enerjisi $G = G(T, -P, H)$ ve Maxwell eşitlikleri

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 G}{\partial T \partial P} &= - \left(\frac{\partial S}{\partial P} \right)_{T,H} = \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_{P,H}, \\ \frac{\partial^2 G}{\partial T \partial H} &= \left(\frac{\partial S}{\partial H} \right)_{T,P} = \left(\frac{\partial M}{\partial T} \right)_{T,H}, \\ \frac{\partial^2 G}{\partial H \partial P} &= - \left(\frac{\partial M}{\partial P} \right)_{T,H} = \left(\frac{\partial V}{\partial H} \right)_{T,P},\end{aligned}\tag{3.39}$$

yardımla g_{ij} kovaryant metrik tensörü

$$g_{ij} = -\partial_i \partial_j G = \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{P,H} & - \left(\frac{\partial S}{\partial P} \right)_{T,H} & \left(\frac{\partial S}{\partial H} \right)_{T,P} \\ \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_{P,H} & - \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_{T,H} & \left(\frac{\partial V}{\partial H} \right)_{T,P} \\ \left(\frac{\partial M}{\partial T} \right)_{T,H} & - \left(\frac{\partial M}{\partial P} \right)_{T,H} & \left(\frac{\partial M}{\partial H} \right)_{T,P} \end{pmatrix},\tag{3.40}$$

formunda yazılabilir. Burada $\partial_i = \partial/\partial\varphi_i = (\partial/\partial T, -\partial/\partial P, \partial/\partial H)$ 'dir. (3.40)'dan g^{ij} kontravaryant metrik tensör

$$g^{ij} = \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_{V,M} & -\left(\frac{\partial P}{\partial S}\right)_{V,M} & \left(\frac{\partial H}{\partial S}\right)_{V,M} \\ \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_{S,M} & -\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_{S,M} & \left(\frac{\partial H}{\partial V}\right)_{S,M} \\ \left(\frac{\partial T}{\partial M}\right)_{S,V} & -\left(\frac{\partial P}{\partial M}\right)_{S,V} & \left(\frac{\partial H}{\partial M}\right)_{S,V} \end{pmatrix}, \quad (3.41)$$

şeklinde yazılır. İdeal paramanyetik gazın özel bir durumunda, $\mathcal{R}$ evrensel gaz sabiti, S_0 entropi, T_0 sıcaklık ve V_0 hacim olmak üzere,

$$\begin{aligned} S &= S_0 + \mathcal{R} \ln \left[\frac{V}{V_0} \left[\frac{T}{T_0} \right]^{3/2} \right] - \frac{M^2}{2\eta}, \\ V &= \frac{\mathcal{R}T}{P}, \\ M &= \frac{\eta H}{T}, \end{aligned} \quad (3.42)$$

bağıntıları bilinmektedir. Burada η bir sabittir. (3.42)'den yararlanarak (3.40) ve (3.41)'deki tensör bileşenleri sırasıyla

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} \frac{5\mathcal{R}}{2T} + \frac{\eta H^2}{T^3} & \frac{\mathcal{R}}{P} & -\frac{\eta H}{T^2} \\ \frac{\mathcal{R}}{P} & \frac{\mathcal{R}T}{P^2} & 0 \\ -\frac{\eta H}{T^2} & 0 & \frac{\eta}{T} \end{pmatrix}, \quad g^{ij} = \begin{pmatrix} \frac{2T}{3\mathcal{R}} & -\frac{2P}{3\mathcal{R}} & \frac{2H}{3\mathcal{R}} \\ -\frac{2P}{3\mathcal{R}} & \frac{5P^2}{3\mathcal{R}T} & -\frac{2PH}{3\mathcal{R}T} \\ \frac{2H}{3\mathcal{R}} & -\frac{2PH}{3\mathcal{R}T} & \frac{T}{\eta} + \frac{2H^2}{3\mathcal{R}T} \end{pmatrix}, \quad (3.43)$$

şeklinde hesaplanır. Daha sonra, (3.43)'de elde edilen sonuçlar (3.28)'de kullanılarak bağlantı katsayıları

$$\begin{aligned} \Gamma_{11}^1 &= \frac{-2\eta H^2 - 5\mathcal{R}T^2}{6\mathcal{R}T^3}, & \Gamma_{12}^1 &= \Gamma_{21}^1 = -\frac{1}{3P}, & \Gamma_{13}^1 &= \Gamma_{31}^1 = \frac{H\eta}{3\mathcal{R}T^2}, \\ \Gamma_{22}^1 &= -\frac{T}{3P^2}, & \Gamma_{33}^1 &= -\frac{\eta}{3\mathcal{R}T}, & \Gamma_{11}^2 &= \frac{P(2\eta H^2 + 5\mathcal{R}T^2)}{6\mathcal{R}T^4}, \\ \Gamma_{12}^2 &= \Gamma_{21}^2 = \frac{5}{6T}, & \Gamma_{13}^2 &= \Gamma_{31}^2 = -\frac{PH\eta}{3\mathcal{R}T^3}, & \Gamma_{22}^2 &= -\frac{2}{3P}, \\ \Gamma_{33}^2 &= \frac{P\eta}{3\mathcal{R}T^2}, & \Gamma_{11}^3 &= -\frac{H\left(\eta H^2 - \frac{\mathcal{R}T^2}{2}\right)}{3\mathcal{R}T^4}, & \Gamma_{12}^3 &= \Gamma_{21}^3 = -\frac{H}{3TP}, \end{aligned} \quad (3.44)$$

$$\Gamma_{13}^3 = \Gamma_{31}^3 = \frac{2\eta H^2 - 3\mathcal{R}T^2}{6\mathcal{R}T^3}, \quad \Gamma_{22}^3 = -\frac{H}{3P^2}, \quad \Gamma_{33}^3 = -\frac{H\eta}{3\mathcal{R}T^2},$$

olarak bulunur. (3.44) eşitlikleri (3.29)'da yerine yazılarak sıfırdan farklı Riemann tensör bileşenleri

$$R_{132}^2 = -\frac{H\eta}{6\mathcal{R}T^3}, \quad R_{123}^3 = \frac{1}{6PT}, \quad R_{223}^3 = \frac{1}{6P^2},$$

$$R_{332}^2 = \frac{\eta}{6\mathcal{R}T^2}, \quad R_{112}^2 = \frac{H^2\eta}{6\mathcal{R}T^4}, \quad R_{113}^3 = \frac{1}{6T^2}, \quad (3.45)$$

şeklindedir. Sıfırdan farklı Ricci tensör bileşenleri ise:

$$R_{11} = -\frac{\eta H^2 + \mathcal{R}T^2}{6\mathcal{R}T^4}, \quad R_{12} = R_{21} = -\frac{1}{6PT}, \quad R_{13} = R_{31} = \frac{H\eta}{6\mathcal{R}T^3},$$

$$R_{22} = -\frac{1}{6P^2}, \quad R_{33} = -\frac{\eta}{6\mathcal{R}T^2}. \quad (3.46)$$

Son olarak ideal paramanyetik gaz için termodinamik eğrilik

$$R = \frac{1}{3\mathcal{R}T}, \quad (3.47)$$

bulunur. (3.47)'ye göre ideal paramanyetik gazın skaler eğriliği sadece sıcaklığın bir fonksiyonudur. Yüksek sıcaklık limitinde bu nicelik sıfır olmaktadır.

Uzun zamandır termodinamik geometri, birçok sistemde meydana gelen faz geçişleri ve kritik olayları çalışmak için temel yaklaşımlardan biri haline geldi. Özellikle termodinamik geometri, istatistiksel mekaniğin ana konularından Ising modelleri ve birçok çeşidine geometrik bir bakış açısı kazandırdı. Bu yolla termodinamik parametre uzayında tanımlanan metrikler yardımıyla spin sistemleri ve bunların fizikteki birçok farklı uygulaması için bir geometrik yapı inşa edildi. Tezde, TG uygulamalarına ikinci bir örnek olması ve gelecek bölümde sunulan ara basamakların daha iyi anlaşılabilmesi açısından ferromanyetik spin- $\frac{1}{2}$ Ising modelinin iki-boyutlu düzen parametresi uzayı için R Ricci

skalerinin türetilişi ve kritik nokta civarındaki davranışı analitik olarak aşağıda verildi (Erdem 2018b).

Spin- $\frac{1}{2}$ Ising sisteminin manyetik Gibbs enerji fonksiyonu (G), verilen uzun menzil (r) ve kısa menzil (c) düzen parametreleri cinsinden Bethe yaklaşımı altında indirgenmiş nicelikler (θ, h) kullanılarak şu şekilde yazılır (Barry 1966):

$$f(r, c) = \frac{G}{JN} = -\frac{1}{2}\gamma c - \theta \ln W(r, c) - g_S \mu_B h r. \quad (3.48)$$

Burada γ , g_S ve μ_B sırasıyla örgü koordinasyon sayısını (farklı örgü yapılarına karşılık gelen sonlu bir sayı), spin faktörünü ve Bohr magnetonunu temsil eder. (3.48)'deki ikinci terim ise

$$\begin{aligned} \ln W(r, c) = & \frac{1}{2}\gamma \left\{ \frac{2}{\gamma} \ln 2 + \left(1 - \frac{2}{\gamma}\right) \left[(1+r) \ln(1+r) + (1-r) \ln(1-r) \right] \right. \\ & - \frac{1}{2}(1-c) \ln(1-c) - \frac{1}{4}(1+2r+c) \ln(1+2r+c) \\ & \left. - \frac{1}{4}(1-2r+c) \ln(1-2r+c) \right\}, \end{aligned} \quad (3.49)$$

şeklinde verilir. Ricci skalerinin türetilmesine ilk önce Riemann metriği yazılarak başlanır. Dolayısıyla (3.17) eşitliğinden metrik

$$d\tau^2 = g_{11}(r, c)dr^2 + 2g_{12}(r, c)drdc + g_{22}(r, c)dc^2, \quad (3.50)$$

formundadır. (3.50)'deki metrik bileşenleri (3.48) eşitliği kullanılarak hesaplanır (Ruppiner 1995):

$$\begin{aligned} g_{11} &= -\frac{1}{\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} = -\gamma \left(\frac{1+c}{(1+c)^2 - 4r^2} - \frac{1-2/\gamma}{1-r^2} \right), \\ g_{12} &= g_{21} = -\frac{1}{\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial r \partial c} = \gamma \left(\frac{r}{(1+c)^2 - 4r^2} \right), \\ g_{22} &= -\frac{1}{\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial c^2} = -\frac{\gamma}{2(1-c)} \left(\frac{1+c-2r^2}{(1+c)^2 - 4r^2} \right). \end{aligned} \quad (3.51)$$

(3.51) eşitliklerinin (3.28)'de yazılmasıyla Christoffel sembolleri

$$\begin{aligned}
\Gamma_{11}^1 &= -\frac{\kappa}{(r^2 - 1)\xi}, \\
\Gamma_{12}^1 &= \Gamma_{21}^1 = -\frac{\gamma(2r^2 + c + 1)(r^2 - 1)}{2\xi}, \\
\Gamma_{22}^1 &= \frac{r\gamma(r^2 - 1)^2}{(c - 1)\xi}, \\
\Gamma_{11}^2 &= \frac{\lambda}{(r^2 - 1)\xi}, \\
\Gamma_{12}^2 &= \Gamma_{21}^2 = -\frac{r(c - 1)(\gamma r^2 + 2c\gamma - 4c + \gamma - 4)}{\xi}, \\
\Gamma_{22}^2 &= -\frac{\mu}{(c - 1)\xi},
\end{aligned} \tag{3.52}$$

şeklinde hesaplanır. Notasyonu basitleştirmek için kullanılan κ , λ , μ ve ξ tanımları aşağıdaki gibidir:

$$\begin{aligned}
\kappa &= r(-c\gamma r^4 - 2c^2\gamma r^2 + 5\gamma r^4 + c^3\gamma + 4c^2r^2 - 6c\gamma r^2 - 16r^4 - 2c^3 + 3c^2\gamma \\
&\quad + 16cr^2 - 6c^2 + 2c\gamma + 12r^2 - 6c - 2\gamma - 2),
\end{aligned} \tag{3.53}$$

$$\begin{aligned}
\lambda &= (c - 1)(c\gamma r^4 + 3c^2\gamma r^2 - 3\gamma r^4 - 6c^2r^2 + 4c\gamma r^2 + 8r^4 - c^2\gamma - 12cr^2 - 3\gamma r^2 \\
&\quad + 2c^2 - c\gamma + 2r^2 + 4c + 2),
\end{aligned} \tag{3.54}$$

$$\begin{aligned}
\mu &= -c\gamma r^4 - 2c^2\gamma r^2 + 3\gamma r^4 + c^3\gamma + 6c^2r^2 - 8r^4 - 2c^3 + c^2\gamma + 4cr^2 - 2\gamma r^2 \\
&\quad - 4c^2 + 6r^2 - 2c,
\end{aligned} \tag{3.55}$$

$$\xi = (c^2 - 4r^2 + 2c + 1)(-\gamma r^2 + c\gamma + 4r^2 - 2c - 2). \tag{3.56}$$

Sıfırdan farklı eğrilik tensör bileşenleri (3.29)'dan

$$R_{112}^1 = -R_{121}^1 = \frac{\gamma r (-\gamma r^4 + 2c\gamma r^2 + 4r^4 - 4cr^2 - 2c\gamma - 4r^2 + 4c + \gamma)}{2\varrho},$$

$$R_{221}^1 = \frac{\Upsilon}{4(c-1)\varrho},$$

$$R_{121}^2 = \frac{\omega}{\varrho}, \quad (3.57)$$

$$R_{221}^2 = -R_{212}^2 = -\frac{\gamma r(1+r) \left(\left(-\frac{\gamma}{2} + 2\right) r^2 + \left(c - \frac{1}{2}\right) \gamma - 2c \right) (r-1)}{\varrho},$$

olarak bulunur. (3.57)'deki ϱ , Υ ve ω tanımları da

$$\varrho = (c^2 - 4r^2 + 2c + 1) (-\gamma r^2 + c\gamma + 4r^2 - 2c - 2)^2, \quad (3.58)$$

$$\Upsilon = \gamma (r^2 - 1) (2\gamma r^4 - 5c\gamma r^2 - 8r^4 + 2c^2\gamma + 12cr^2 + \gamma r^2 - 4c^2 + c\gamma + 4r^2 - 4c - \gamma), \quad (3.59)$$

$$\omega = ((\gamma - 2)c^2 + (\gamma r^2 + \gamma - 4)c - 3\gamma r^2 + 8r^2 - 2) \left((\gamma - 2)c - \frac{\gamma r^2}{2} + 2r^2 - \frac{\gamma}{2} \right), \quad (3.60)$$

şeklindedir. Ricci tensör bileşenleri ise (3.30)'dan aşağıdaki gibi hesaplanır:

$$R_{11} = \frac{\omega}{\lambda},$$

$$R_{12} = R_{21} = -\frac{(-\gamma r^4 + 2c\gamma r^2 + 4r^4 - 4cr^2 - 2c\gamma - 4r^2 + 4c + \gamma) \gamma r}{2\lambda}, \quad (3.61)$$

$$R_{22} = -\frac{\Upsilon}{4(c-1)\lambda}.$$

Son olarak (3.31)'den, Ricci skaleri için $r = r_0$ ve $c = c_0$ denge değerleri cinsinden aşağıdaki basit ifadeye ulaşılır:

$$R = \frac{(-\gamma r^2 + 2c\gamma + 4r^2 - 4c - \gamma)(r^2 - 1)}{((c - r^2)\gamma + 4r^2 - 2c - 2)^2}. \quad (3.62)$$

(3.62)'de elde edilen ifadenin kritik sıcaklık yakınlığında incelenebilmesi için düzen parametrelerinin denge durumunda (r_0, c_0) geçerli olan aşağıdaki seri açılımları kullanılır:

$$r_0 = \gamma\nu - \frac{1}{3}\gamma^3\nu^3 + \dots, \quad (3.63)$$

$$c_0 = 1 - \left(\frac{\gamma - 2}{\gamma - 1}\right) \left[1 - \gamma \left(\gamma - \frac{2}{3}\right) \nu^2 + \dots\right]. \quad (3.64)$$

Burada ν Bethe uzun menzil düzen parametresi olup kritik sıcaklıkla (θ_C)

$$\frac{2}{3}(\gamma - 1)\nu^2 = \frac{t'}{\theta_C}, \quad (3.65)$$

formülü vasıtasıyla ilişkilendirilir. Burada $t' = \frac{\theta_C - \theta}{\theta_C}$ kritik sıcaklıktan uzaklığı temsil eder. θ_C 'nin hemen altında (3.63) ve (3.64)'ün (3.62)'de kullanılmasıyla

$$R = \frac{9}{4} \frac{1}{\gamma^2(\gamma - 2)\nu^4} \left(1 + 2\gamma \left[\gamma^2 - \gamma + \frac{2}{3}\right] \nu^2 + \dots\right), \quad (3.66)$$

serisi bulunur. (3.66) eğriliği, $\gamma = 2$ değeri hariç tüm sonlu rakamlarda daima pozitif bir sayı olup sıcaklık değeri θ_C 'ye yaklaşırken $(\nu \rightarrow 0)$ sonsuza ıraksamaktadır $(R \rightarrow \infty)$.

4. BULGULAR VE TARTIŞMA

Faz geçişi meydana gelen spin sistemlerinin TG çerçevesinde incelenebilmesi için bir termodinamik parametre uzayının belirlenmesi büyük önem taşır. Bu bölümde önce, tek örgülü spin-1 Blume-Capel modeli ve iki alt örgülü karma spin $(\frac{1}{2}, 1)$ Ising ferromanyetik sistemi için en uygun termodinamik parametre uzayı seçimi yapılarak metrik yazılması gösterildi. Daha sonra, her iki spin sistemi için düzen parametreleri cinsinden Ricci skalerleri türetilerek davranışları incelendi.

4.1. Spin-1 Blume-Capel Modelinin Termodinamik Geometri Özellikleri

Spin-1 BC modelinin faz geçişi yakınlarındaki termodinamik geometri özellikleri, Kesim 3.3.'deki bilgilerden yararlanarak Ruppeiner metriği ile formülize edilebilir. Spin-1 Ising modellerinde iki-boyutlu bir parametre uzayının belirlenmesi, termodinamik potansiyel seçimi ve bu potansiyele uygun metrik yazılması ile ilgili detaylı bilgi Alata (2022) tarafından verildiğinden aşağıda, BC modelinin TG kullanılarak incelenmesi sadece (m, q) uzayında Ruppeiner metriği yazılarak yapılacaktır. Dolayısıyla, önce (3.17) eşitliğinden

$$d\tau^2 = g_{11}(m, q)dm^2 + 2g_{12}(m, q)dmdq + g_{22}dq^2. \quad (4.1)$$

metriği yazılır. (4.1)'deki metrik tensör bileşenleri, (3.4) eşitliği yardımı ile (3.51)'deki gibi Ruppeiner (1995) formalizminde şöyle hesaplanır:

$$g_{11} = -\frac{1}{\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial m^2} = \frac{m^2 - q^2 + \theta q}{\theta (m^2 - q^2)},$$

$$g_{12} = g_{21} = -\frac{1}{\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial m \partial q} = -\frac{m}{m^2 - q^2}, \quad (4.2)$$

$$g_{22} = -\frac{1}{\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial q^2} = \frac{m^2 - q}{(q - 1)(m^2 - q^2)}.$$

(4.2) eşitlikleri (3.28)'de kullanılırsa Christoffel sembolleri

$$\Gamma_{11}^1 = -\frac{\theta(q+1)m}{A},$$

$$\Gamma_{12}^1 = \Gamma_{21}^1 = \frac{\theta(m^2 + q)}{\mathbf{A}},$$

$$\Gamma_{22}^1 = -\frac{(m^2 - 1)\theta m}{(q - 1)\mathbf{A}},$$

$$\Gamma_{11}^2 = \frac{(q - 1)(m^2 + q^2 - q\theta)}{\mathbf{A}}, \quad (4.3)$$

$$\Gamma_{21}^2 = \Gamma_{12}^2 = -\frac{m(q - 1)(2q - \theta)}{\mathbf{A}},$$

$$\Gamma_{22}^2 = -\frac{m^4 - 3m^2q^2 + m^2q\theta + 2m^2q + 2q^3 - 2q^2\theta - m^2 - q^2 + q\theta}{(q - 1)\mathbf{A}},$$

şeklinde bulunur. Notasyonu basitleştirmek amacıyla kullanılan $\mathbf{A}$ sembolü için aşağıdaki tanım yapıldı:

$$\mathbf{A} = 2(m^2 - q + \theta)(m + q)(m - q). \quad (4.4)$$

Sonra, sıfırdan farklı eğrilik tensör bileşenleri

$$R_{112}^1 = -R_{121}^1 = -\frac{(m^2 + 2q - \theta - 1)\theta m}{\mathbf{B}},$$

$$R_{212}^1 = -R_{221}^1 = \frac{\theta(m^2 - q)(m^2 + 2q - \theta - 1)}{(q - 1)\mathbf{B}},$$

$$R_{121}^2 = -R_{112}^2 = \frac{(m^2 + 2q - \theta - 1)(m^2 - q^2 + q\theta)}{\mathbf{B}}, \quad (4.5)$$

$$R_{221}^2 = -R_{212}^2 = -\frac{(m^2 + 2q - \theta - 1)\theta m}{\mathbf{B}},$$

olarak bulunur ve burada $\mathbf{B}$ sembolü

$$\mathbf{B} = 4(m^2 - q + \theta)^2(m^2 - q^2), \quad (4.6)$$

ile tanımlanır. Ricci tensör bileşenleri ise

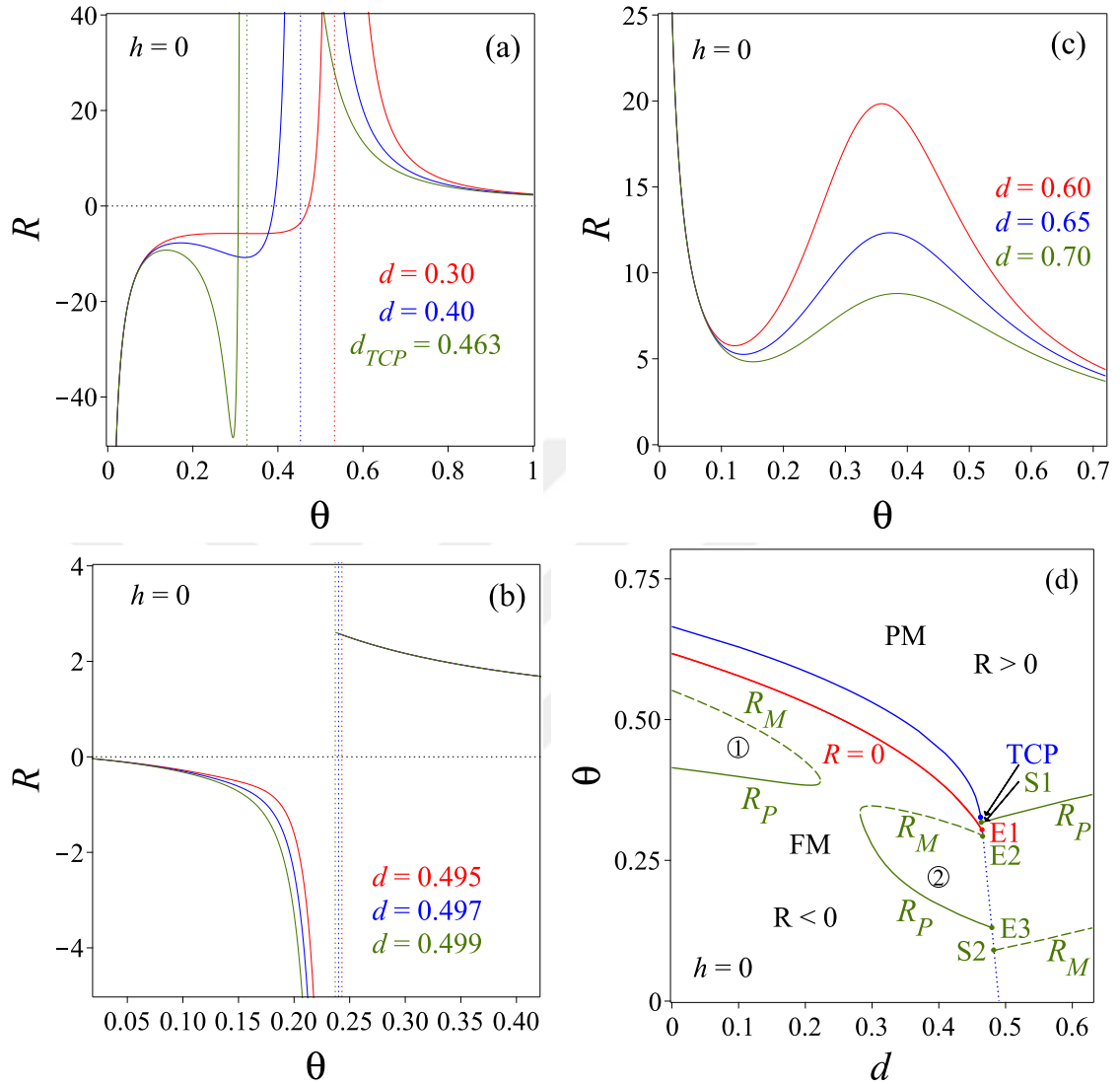
$$\begin{aligned}
R_{11} &= \frac{(m^2 + 2q - \theta - 1)(m^2 - q^2 + q\theta)}{\mathbf{B}}, \\
R_{12} = R_{21} &= -\frac{(m^2 + 2q - \theta - 1)\theta m}{\mathbf{B}}, \\
R_{22} &= \frac{\theta(m^2 - q)(m^2 + 2q - \theta - 1)}{(q - 1)\mathbf{B}},
\end{aligned} \tag{4.7}$$

şeklindedir. Son olarak, Ricci tensör bileşenlerinden Ricci skaleri, m ve q cinsinden

$$R(m, q) = -\frac{1}{2} \frac{\theta(m^2 - \theta + 2q - 1)}{(m^2 + \theta - q)^2}, \tag{4.8}$$

şeklinde türetilir. Yapılan eğrilik hesaplamalarında öz-uyumlu denklemlerin ((3.7) ve (3.8)) çözümleri (4.8)'deki Ricci skalerine yansıtılır.

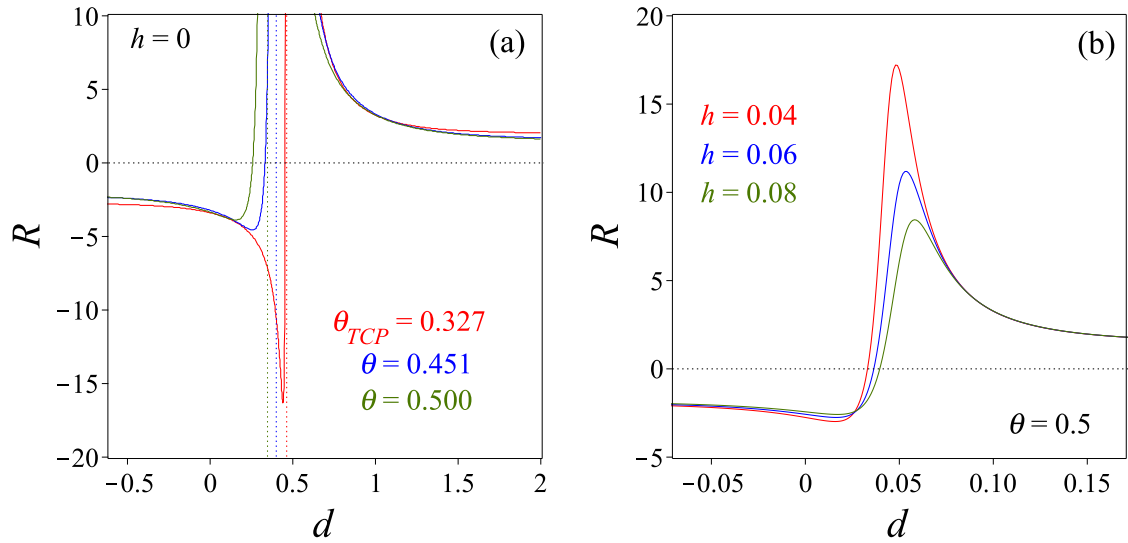
R 'nin indirgenmiş sıcaklık θ 'nın bir fonksiyonu olarak değişimi, ikinci-derece faz geçişi, birinci-derece faz geçişi ve herhangi bir faz geçişinin olmadığı çeşitli d değerleri için sırasıyla Şekil 4.1 (a)-(c)'de gösterildi. Şekil 4.1 (a)'ya göre, $d \leq 0.463$ seçildiğinde FM fazında R çoğunlukla negatiftir. Tüm eğriler bu fazda çok düşük sıcaklıklarda ($\theta \rightarrow 0$) d 'nin değerinden bağımsız olarak $R \propto -\theta^{-1}$ kuralına uygun şekilde $-\infty$ 'a ıraksar. Bu ıraksama özelliği, m ve q düzen parametrelerinin doyum değerlerinin ($m = q = 1$) (4.8) eşitliğinde yazılmasıyla doğrulanabilir. Öte yandan, Ricci eğriliği R artan sıcaklıkla yükselerek bir maksimum veya pik (R_P) değerini geçtikten sonra, azalmaya başlar ve $d_{TCP} = 0.463$ için $\theta_M \approx 0.295$ sıcaklığında minimum bir değere ($R_M \approx -48.52$) ulaşır. θ 'daki daha fazla artış $\theta_{SC} \approx 0.3069$ 'da bir işaret değişikliğine neden olur. Ardından, $R > 0$ bölgesinde üçlü kritik nokta sıcaklığı ($\theta_{TCP} \approx 0.327$) yakınında hızlı bir artış ile $R \rightarrow +\infty$ 'a doğru bir eğilim gözlenir. Aynı şekilde, mavi eğri ile gösterilen $d = 0.40$ değeri için, FM fazında bir maksimum noktasını geçtikten sonra bir minimum ($\theta_M \approx 0.323$, $R_M \approx -10.79$) yapar ve bu minimum TCP durumu ile karşılaştırıldığında daha geniş ve daha az derindir. İşareti $\theta_{SC} \approx 0.3905$ 'de negatiften pozitive değiştikten sonra, $\theta_C \approx 0.453$ civarında $+\infty$ 'a doğru çok hızlı bir ıraksama meydana gelir. Kırmızı eğri ($d = 0.30$) için ise minimum ve maksimum noktalarının daha da küçüldüğü görülür ($\theta_M \approx 0.347$, $R_M \approx -5.78$). Ayrıca, tüm eğrilerin paramanyetik fazda daha yüksek sıcaklıklarda d 'den bağımsız hale geldiği anlaşılar. Bir başka davranış da, $0.463 < d < 0.50$



Şekil 4.1. BC modelinde, (a)-(c) farklı d değerleri için Ricci skaları R 'nin indirgenmiş sıcaklık θ 'ya göre değişimi. Düşey renkli ve noktalı çizgiler faz dönüşüm sıcaklıklarını gösterir. (d) Sistemin (d, θ) düzlemindeki geometrik faz diyagramı: Mavi sürekli eğri ikinci-derece faz geçiş eğrisini, mavi noktalı eğri birinci-derece faz geçiş eğrisini, kırmızı eğri $R = 0$ eğrisini, yeşil sürekli ve yeşil kesikli eğriler sırasıyla R_P ve R_M 'nin yerleşimlerini göstermektedir. $h = 0$

durumunda seçilen d değerleri için ortaya çıkan eğriler de gösterildi (Şekil 4.1 (b)). Burada, Ricci skalerinin birinci-dereceden faz geçiş sıcaklığında aniden işaret değiştirerek FM fazında $R < 0$ 'dan PM fazında $R > 0$ 'a dönüştüğü görülmektedir. Şekil 4.1 (b)'de ikinci bir özellik olarak, faz geçiş sıcaklıklarının altında R 'nin davranışının d 'ye bağlı olması ve faz geçiş sıcaklıklarının hemen üzerinde ise d 'den tamamen bağımsız olması gösterilebilir. Şekil 4.1 (c)'de ise, $0.5 \leq d \leq 1.0$ aralığında seçilen d değerleri için pürüzsüz eğriler ortaya çıkar. Eğriler ilk önce, PM fazında R değeri azalarak bir minimum oluşturur. Sonra sıcaklığın artması ile bir maksimum yapar ve yeniden azalarak PM faz bölgesinde ilerler. d arttıkça maksimumların küçüldüğü ve daha yüksek sıcaklıklara doğru kaydığı görülür. Diğer taraftan, Şekil 4.1 (a)'daki eğrilerin R_P ve R_M değerleri geometrik faz diyagramlarında (GFD) sırasıyla eğrilik maksimum ve minimum çizgilerini belirler. Buna göre, Şekil 3.4'deki faz diyagramına $R = 0$, R_P ve R_M eğrileri ilave edilerek modelin geometrik faz diyagramı Şekil 4.1 (d)'deki gibi oluşturuldu. Diyagrama bakıldığında $R = 0$ eğrisi, mavi ile gösterilmiş olan ikinci-derece faz geçiş sıcaklığı çizgisine oldukça yakın bir konumda FM fazını iki bölgeye ayırır ve birinci-derece faz geçiş çizgisi üzerinde bulunan E1 noktasında ($\theta_{E1} = 0.304$ ve $d_{E1} = 0.465$) sonlanır. R niceliği, (d değeri sabit alınarak sıcaklık artışıyla) $R = 0$ eğrisi üzerinde işaretini negatiften ($R < 0$) pozitif ($R > 0$) değiştirir ve bu olaya "geometrik faz geçişi" denir (Brody ve Hook 2008). Diğer dikkat çekici nokta, $R = 0$ eğrisi altında kalan bölgede R_M ve R_P eğrileri uç uca eklenerek iki ayrı yarım halka oluşturmaktadır. Birinci halka $0 \leq d \leq 0.2228$ aralığında, R_P ve R_M eğrilerinin aynı d değerinde ($d = 0.2228$) birleşmesiyle oluşurken, ikinci halka $0.282 \leq d \leq 0.48$ aralığında, R_P ve R_M ekstremumları yeniden belirgin hale gelerek kendini gösterir. İkinci halkanın R_M ve R_P ekstremumları, birinci-derece faz geçiş çizgisinde sırasıyla E2 ve E3 noktalarında son bulur. Bir başka R_P ve R_M çizgileri, yine birinci-derece faz geçiş çizgisi üzerinde sırasıyla S1 ve S2 noktalarından başlayarak PM fazı ($R > 0$ bölgesinde) içerisinde yüksek sıcaklıklara doğru lineer olarak uzanır.

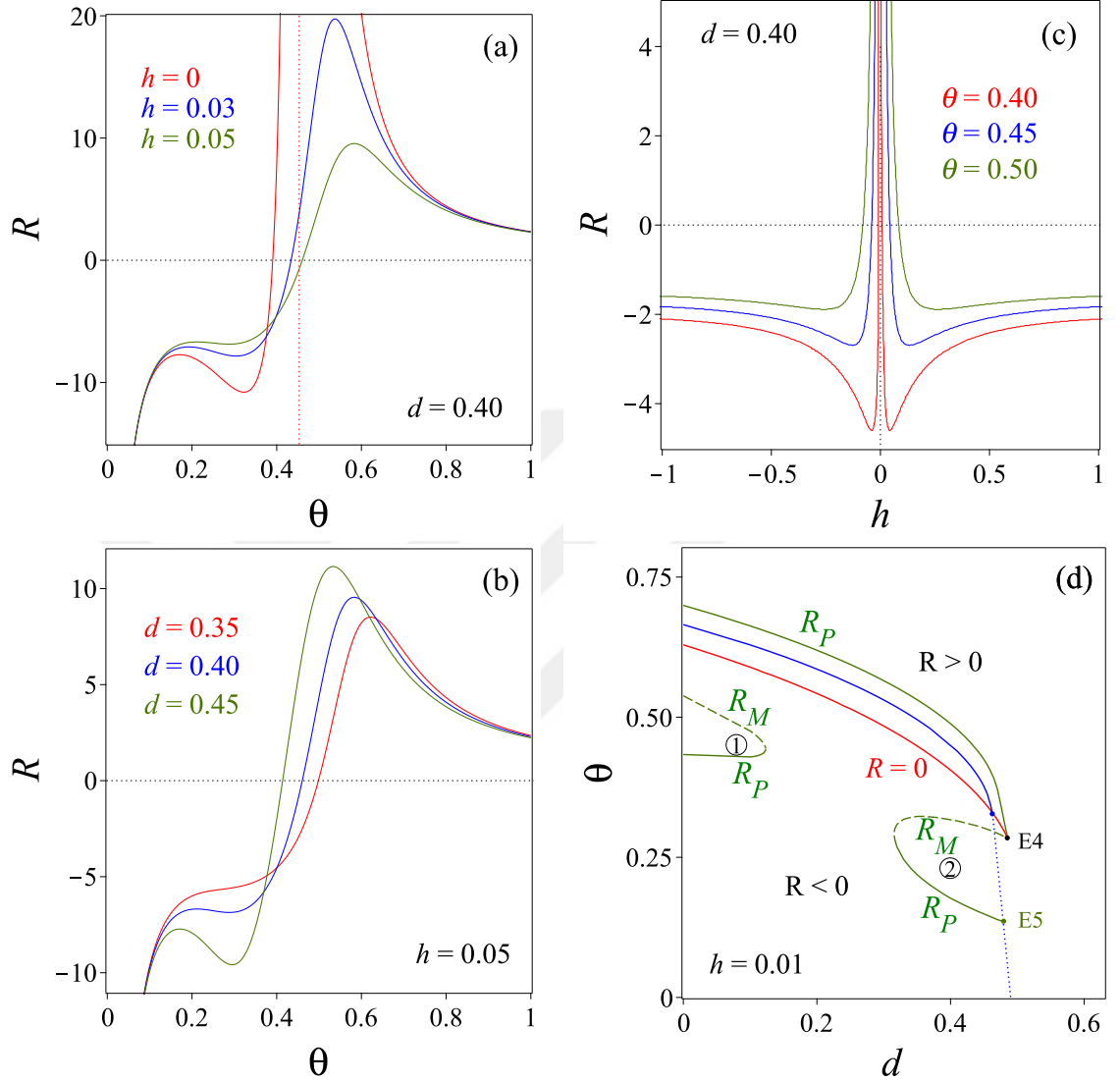
Şekil 4.2'de ise, R 'nin indirgenmiş kristal alan d 'ye göre davranışı sergilendi. Şekil 4.2 (a)'ya göre, manyetik alanın bulunmadığı ve $\theta_{TCP} \geq 0.327$ olduğu durumda R skaleri d 'nin artışıyla şu değişikliklere uğrar: (1) $R < 0$ bölgesinde azalarak bir minimum yapar, (2) daha sonra $R > 0$ bölgesine geçerek θ_{TCP} ve θ_C civarında hızlı bir şekilde $+\infty$ 'a iraksar, (3) PM fazında, küçülerek $R = 0$ çizgisine doğru ilerler. Bu sonuçlar,



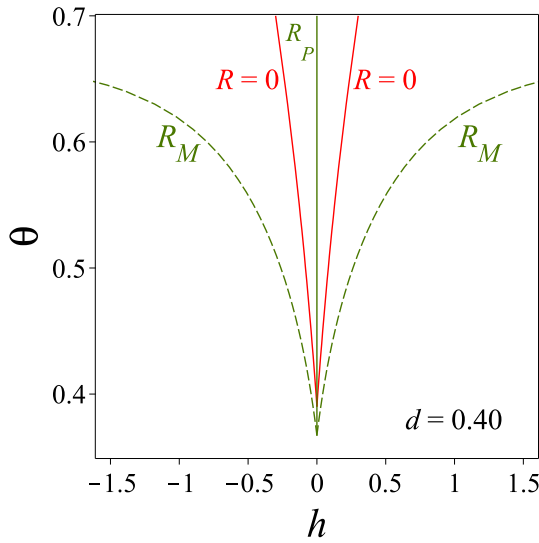
Şekil 4.2. BC modelinde, (a) $h = 0$ için farklı θ değerlerinde, (b) $\theta = 0.5$ için farklı h değerlerinde R 'nin d 'ye göre değişimi. Düşey renkli ve noktalı çizgiler faz geçiş noktalarına, yatay noktalı çizgiler $R = 0$ durumuna karşılık gelir

Şekil 4.1 (a) ile uyumludur. Şekil 4.2 (b)'de ise, $\theta = 0.5$ için R 'nin d 'ye göre değişimi üç farklı h değerinde görüntülendi. Buna göre, R niceliği d 'nin artışıyla birlikte önce bir minimum yapar ve sonra bir tepe noktasını geçerek $R = 0$ çizgisine yaklaşır. Ayrıca, her artan h değerlerinde tepe noktaları küçülür ve daha yüksek d değerlerine kayar.

R 'nin $h \neq 0$ olduğu durumlar için sıcaklık ile gösterdiği davranış, Şekil 4.3 (a) ve (b)'de sunuldu. Her iki şekilden de, dış manyetik alanın Şekil 4.1 (a)'daki tekillikleri yok ettiği ve pürüzsüz eğrilerin ortaya çıktığı görülür. Bu eğrilerin iki önemli özelliği vardır: Birincisi, kritik nokta üzerinde geniş bir maksimum R_P ikincisi ise kritik noktanın altında bir minimum R_M meydana gelmesidir. Oluşan bu ekstremumların konumları, yükseklikleri ve derinlikleri, manyetik alanın şiddetine ve sistemin özelliklerini belirleyen d değerlerine bağlıdır. Örneğin, Şekil 4.3 (a)'da h manyetik alanı artarken R_P ve R_M 'ler küçülürler ve yüksek sıcaklıklara doğru kayarlar. Şekil 4.3 (b)'de ise, d 'nin azalan değerlerinde bu kaymalar ve büyüklüklerindeki azalmalar oluşur. Bu grafiklere ilave olarak, Şekil 4.3 (c)'de $d = 0.40$ değeri kullanılarak farklı sıcaklıklarda R 'nin h 'ye göre değişimi elde edildi. Şekle göre, tüm eğriler h 'nin bir çift fonksiyonu olup R niceliği manyetik alanın yönelimine bağlı değildir. Şekil 4.3 (d)'de $h = 0.01$ değeri için elde edilen (d, θ) diyagramı verildi. Bu diyagramda, manyetik alan varlığında ikinci-derece faz geçiş çizgi-



Şekil 4.3. BC modelinde, (a) $d = 0.40$ için $h = 0$ ve bazı h değerleri seçilerek ve (b) $h = 0.05$ için farklı d değerleri seçilerek elde edilen $R - \theta$ eğrileri, (c) $d = 0.40$ için farklı θ değerleri seçilerek elde edilen $R - h$ eğrileri, (d) $h = 0.01$ durumunda $R = 0$, R_P ve R_M eğrilerinin (d, θ) düzlemindeki yerleşimleri. Kırmızı sürekli eğri $R = 0$ eğrisini, yeşil sürekli ve yeşil kesikli eğriler sırasıyla R_P ve R_M 'nin yerleşimini göstermektedir



Şekil 4.4. BC modelinde, $R = 0$, R_P ve R_M eğrilerinin (h, θ) düzlemindeki yerleşimleri. Kırmızı eğriler $R = 0$ eğrilerini, yeşil sürekli ve yeşil kesikli eğriler sırasıyla R_P ve R_M 'nin yerleşimlerini göstermektedir. $d = 0.40$

sinin hemen üzerinde ortaya çıkan R_P eğrisi E4 noktasında son bulur. Hemen altında ise Şekil 4.1 (d)'de olduğu gibi $R = 0$ eğrisi ile birlikte, R_M ve R_P eğrilerinin oluşturduğu iki yarım halka yer alır. Bunlardan $R = 0$ çizgisi, yine E4 noktasında sonlanır. Sol taraftaki R_M ve R_P eğrileri $d = 0.1233$ değerinde uç uca eklenerek birinci yarım halka oluşurken, ikinci yarım halka $d = 0.3158$ değerinden başlayarak sağ taraftaki R_M ve R_P eğrilerinin birbirinden ayrılmasıyla oluşur. İkinci yarım halkayı meydana getiren R_M ve R_P eğrileri sırasıyla E4 ve E5 noktalarında sonlanırlar. Şekil 4.3 (d)'deki faz sınır çizgileri, Şekil 4.1 (d) ile karşılaştırılabilirliği için verildi.

Son olarak, Şekil 4.4'de, Şekil 4.3 (c)'deki eğrilerin ekstremum noktalarının ve işaret değiştirdikleri h değerlerinin yerleşimleri (h, θ) düzleminde gösterildi. Bunlar, $d = 0.40$ için bir kritik sıcaklık değerlerinden başlar ve (h, θ) düzleminde $h < 0$ ve $h > 0$ bölgelerine uzanır.

4.2. Karma Spin $(\frac{1}{2}, 1)$ Ising Modelinin Termodinamik Geometri Özellikleri

Spin sistemleri için termodinamik Ricci skaleri R yoğunlukla iki-boyutlu parametre uzayı dikkate alınarak birçok kez incelenmiştir (Erdem 2018a,b; Erdem ve Alata 2020). Ancak, R 'nin üç-boyutlu termodinamik geometrideki hesaplamaları üzerine fazla çalışma yapılmamıştır. Bu alt bölümde önce, karma spin $(\frac{1}{2}, 1)$ Ising sistemine ait serbest enerji ifadesinin bağlı olduğu θ , α , h , σ , m ve q nicelikleri arasından en uygun üç tanesi seçilerek oluşturulan bir üç-boyutlu termodinamik parametre uzayında metrik yazılması üzerinde durulacaktır.

Çizelge 4.1. Karma spin $(\frac{1}{2}, 1)$ Ising sisteminde, 8 farklı koordinat için termodinamik potansiyel tanımı

Koordinatlar	Potansiyel (f)
$(\theta, h, -\alpha)$	$e - \theta s$
$(m, h, -\alpha)$	$e - \theta s$
$(\sigma, h, -\alpha)$	$e - \theta s$
$(q, h, -\alpha)$	$e - \theta s$
(θ, m, q)	$e - \theta s - hm + \alpha q$
(θ, σ, m)	$e - \theta s - h\sigma - hm$
(θ, σ, q)	$e - \theta s - h\sigma + \alpha q$
(σ, m, q)	$e - \theta s - h\sigma - hm + \alpha q$

Bilindiği gibi, şimdiye kadar yapılan çalışmalarda, bir termodinamik uzay genellikle yoğun türden değişkenler cinsinden formülize edilmektedir (Ruppeiner 1995). Bu bağlamda, (3.12)'deki serbest enerji ifadesine göre, çok sayıda birbirlerinden farklı üç-boyutlu alt uzay bulunmaktadır. Bunlardan (θ, q, h) , $(\theta, m, -\alpha)$, (θ, m, h) , $(\theta, \sigma, -\alpha)$, (θ, σ, h) koordinatları için, Ruppeiner'ın metrik tanımına göre uygun bir termodinamik potansiyel olmadığı için metrik yazılamaz. Yine Ruppeiner'ın (1995) çalışması göz önüne alındığında, mevcut spin sistemi için metrik yazılabilecek koordinatlar ve bu koordinatlara uygun termodinamik potansiyeller Çizelge 4.1'de listelenmiştir. Dolayısıyla bu koordinatlar için Çizelge 4.2'de verilen metrikler elde edilir. Çizelge 4.3'deki metrik hesaplamalarından görüldüğü üzere, çizelgedeki ilk dört termodinamik parametre uzayı için hesapla-

nan g determinantları sıfırdır ve bu uzaylar için herhangi bir eğrilik hesaplanamamaktadır. (θ, m, q) ve (θ, σ, q) koordinatları seçildiği durumda $R = 0$ olur ve bu etkileşimin olmadığı düz bir uzaya karşılık gelir. (θ, σ, m) koordinatında R hesabı çok uzun matematiksel işlem gerektirmektedir. Dolayısıyla, seçilebilecek tek uzay (σ, m, q) uzayıdır.

Çizelge 4.2. Karma spin $(\frac{1}{2}, 1)$ Ising sisteminde, 8 farklı koordinat için metrik yazılması

Koordinatlar	Metrik ($d\tau^2$)
$(\theta, h, -\alpha)$	$\frac{1}{\theta} \left(\frac{\partial s}{\partial \theta} d\theta^2 + \frac{\partial m}{\partial h} dh^2 + \frac{\partial q}{\partial \alpha} d\alpha^2 \right)$
$(m, h, -\alpha)$	$\frac{1}{\theta} \left(\frac{\partial s}{\partial m} dm^2 + \frac{\partial m}{\partial h} dh^2 + \frac{\partial q}{\partial \alpha} d\alpha^2 \right)$
$(\sigma, h, -\alpha)$	$\frac{1}{\theta} \left(\frac{\partial s}{\partial \sigma} d\sigma^2 + \frac{\partial m}{\partial h} dh^2 + \frac{\partial q}{\partial \alpha} d\alpha^2 \right)$
$(q, h, -\alpha)$	$\frac{1}{\theta} \left(\frac{\partial s}{\partial q} dq^2 + \frac{\partial m}{\partial h} dh^2 + \frac{\partial q}{\partial \alpha} d\alpha^2 \right)$
(θ, m, q)	$-\frac{1}{\theta} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} d\theta^2 + 2 \frac{\partial^2 f}{\partial \theta \partial m} d\theta dm + 2 \frac{\partial^2 f}{\partial \theta \partial q} d\theta dq + 2 \frac{\partial^2 f}{\partial m \partial q} dm dq + \frac{\partial^2 f}{\partial m^2} dm^2 + \frac{\partial^2 f}{\partial q^2} dq^2 \right)$
(θ, σ, m)	$-\frac{1}{\theta} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} d\theta^2 + 2 \frac{\partial^2 f}{\partial \theta \partial \sigma} d\theta d\sigma + 2 \frac{\partial^2 f}{\partial \theta \partial m} d\theta dm + 2 \frac{\partial^2 f}{\partial \sigma \partial m} d\sigma dm + \frac{\partial^2 f}{\partial \sigma^2} d\sigma^2 + \frac{\partial^2 f}{\partial m^2} dm^2 \right)$
(θ, σ, q)	$-\frac{1}{\theta} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} d\theta^2 + 2 \frac{\partial^2 f}{\partial \theta \partial \sigma} d\theta d\sigma + 2 \frac{\partial^2 f}{\partial \theta \partial q} d\theta dq + 2 \frac{\partial^2 f}{\partial \sigma \partial q} d\sigma dq + \frac{\partial^2 f}{\partial \sigma^2} d\sigma^2 + \frac{\partial^2 f}{\partial q^2} dq^2 \right)$
(σ, m, q)	$-\frac{1}{\theta} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial \sigma^2} d\sigma^2 + 2 \frac{\partial^2 f}{\partial \sigma \partial m} d\sigma dm + 2 \frac{\partial^2 f}{\partial \sigma \partial q} d\sigma dq + 2 \frac{\partial^2 f}{\partial m \partial q} dm dq + \frac{\partial^2 f}{\partial m^2} dm^2 + \frac{\partial^2 f}{\partial q^2} dq^2 \right)$

Çizelge 4.3. Karma spin $(\frac{1}{2}, 1)$ Ising sisteminde, metrik bileşenleri ve termodinamik eğrilikler. Türevler denge durumlarında alınır

Koordinatlar	g_{11}	g_{12}	g_{13}	g_{23}	g_{22}	g_{33}	g	R
$(\theta, h, -\alpha)$	0	0	0	0	0	0	0	—
$(m, h, -\alpha)$	$-\frac{1}{\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial m^2}$	0	0	0	0	0	0	—
$(\sigma, h, -\alpha)$	$-\frac{1}{\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \sigma^2}$	0	0	0	0	0	0	—
$(q, h, -\alpha)$	$-\frac{1}{\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial q^2}$	0	$-\frac{1}{\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial q \partial \alpha}$	0	0	0	0	—
(θ, m, q)	0	$\frac{1}{\theta} \frac{\partial s}{\partial m}$	$\frac{1}{\theta} \frac{\partial s}{\partial q}$	$-\frac{1}{\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial m \partial q}$	$-\frac{1}{\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial m^2}$	$-\frac{1}{\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial q^2}$	$\neq 0$	0
(θ, σ, m)	0	$\frac{1}{\theta} \frac{\partial s}{\partial \sigma}$	$\frac{1}{\theta} \frac{\partial s}{\partial m}$	$-\frac{1}{\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \sigma \partial m}$	$-\frac{1}{\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \sigma^2}$	$-\frac{1}{\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial m^2}$	$\neq 0$	$\neq 0$
(θ, σ, q)	0	$\frac{1}{\theta} \frac{\partial s}{\partial \sigma}$	$\frac{1}{\theta} \frac{\partial s}{\partial q}$	0	$-\frac{1}{\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \sigma^2}$	$-\frac{1}{\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial q^2}$	$\neq 0$	0
(σ, m, q)	$-\frac{1}{\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \sigma^2}$	$-\frac{1}{\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \sigma \partial m}$	0	$-\frac{1}{\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial m \partial q}$	$-\frac{1}{\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial m^2}$	$-\frac{1}{\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial q^2}$	$\neq 0$	$\neq 0$

Daha sonra, (σ, m, q) uzayı için metrik tensör bileşenleri Çizelge 4.3'deki bilgiler ışığında (3.12) eşitliği kullanılarak şöyle hesaplandı (Ruppeiner 1995):

$$\begin{aligned}
 g_{11} &= \frac{1}{2(\sigma^2 - 1)}, \\
 g_{12} &= g_{21} = \frac{1}{\theta}, \\
 g_{13} &= g_{31} = 0, \\
 g_{22} &= \frac{q}{2(m^2 - q^2)}, \\
 g_{23} &= g_{32} = -\frac{m}{2(m^2 - q^2)}, \\
 g_{33} &= \frac{m^2 - q}{2(q - 1)(m^2 - q^2)}.
 \end{aligned} \tag{4.10}$$

Yukarıdaki metrik bileşenlerinin (3.28) tanımında kullanılmasıyla sıfırdan farklı Christoffel sembolleri aşağıdaki gibi elde edilir:

$$\begin{aligned}
 \Gamma_{11}^1 &= \frac{\sigma\theta^2}{(\sigma^2 - 1)\mathcal{A}}, \\
 \Gamma_{22}^1 &= -\frac{(q + 1)(\sigma^2 - 1)m\theta}{(m^2 - q^2)\mathcal{A}}, \\
 \Gamma_{23}^1 &= \Gamma_{32}^1 = \frac{\theta(\sigma^2 - 1)(m^2 + q)}{(m^2 - q^2)\mathcal{A}}, \\
 \Gamma_{33}^1 &= -\frac{\theta m(\sigma^2 - 1)(m^2 - 1)}{(m^2 - q^2)(q - 1)\mathcal{A}}, \\
 \Gamma_{11}^2 &= -\frac{2\theta\sigma(m^2 - q)}{(\sigma^2 - 1)\mathcal{A}}, \\
 \Gamma_{22}^2 &= \frac{(q + 1)m\theta^2}{2(m^2 - q^2)\mathcal{A}}, \\
 \Gamma_{23}^2 &= \Gamma_{32}^2 = -\frac{\theta^2(m^2 + q)}{2(m^2 - q^2)\mathcal{A}}, \\
 \Gamma_{33}^2 &= \frac{m\theta^2(m^2 - 1)}{2(m^2 - q^2)(q - 1)\mathcal{A}},
 \end{aligned} \tag{4.11}$$

$$\Gamma_{11}^3 = -\frac{2\theta m\sigma(q-1)}{(\sigma^2-1)\mathcal{A}},$$

$$\Gamma_{22}^3 = \frac{(4m^2\sigma^2 + 4q^2\sigma^2 + q\theta^2 - 4m^2 - 4q^2)(q-1)}{2(m^2 - q^2)\mathcal{A}},$$

$$\Gamma_{23}^3 = \Gamma_{32}^3 = -\frac{m(q-1)(8q\sigma^2 + \theta^2 - 8q)}{2(m^2 - q^2)\mathcal{A}},$$

$$\Gamma_{33}^3 = -\frac{\mathcal{B}}{2(m^2 - q^2)(q-1)\mathcal{A}},$$

şeklinde bulunur. Burada $\mathcal{A}$ ve $\mathcal{B}$ gösterimleri aşağıdaki gibidir:

$$\mathcal{A} = 4m^2\sigma^2 - 4q\sigma^2 - 4m^2 - \theta^2 + 4q, \quad (4.12)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{B} = & 4m^4\sigma^2 - 12m^2q^2\sigma^2 + 8m^2q\sigma^2 - m^2q\theta^2 + 8q^3\sigma^2 - 4m^4 + 12m^2q^2 \\ & - 4m^2\sigma^2 - 4q^2\sigma^2 + 2q^2\theta^2 - 8m^2q - 8q^3 - q\theta^2 + 4m^2 + 4q^2. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Daha sonra, yukarıdaki Christoffel sembolleri (3.29)'da yerine yazılarak sıfırdan farklı Riemann tensör bileşenleri

$$R_{112}^1 = -R_{121}^1 = \frac{4m\sigma\theta^2}{\mathcal{A}^2},$$

$$R_{113}^1 = -R_{131}^1 = -\frac{2\sigma\theta^2}{\mathcal{A}^2},$$

$$R_{212}^1 = -R_{221}^1 = \frac{(q+1)\theta^3\sigma m}{(m^2 - q^2)\mathcal{A}^2},$$

$$R_{213}^1 = -R_{231}^1 = R_{312}^1 = -R_{321}^1 = -\frac{\theta^3\sigma(m^2 + q)}{(m^2 - q^2)\mathcal{A}^2},$$

$$R_{223}^1 = -R_{232}^1 = -\frac{m\theta\mathcal{D}}{2(m^2 - q^2)\mathcal{A}^2},$$

$$R_{313}^1 = -R_{331}^1 = \frac{\theta^3\sigma m(m^2 - 1)}{(m^2 - q^2)(q-1)\mathcal{A}^2},$$

$$\begin{aligned}
R_{323}^1 &= -R_{332}^1 = \frac{\mathcal{C}}{(m^2 - q^2)(q - 1)\mathcal{A}^2}, \\
R_{121}^2 &= -R_{112}^2 = \frac{2\theta^3 \sigma m}{(\sigma^2 - 1)\mathcal{A}^2}, \\
R_{113}^2 &= -R_{131}^2 = \frac{\theta^3 \sigma}{(\sigma^2 - 1)\mathcal{A}^2}, \\
R_{221}^2 &= -R_{212}^2 = \frac{2(q + 1)(m^2 - q)m\sigma\theta^2}{(m^2 - q^2)\mathcal{A}^2}, \\
R_{321}^2 &= -R_{312}^2 = R_{231}^2 = -R_{213}^2 = -\frac{2\theta^2 \sigma (m^4 - q^2)}{(m^2 - q^2)\mathcal{A}^2}, \tag{4.14} \\
R_{223}^2 &= -R_{232}^2 = \frac{m\theta^2 ((\sigma^2 - 1)m^2 + 2q\sigma^2 - \sigma^2 + \theta^2/4 - 2q + 1)}{(m^2 - q^2)\mathcal{A}^2}, \\
R_{313}^2 &= -R_{331}^2 = -\frac{2\theta^2 \sigma m (m^2 - q)(m^2 - 1)}{(m^2 - q^2)(q - 1)\mathcal{A}^2}, \\
R_{323}^2 &= -R_{332}^2 = -\frac{(m^2 - q)((m^2 + 2q - 1)\sigma^2 - m^2 + \theta^2/4 - 2q + 1)\theta^2}{(m^2 - q^2)(q - 1)\mathcal{A}^2}, \\
R_{112}^3 &= -R_{121}^3 = -\frac{\sigma\theta(4m^2\sigma^2 + 4q\sigma^2 - 4m^2 + \theta^2 - 4q)(q - 1)}{(\sigma^2 - 1)\mathcal{A}^2}, \\
R_{113}^3 &= -R_{131}^3 = \frac{m\sigma\theta(4(m^2 - 1)\sigma^2 - 4m^2 - \theta^2 + 4)}{(\sigma^2 - 1)\mathcal{A}^2}, \\
R_{212}^3 &= -R_{221}^3 = -\frac{2\theta^2 m^2 \sigma (q^2 - 1)}{(m^2 - q^2)\mathcal{A}^2}, \\
R_{321}^3 &= -R_{312}^3 = R_{231}^3 = -R_{213}^3 = -\frac{2m\theta^2 (m^2 + q)(q - 1)\sigma}{(m^2 - q^2)\mathcal{A}^2},
\end{aligned}$$

$$R_{223}^3 = -R_{232}^3 = -\frac{\mathcal{E}}{4(m^2 - q^2)\mathcal{A}^2},$$

$$R_{313}^3 = -R_{331}^3 = -\frac{2\theta^2 m^2 \sigma (m^2 - 1)}{(m^2 - q^2)\mathcal{A}^2},$$

$$R_{323}^3 = -R_{332}^3 = -\frac{m\theta^2 ((m^2 + 2q - 1)\sigma^2 - m^2 + \theta^2/4 - 2q + 1)}{(m^2 - q^2)\mathcal{A}^2},$$

olarak bulunur. Yukarıdaki ifadelerde notasyonu basitleştirmek ve hesaplamaları kolaylaştırmak için kullanılan $\mathcal{C}$, $\mathcal{D}$ ve $\mathcal{E}$ gösterimleri sırasıyla şöyle tanımlandı:

$$\mathcal{C} = 2\theta(\sigma - 1)(\sigma + 1)(m^2 - q) \left[(m^2 + 2q - 1)\sigma^2 - m^2 + \frac{\theta^2}{4} - 2q + 1 \right],$$

$$\mathcal{D} = (\sigma^2 - 1)(4m^2\sigma^2 + 8q\sigma^2 - 4m^2 - 4\sigma^2 + \theta^2 - 8q + 4), \quad (4.15)$$

$$\mathcal{E} = (4m^2\sigma^2 + 8q\sigma^2 - 4m^2 - 4\sigma^2 + \theta^2 - 8q + 4)(4m^2\sigma^2 - 4q^2\sigma^2 - q\theta^2 - 4m^2 + 4q^2).$$

Ricci tensör bileşenleri ise (3.30) yardımıyla şu şekilde elde edilir:

$$R_{11} = -\frac{\sigma m \theta (4m^2\sigma^2 - 4m^2 - 4\sigma^2 - 3\theta^2 + 4)}{(\sigma^2 - 1)\mathcal{A}^2},$$

$$R_{12} = R_{21} = \frac{4m\sigma\theta^2}{\mathcal{A}^2},$$

$$R_{22} = \frac{\mathcal{F}}{4(m^2 - q^2)\mathcal{A}^2},$$

$$R_{13} = R_{31} = -\frac{2\sigma\theta^2}{\mathcal{A}^2}, \quad (4.16)$$

$$R_{23} = R_{32} = \frac{\mathcal{G}\theta^2}{4(m^2 - q^2)\mathcal{A}^2},$$

$$R_{33} = -\frac{\mathcal{I}\theta^2}{4(m^2 - q^2)(q - 1)\mathcal{A}^2}.$$

Burada $\mathcal{F}$, $\mathcal{G}$ ve $\mathcal{I}$

$$\begin{aligned}\mathcal{F} = & 16m^4\sigma^4 - 16q^2m^2\sigma^4 + 32m^2q\sigma^4 - 4m^2q\sigma^2\theta^2 - 32q^3\sigma^4 - 32m^4\sigma^2 + 32q^2m^2\sigma^2 \\ & - 16m^2\sigma^4 + 4m^2\sigma^2\theta^2 + 4mq\sigma\theta^3 + 16q^2\sigma^4 - 12q^2\sigma^2\theta^2 - 64m^2q\sigma^2 + 4m^2q\theta^2 \\ & + 4\sigma\theta^3m + 64q^3\sigma^2 + 4q\sigma^2\theta^2 - q\theta^4 + 16m^4 - 16q^2m^2 + 32m^2\sigma^2 - 4m^2\theta^2 \\ & - 32q^2\sigma^2 + 12q^2\theta^2 + 32m^2q - 32q^3 - 4q\theta^2 - 16m^2 + 16q^2,\end{aligned}\quad (4.17)$$

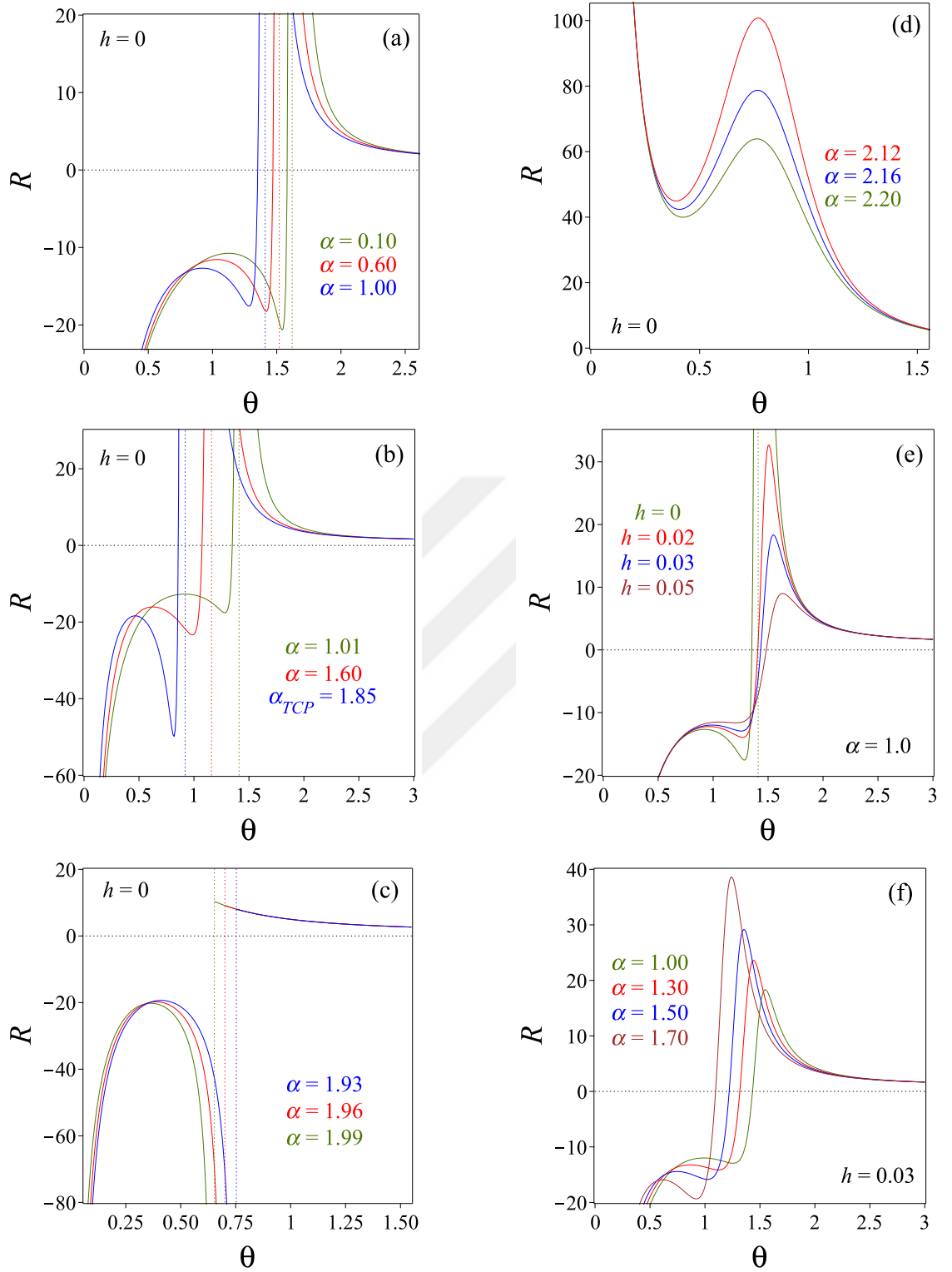
$$\mathcal{G} = 4m^3\sigma^2 - 4m^2\sigma\theta + 8mq\sigma^2 - 4m^3 - 4m\sigma^2 + m\theta^2 - 4q\sigma\theta - 8mq + 4m, \quad (4.18)$$

$$\begin{aligned}\mathcal{I} = & 4m^4\sigma^2 - 4m^3\sigma\theta + 4m^2q\sigma^2 - 4m^4 - 4m^2\sigma^2 + m^2\theta^2 - 8q^2\sigma^2 - 4m^2q \\ & + 4m\sigma\theta + 4q\sigma^2 - q\theta^2 + 4m^2 + 8q^2 - 4q,\end{aligned}\quad (4.19)$$

şeklindedir. Kesim 4.1.'de olduğu gibi, Ricci tensöründen yararlanarak R skaleri düzen parametreleri cinsinden aşağıdaki şekilde elde edildi:

$$R(\sigma, m, q) = \frac{\theta^2 (4m^2\sigma^2 - 12m\sigma\theta + 8q\sigma^2 - 4m^2 - 4\sigma^2 + \theta^2 - 8q + 4)}{(4m^2\sigma^2 - 4q\sigma^2 - 4m^2 - \theta^2 + 4q)^2}. \quad (4.20)$$

Önce, R 'nin indirgenmiş sıcaklığa bağlı değişimi, α 'nın birinci- ve ikinci-derece faz geçişleri ile, TCP noktasına karşılık geldiği ve herhangi bir faz geçişinin meydana gelmediği birkaç değeri için Şekil 4.5 (a)-(d)'de gösterildi. Şekil 4.1'de olduğu gibi, şekiller sıfır manyetik alanda elde edilmiş olup, düşey renkli noktalı çizgiler faz geçiş sıcaklıklarını ve yatay noktalı çizgiler Ricci eğriliğinin işaret değiştirdiği noktaları (yani $R = 0$) temsil etmektedir. Şekil 4.5 (a)'da, $0 \leq \alpha \leq 1$ için düzenli fazda eğrilik skaleri R çoğunlukla negatiftir ve aynı zamanda sistem bu fazdayken çok düşük sıcaklıklarda (yani $\theta \rightarrow 0$) α 'ya zayıf bağlı olacak şekilde, $R \rightarrow -\infty$ ıraksaması meydana gelir. BC modelinde de yapıldığı gibi düzen parametrelerinin doyum değerlerinin ($\sigma = m = q = 1$) (4.20)'de yerine yazılması ile $\theta \rightarrow 0$ limitinde $R \rightarrow -\infty$ olduğu doğrulandı. Diğer taraftan, R eğriliği, sıcaklığın artmasıyla bir tepe noktasını geçtikten sonra azalır, $\alpha = 0.10$ için (yeşil eğri) $\theta_M \approx 1.54$ değerinde minimuma ($R_M \approx -20.631$) ulaştıktan sonra sıcaklık



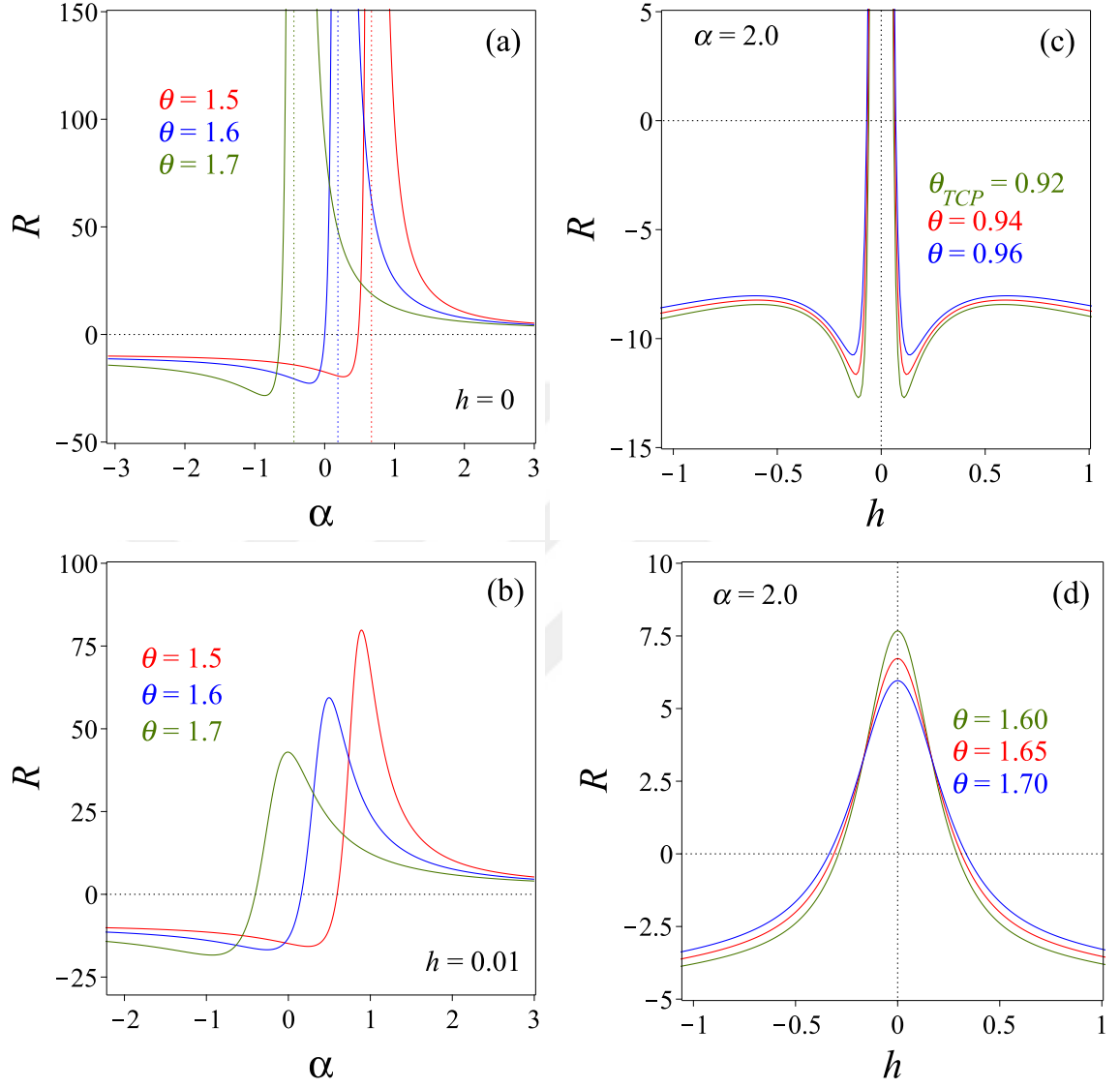
Şekil 4.5. Karma spin modelinde, (a)-(d) $h = 0$ için farklı α değerlerinde, (e) $\alpha = 1.0$ için $h = 0$ ve farklı manyetik alan değerlerinde, (f) $h = 0.03$ için farklı α değerlerinde elde edilen R 'nin θ 'ya göre değişimi. Düşey renkli ve noktali çizgiler faz geçiş sıcaklıklarına ve yatay noktali çizgiler $R = 0$ 'a karşılık gelir

artışının devam etmesiyle $\theta_{SC} \approx 1.5808$ 'de işaret değiştirerek kritik nokta yakınlarında ($\theta_C \approx 1.62$) hızlı bir artış ile $+\infty$ 'a ıraksar. Düzensiz faz bölgesinde ise R her zaman pozitif değere sahiptir ($R > 0$). Aynı şekilde, kırmızı ile gösterilen eğride ($\alpha = 0.60$), FM fazındaki minimum ($\theta_M \approx 1.42$, $R_M \approx -18.28$) yeşil eğridekine göre daha geniş ve küçüktür. Kırmızı eğri, $\theta_{SC} \approx 1.47$ 'de işaretini değiştirdikten sonra ıraksama $\theta_C \approx 1.52$ değeri yakınlarında gerçekleşir. Mavi eğriye ($\alpha = 1$) göre, düzenli fazdaki minimumun ($\theta_M \approx 1.28$, $R_M \approx -17.57$) diğer eğrilerle karşılaştırıldığı zaman daha da genişlediği ve küçüldüğü görülür. Bu son eğri, $\theta_{SC} \approx 1.351$ 'de pozitif değerler almaya başlayarak $\theta_C \approx 1.41$ civarında $+\infty$ 'a ıraksar. Şekil 4.5 (b)'de $\alpha_{TCP} = 1.85$ için elde edilen mavi eğri, θ 'nın artışıyla bir tepe noktasını geçtikten sonra $\theta_M = 0.82$ değerinde minimuma ($R_M \approx -49.83$) ulaşır. Sonra sıcaklık arttıkça $\theta_{SC} \approx 0.856$ 'da işaret değiştirerek üçlü kritik nokta yakınlarında ($\theta_{TCP} \approx 0.92$) hızlıca artarak öncekiler gibi sonsuza ıraksar. Aynı zamanda mavi eğrinin, sırasıyla $\alpha = 1.01$ ve $\alpha = 1.60$ değerlerinde çizilen yeşil ve kırmızı eğriler ile karşılaştırması yapıldığında Şekil 4.5 (a)'nın aksine daha derin olduğu görülür. Başka bir ifadeyle, Şekil 4.5 (a)'da α değeri büyüdükçe minimum küçülürken, (b)'de α büyüdükçe minimum derinleşir. R 'nin her iki şekildeki ıraksama davranışı ve FM fazındaki R_M özelliği daha önce yapılan birçok çalışmada bulunan iki-boyutlu düzen parametresi uzayı sonuçları ile uyumludur (Alata vd 2023). Ayrıca, Şekil 4.5 (a) ve (b)'de elde edilen sonuçlar BC modelinde gösterilen Şekil 4.1 (a) ile de uyum içerisindedir. Şekil 4.5 (c) ise, aynı spin sisteminde birinci-derece FM-PM faz geçişi gerçekleşirken R 'nin θ 'ya bağlılığını gösterir. Tüm eğrilerde, θ 'nın çok düşük değerlerinde az da olsa α 'ya bağımlılık bulunur. Sıcaklığın artmasıyla birlikte eğrilik negatif bölgede bir tepe noktasını geçtikten sonra azalarak FM-PM faz geçişi sırasında aniden işaretini değiştirir ve düzensiz fazda pozitif bölgeye atlar. Atlamanın meydana geldiği bu sıcaklık değerinden sonra R 'nin davranışı α 'dan tamamen bağımsız olup Şekil 4.1 (b) ile olan benzerliği dikkat çeker. Ricci skalerinin bu özelliği de daha önce yapılan birçok çalışmada gösterilmiştir (Erdem ve Alata 2020; Erdem 2020, 2022). Şekil 4.5 (d)'de, $\alpha \geq 2$ için R düzensiz fazda daima pozitifdir. Ayrıca, $\theta \rightarrow 0$ limitinde R 'nin α 'dan bağımsız olarak $+\infty$ 'a ıraksadığı gözlenir. $\theta = 0$ 'daki $R \rightarrow +\infty$ 'a ıraksama özelliği de, $\sigma = m = q = 1$ değerlerinin (4.20)'de yazılmasıyla doğrulandı ($R \approx 12/\theta^2$). ıraksamadan başka R , sıcaklık artışıyla önce bir minimum yapar ve sonra bir tepe noktasını geçtikten sonra tekrar azalarak $R = 0$

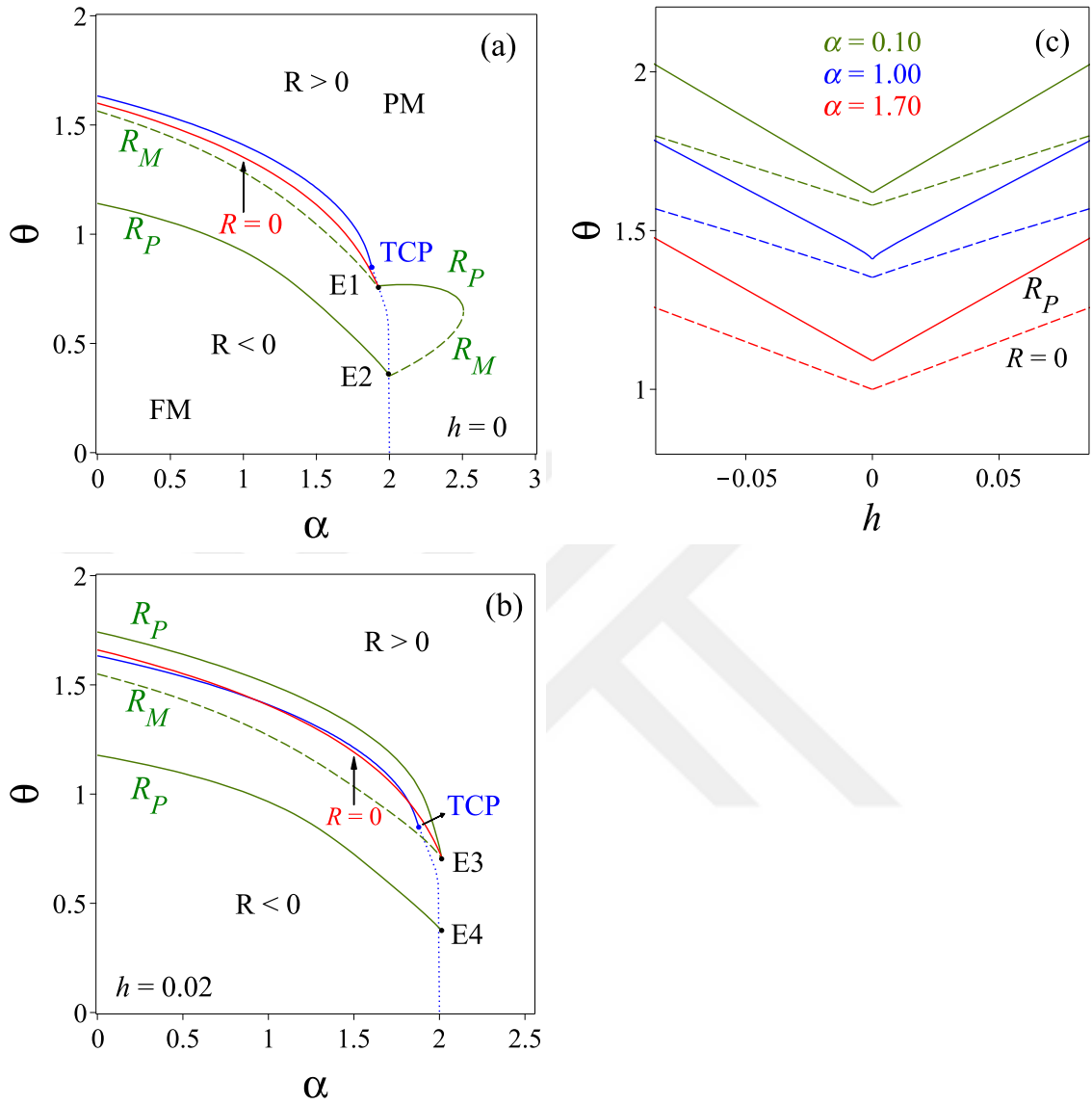
çizgisine doğru yaklaşır. Benzer şekilde, $h \neq 0$ iken Şekil 4.5 (a)'daki ıraksama tekilliği yok olduğu için içerisinde sadece maksimum ve minimumların olduğu pürüzsüz eğriler ortaya çıkar (Şekil 4.5 (e)). Bu eğrilerdeki en düşük ve en yüksek noktalar, h artarken küçülerek yüksek sıcaklıklara doğru kayar. Fakat, h sabit alındığında α 'nın artan değerlerinde R_M ve R_P 'ler daha düşük sıcaklıklara doğru kaymakta ve büyüklükleri değişmektedir (Şekil 4.5 (f)). Tüm eğrilerin ortak özelliği, BC modelindeki gibi kritik noktanın altında bir R_M minimumu ve üzerinde ise bir R_P maksimumunun (pik) varlığıdır.

İkinci olarak, R 'nin indirgenmiş kristal alan α 'ya göre değişimi Şekil 4.6 (a) ve (b)'de ve indirgenmiş manyetik alan h 'ye göre davranışı Şekil 4.6 (c) ve (d)'de verildi. Şekil 4.6 (a)'ya göre, sıcaklık değeri θ_{TCP} 'den büyük olduğu durumda ($\theta > 0.92$) R skaleri sırasıyla şu değişikliklere uğrar: (1) Ferromanyetik fazda ($R < 0$ bölgesinde) azalır ve Şekil 4.5 (a) ve (b)'deki gibi bir minimum yapar, (2) daha sonra artarak işaret değiştirir ve ferromanyetik-paramanyetik faz geçişi civarında sonsuza ıraksar ($R \rightarrow +\infty$), (3) α 'nın daha da artmasıyla PM fazında azalarak $R = 0$ çizgisine doğru ilerler. Şekil 4.6 (b)'de ise, manyetik alan altında ıraksama ortadan kalkar ve içerisinde birer minimum ve birer maksimumun olduğu pürüzsüz eğriler ortaya çıkar. Her iki şekildeki sonuçlar Şekil 4.2 (a) ve (b) ile uyumludur. Diğer taraftan, Şekil 4.6 (c) ve (d)'de, sırasıyla $\theta \approx \theta_{TCP}$ ve $\theta > \theta_{TCP}$ durumlarındaki R 'nin h 'ye göre değişimi ayrı ayrı incelendi. TCP yakınlığında, Şekil 4.6 (c)'de $h = 0$ çizgisinin her iki tarafında oluşan tepe ve çukur noktaları belirgin olup, TCP sıcaklığından uzaklaştıkça bu noktalar Şekil 4.6 (d)'de olduğu gibi kaybolur. Ayrıca, yüksek sıcaklıklarda $h = 0$ çizgisi boyunca oluşan pikler ise küçülür (Şekil 4.6 (d)). Şekillerde gösterilen R eğrileri, tüm sıcaklıklarda $h = 0$ çizgisine göre simetrik olup manyetik alanın yöneliminden bağımsızdır ($R(-h) = R(h)$). Bu sonuç bazı spin modellerinin Riemann geometrisi çalışmalarında da görülmüştür (Janyszek ve Mrugała 1989; Erdem 2019).

Bir sonraki şekilde (Şekil 4.7) ise, yukarıda ayrıntılı bir şekilde sunulan R hesaplamaları $h = 0$ ve $h \neq 0$ olduğu durumlar ayrı ayrı dikkate alınarak genişletildi. Bunun için önce, Şekil 4.5 (a), (b), (c) ve (d)'de tespit edilen R_P , R_M ve $R = 0$ değerlerinin faz diyagramındaki yerleri belirlendi ve ortaya çıkan yeni eğriler sırasıyla yeşil-sürekli, yeşil-kesikli ve kırmızı-sürekli eğriler şeklinde Şekil 3.10'daki termodinamik faz diyagramına ilave edildi. Şekil 4.7 (a)'da, manyetik alan olmadığı zaman $R = 0$, R_M ve R_P



Şekil 4.6. Karma spin modelinde, bazı θ değerleri için **(a)** $h = 0$ ve **(b)** $h = 0.01$ durumlarında R 'nin α 'ya göre değişimi; **(c)**, **(d)** $\alpha = 2.0$ için farklı θ değerlerinde R 'nin h 'ye göre değişimi. Düşey renkli ve noktalı çizgiler faz geçiş noktalarına ve yatay noktalı çizgiler $R = 0$ 'a karşılık gelir



Şekil 4.7. Karma spin modelinde, (a) $h = 0$ için (α, θ) düzleminde geometrik faz diyagramı, (b) $h = 0.02$ için (α, θ) düzleminde $R = 0$, R_P ve R_M eğrilerinin yerleşimleri. Mavi noktalı ve mavi sürekli eğriler sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçişlerine karşılık gelir. Kırmızı sürekli eğriler $R = 0$, yeşil kesikli eğriler R_M ve yeşil sürekli eğriler R_P 'nin maksimum olduğu durumu gösterir. (c) bazı α değerleri için (h, θ) düzleminde $R = 0$ ve R_P eğrilerinin yerleşimleri

eğrileri ferromanyetik faz bölgesinde (ikinci-derece faz geçiş çizgisi altında) ilerleyerek TCP noktasının hemen ilerisinde, birinci-derece faz geçiş çizgisi üzerinde sırasıyla E1 ve E2 noktalarında son bulurken ($\theta_{E1} = 0.755$, $\alpha_{E1} = 1.927$ ve $\theta_{E2} = 0.359$, $\alpha_{E2} = 1.9956$) paramanyetik fazda, E1 ve E2 noktalarından başlayan yeni R_P ve R_M eğrileri oluşur. Bu eğriler, $\alpha = 2.5075$ değerinde birleşerek bir yarım halka meydana getirirler. Şekil 4.7 (b)'de ise, $h = 0.02$ durumunda R_P , R_M ve $R = 0$ eğrilerinin yerleşimleri gösterildi. Şekil 4.7 (a)'dan farklı olarak, ikinci-derece faz geçiş çizgisi üzerinde bulunan ve E3 noktasında sonlanan başka bir R_P eğrisi ortaya çıkar. $h = 0$ durumunda $R = 0$ eğrisi ikinci-derece faz geçiş çizgisinin altında kalırken yeni şekilde ise hemen üzerinden başlayarak R_M eğrisi ile aynı noktada sonlanır (E3 noktası). Birinci-derece faz geçiş çizgisinin ilerisinde E4 noktasında biten ikinci R_P eğrisi ise $R < 0$ bölgesinde yerleşir. Şekil 4.7 (a) ile olan diğer fark, manyetik alan varlığında R_M , R_P ve $R = 0$ çizgilerinin biraz daha yüksek sıcaklıklara doğru kayması ve ayrıca paramanyetik fazda oluşan R_M ve R_P ekstremumlarının kaybolmasıdır. Son olarak, Şekil 4.7 (c)'de $\alpha = 0.10, 1.0$ ve 1.7 değerleri için $R = 0$ ve R_P çizgilerinin yerleşimleri (h, θ) düzleminde verildi. Bu şekle göre, manyetik alan değerleri artırıldıkça $R = 0$ çizgilerinin (renkli-kesikli) hemen üzerinde bulunan R_P çizgileri yüksek sıcaklıklara doğru uzanmaktadır. (h, θ) düzleminde ortaya çıkan renkli sürekli çizgilerle gösterilen R_P ekstremumları, literatürde Widom çizgileri olarak adlandırılır (Ruppeiner vd 2012). Dolayısıyla, Şekil 4.7 (c)'de gösterilen Widom eğrileri, bazı manyetik sistemlerin termodinamik geometri çalışmaları ile uyum içerisinde olduğu görülebilir (Dey vd 2013; Erdem 2019).

5. SONUÇLAR

Bu tezde, spin-1 BC ve karma spin $(\frac{1}{2}, 1)$ Ising sistemleri Ruppeiner formalizmine dayalı TG kullanılarak incelendi. Önce, bu modeller için sırasıyla (m, q) ve (σ, m, q) uzayları seçilerek Gibbs serbest enerji fonksiyonelleri yardımıyla metrikler elde edildi. Sonra, Kesim 3.3.'deki basamaklar takip edilerek R Ricci eğrilik skalerleri düzen parametreleri cinsinden türetildi ve indirgenmiş niceliklere (θ, h, d, α) bağlı değişimleri manyetik alan varlığında ve yokluğunda grafiksel olarak analiz edildi. $h = 0$ durumu için elde edilen nümerik sonuçlara göre, her iki spin sisteminde kritik ve üçlü kritik nokta sıcaklıkları civarında $R \rightarrow +\infty$ ıraksaması olurken bu sıcaklıkların altında ($\theta < \theta_C, \theta < \theta_{TCP}$) R genellikle negatiftir. Bu durum ferromanyetik spin etkileşimlerinin çekici olduğu anlamına gelir. $\theta > \theta_C$ veya $\theta > \theta_{TCP}$ durumunda ise, spin etkileşimleri itici olup R her zaman pozitif değerler alır. Diğer taraftan, R eğrilikleri birinci-derece geçiş sıcaklığı değerlerinde $R < 0$ ve $R > 0$ bölgeleri arasında aniden atlama davranışı gösterir. Ayrıca, R 'nin maksimum ve minimum olduğu θ ve d (veya α) değerleri de belirlendi. Tüm bu bulgular ile, $R < 0$ ve $R > 0$ bölgelerini ayıran $R = 0$ çizgisinin durumu termodinamik faz diyagramlarında gösterilerek adı geçen modellerin geometrik faz diyagramları oluşturuldu. Ortaya çıkan GFD'lerde, $R = 0$ çizgileri beklenildiği gibi birinci-derece faz geçiş çizgisi üzerinde sonlanmıştır.

Öte yandan, her iki spin sistemine bir dış manyetik alan ilave edildiği zaman $R > 0$ bölgesinde sadece eğrilik maksimumları gözlenirken $R < 0$ bölgesinde her iki ekstremum noktaları oluşmaktadır. Böylece, hesaplanan R nicelikleri (θ, h, d, α) parametrelerinin sürekli bir fonksiyonu haline gelmektedir. Ayrıca, R 'nin işaret değiştirdiği θ_{SC} değerleri h ve d (veya α) ile değişmektedir. Tezde bulunan tüm sonuçlar, birçok spin modelinin eğrilik çalışmaları ile uyum içerisindedir (Erdem 2019, 2020; Alata vd 2023).

Sonuç olarak, tezde türetilen Ricci skalerleri ilgili fiziksel sistemlerin kararlılığının bir ölçüsü olarak görüldüğünden (Ruppeiner vd 2012), yukarıda sunulan nümerik sonuçlar birçok tek veya karma spin modellerinin fiziksel özelliklerini geometrik olarak yorumlanmasına katkı sağlayacağı düşünülmektedir. Bu vesile ile, tezin hala açık bir araştırma problemi olmaya devam eden benzer tek veya karma spin sistemlerinin özelliklerini araştırmak için bir ön çalışma olacağı öngörülmektedir.

6. KAYNAKLAR

- Akimenko, S. S., Myshlyavtsev, A. V. ve Myshlyavtseva, M. D. 2021. Mixed spin-1/2 and spin-1 Ising model on a bilayer hierarchical lattice. *J. Magn. Magn. Mater.*, 530: 167929.
- Alata, N. 2022. Spin-1 Blume-Emery-Griffiths modelinin Riemann geometrisi çerçevesinde incelenmesi. Doktora tezi, Akdeniz Üniversitesi, Antalya.
- Alata, N., Erdem, R. ve Gülpınar, G. 2023. Geometrical aspects of the multicritical phase diagrams for the Blume-Emery-Griffiths model. *Eur. Phys. J. Plus*, 138: 1–8.
- Albayrak, E. 2011. The spin-1 Blume–Capel model with random crystal field on the Bethe lattice. *Physica A*, 390: 1529–1533.
- Bahmad, L., Benyoussef, A. ve El Kenz, A. 2008. Mean field study of the mixed Ising model in a random crystal field. *Physica A*, 387: 825–833.
- Barry, J. H. 1966. Magnetic Relaxation near a Second-Order Phase-Transition Point. *J. Chem. Phys.*, 45 (11): 4172–4177.
- Benayad, N., Klümper, A., Zittartz, J. ve Benyoussef, A. 1989. Re-entrant ferromagnetism in a two-dimensional mixed spin Ising model with random nearest-neighbour interactions. *Z. Physik B Cond. Mat.*, 77: 333–338.
- Benyoussef, A., El Kenz, A. ve Kaneyoshi, T. 1994a. Diluted mixed spin-1 and spin-1/2 on honeycomb lattice. *J. Magn. Magn. Mater.*, 131: 173–178.
- Benyoussef, A., El Kenz, A. ve Kaneyoshi, T. 1994b. Tricritical behaviour in diluted mixed spin-1 and spin-1/2 on square lattice. *J. Magn. Magn. Mater.*, 131: 179–182.
- Blume, M. 1966. Theory of the First-Order Magnetic Phase Change in UO_2 . *Phys. Rev.*, 141 (2): 517.
- Blume, M., Emery, V. J. ve Griffiths, R. B. 1971. Ising model for the λ transition and phase separation in He^3 - He^4 mixtures. *Phys. Rev. A*, 4 (3): 1071.

- Bobák, A. ve Jurčišin, M. 1997. A discussion of critical behaviour in a mixed-spin Ising model. *Physica A*, 240: 647–656.
- Boechat, B., Filgueiras, R., Marins, L., Cordeiro, C. ve Branco, N. S. 2000. Ferrimagnetism in two-dimensional mixed-spin Ising model. *Mod. Phys. Let. B*, 14 (20): 749–758.
- Branco, N. S. ve Boechat, B. M. 1997. Real-space renormalization-group study of the two-dimensional Blume-Capel model with a random crystal field. *Phys. Rev. B*, 56 (18): 11673.
- Brody, D. C. ve Hook, D. W. 2008. Information geometry in vapour–liquid equilibrium. *J. Phys. A*, 42: 023001.
- Brody, D. C. ve Ritz, A. 2003. Information geometry of finite Ising models. *J. Geo. Phys.*, 47: 207–220.
- Capel, H. W. 1966. On the possibility of first-order phase transitions in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting. *Physica*, 32: 966–988.
- Capel, H. W. 1967. On the possibility of first-order transitions in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting III. *Physica*, 37: 423–441.
- Costabile, E., Viana, J. R., de Sousa, J. R. ve Plascak, J. A. 2014. The general-spin Blume-Capel model: A study of the multicritical behavior using effective-field theory. *Physica A*, 393: 297–303.
- da Silva, N. R. ve Salinas, S. R. 1991. Mixed-spin Ising model on the Bethe lattice. *Phys. Rev. B*, 44 (2): 852.
- De Alcantara Bonfim, O. F. 1985. Mean field renormalization group analysis of the Blume-Capel model. *Physica A*, 130: 367–373.
- de Leon, K. ve Vega, I. 2022. Phase boundaries and the Widom line from the Ruppeiner geometry of fluids. *Phys. Rev. E*, 106 (5): 054141.
- Deserno, M. 1997. Tricriticality and the Blume-Capel model: A Monte Carlo study within the microcanonical ensemble. *Phys. Rev. E*, 56 (5): 5204.

- Dey, A., Roy, P. ve Sarkar, T. 2013. Information geometry, phase transitions, and the Widom line: Magnetic and liquid systems. *Physica A*, 392: 6341–6352.
- Domb, C. 1960. On the theory of cooperative phenomena in crystals. *Adv. Phys.*, 9 (34): 149–244.
- Du, A., Yü, Y. Q. ve Liu, H. J. 2003. Expanded Bethe-Peierls approximation for the Blume-Capel model. *Physica A*, 320: 387–397.
- Ekiz, C. 2005. Tricritical behavior in the mixed spin-1/2 and spin-1 Ising ferromagnetic system on the two-fold Cayley tree. *Physica A*, 347: 353–362.
- Ekiz, C. ve Keskin, M. 2003. Magnetic properties of the mixed spin-1/2 and spin-1 Ising ferromagnetic system. *Physica A*, 317: 517–534.
- Ekiz, C., Keskin, M. ve Yalçın, O. 2001. Metastable and unstable states of the Blume–Capel model obtained by the cluster variation method and the path probability method. *Physica A*, 293: 215–232.
- Ekiz, C. ve Önderışık, N. 2021. Reentrant Phase Transitions in the Blume-Capel Antiferromagnet on a Recursive Lattice. *J. Super. Nov. Magn.*, 34: 3037–3043.
- Ekiz, C., Strečka, J. ve Jaščur, M. 2009. Mixed spin-1/2 and spin-1 Ising model with uniaxial and biaxial single-ion anisotropy on the Bethe lattice. *Cent. Eur. J. Phys.*, 7 (3): 509–520.
- Erdem, R. 2018a. Antiferromagnetic Ising model in the framework of Riemannian geometry. *Acta Phys. Pol. B*, 49 (10): 1823–1834.
- Erdem, R. 2018b. Riemannian geometry of Ising model in the Bethe approximation. *J. Phys.: Conf. Series*, 1132: 012028.
- Erdem, R. 2019. Thermodynamic geometry of Ising ferromagnet in an external magnetic field: A self-consistent field theory calculation. *Physica A*, 526: 121173.
- Erdem, R. 2020. Quantum lattice model with local multi-well potentials: Riemannian geometric interpretation for the phase transitions in ferroelectric crystals. *Physica A*, 556: 124837.

- Erdem, R. 2022. Geometrical description of the state space in spin crossover solids with high-spin low-spin degree of freedom. *Physica A*, 598: 127335.
- Erdem, R. ve Alata, N. 2020. Ruppeiner geometry of isotropic Blume–Emery–Griffiths model. *Eur. Phys. J. Plus*, 135: 1–9.
- Ertas, M. ve Keskin, M. 2015. Dynamic phase transition properties for the mixed spin- $(1/2, 1)$ Ising model in an oscillating magnetic field. *Physica B*, 470–471: 76–81.
- Gharaibeh, M., Almahmoud, A. ve Obeidat, A. 2022. Compensation and transition order temperature behavior of mixed spin-1 and spin-1/2 Ising model on a centered honeycomb-hexagonal structure: two points of compensation. *SN Appl. Sci.*, 4: 211.
- Ginoza, M. 1993. Riemannian geometry of equilibrium thermodynamics in a liquid mixture. *Rep.s Math. Phys.*, 32 (2): 167–174.
- Godoy, M., Leite, V. S. ve Figueiredo, W. 2004. Mixed-spin Ising model and compensation temperature. *Phys. Rev. B*, 69: 054428.
- Ising, E. 1925. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus. *Z. Physik*, 31: 253–258.
- Jain, A. K. ve Landau, D. P. 1980. Monte Carlo study of the fcc Blume-Capel model. *Phys. Rev. B*, 22 (1): 445.
- Janyszek, H. 1990. Riemannian geometry and stability of thermodynamical equilibrium systems. *J. Phys. A*, 23: 477–490.
- Janyszek, H. ve Mrugała, R. 1989. Riemannian geometry and the thermodynamics of model magnetic systems. *Phys. Rev. A*, 39 (12): 6515.
- Kaneyoshi, T. 1987. Curie temperatures and tricritical points in mixed Ising ferromagnetic systems. *J. Phys. Soc. Jpn*, 56 (8): 2675–2680.
- Kaneyoshi, T. ve Chen, J. C. 1991. Mean-field analysis of a ferrimagnetic mixed spin system. *J. Magn. Magn. Mater.*, 98 (1-2): 201–204.
- Kaneyoshi, T. ve Nakamura, Y. 1998. A theoretical investigation for low-dimensional molecular-based magnetic materials. *J. Phys.*, 10: 3003–3017.

- Kasama, T., Muraoka, Y. ve Idogaki, T. 2006. Molecular field and Monte Carlo study for the mixed-spin axial next-nearest-neighbor Ising model. *Phys. Rev. B*, 73: 214411.
- Kaufman, M. ve Kanner, M. 1990. Random-field Blume-Capel model: Mean-field theory. *Phys. Rev. B*, 42 (4): 2378.
- Kaviani, K. ve Dalafi-Rezaie, A. 1999. Pauli paramagnetic gas in the framework of Riemannian geometry. *Phys. Rev. E*, 60 (4): 3520.
- Kimel, J. D., Black, S., Carter, P. ve Wang, Y. L. 1987. Monte Carlo study of the antiferromagnetic two-dimensional Blume-Capel model. *Phys. Rev. B*, 35 (7): 3347.
- Lara, D. P. ve Plascak, J. A. 1998. The critical behavior of the general spin Blume-Capel model. *Int. J. Mod. Phys. B*, 12 (20): 2045–2061.
- May, H. O., Mausbach, P. ve Ruppeiner, G. 2013. Thermodynamic curvature for attractive and repulsive intermolecular forces. *Phys. Rev. E*, 88: 032123.
- Mijatović, M., Veselinović, V. ve Trenčevski, K. 1987. Differential geometry of equilibrium thermodynamics. *Phys. Rev. A*, 35 (4): 1863.
- Mirza, B. ve Mohammadzadeh, H. 2008. Ruppeiner geometry of anyon gas. *Phys. Rev. E*, 78: 021127.
- Mirza, B. ve Talaei, Z. 2013. Thermodynamic geometry of a kagome Ising model in a magnetic field. *Phys. Lett. A*, 377: 513–517.
- Oitmaa, J. 2005. Ferrimagnetism and the existence of compensation points in layered mixed spin $(\frac{1}{2}, 1)$ Ising models. *Phys. Rev. B*, 72: 224404.
- Oitmaa, J. ve Enting, I. G. 2006. A series study of a mixed-spin $S = (\frac{1}{2}, 1)$ ferrimagnetic Ising model. *J. Phys.*, 18: 10931.
- Onsager, L. 1944. Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, 65 (3-4): 117.
- Plascak, J. A. 1993. Multicritical points in the ferromagnetic binary Ising model. *Physica A*, 198: 655–665.

- Plascak, J. A., Moreira, J. G. ve sá Barreto, F. C. 1993. Mean field solution of the general spin Blume-Capel model. *Phys. Lett. A*, 173: 360–364.
- Ruppeiner, G. 1979. Thermodynamics: A Riemannian geometric model. *Phys. Rev. A*, 20 (4): 1608.
- Ruppeiner, G. 1995. Riemannian geometry in thermodynamic fluctuation theory. *Rev. Mod. Phys.*, 67 (3): 605.
- Ruppeiner, G. 2012. Thermodynamic curvature from the critical point to the triple point. *Phys. Rev. E*, 86: 021130.
- Ruppeiner, G. ve Davis, C. 1990. Thermodynamic curvature of the multicomponent ideal gas. *Phys. Rev. A*, 41 (4): 2200–2202.
- Ruppeiner, G., Sahay, A., Sarkar, T. ve Sengupta, G. 2012. Thermodynamic geometry, phase transitions, and the Widom line. *Phys. Rev. E*, 86: 052103.
- Santos, J. P., sá Barreto, F. C. ve Rosa, D. S. 2017. Tri-critical behavior of the Blume Capel model on a diamond lattice. *J. Magn. Magn. Mater.*, 423: 175–182.
- Sanwari, R. ve Sahay, A. 2022a. Thermodynamic geometry of spin-one lattice models. I. Spin and quadrupolar orders and critical scaling functions in one dimension. *Phys. Rev. E*, 105: 034134.
- Sanwari, R. ve Sahay, A. 2022b. Thermodynamic geometry of spin-one lattice models. II. Criticality and coexistence in the mean-field approximation. *Phys. Rev. E*, 105: 034135.
- Saul, D. M., Wortis, M. ve Stauffer, D. 1974. Tricritical behavior of the Blume-Capel model. *Phys. Rev. B*, 9 (11): 4964–4980.
- Schofield, S. L. ve Bowers, R. G. 1981. High-temperature series expansion analyses of mixed-spin Ising model. *J. Phys. A*, 14: 2163–2169.
- Selke, W. ve Oitmaa, J. 2010. Monte Carlo study of mixed-spin $S = (1/2, 1)$ Ising ferrimagnets. *J. Phys.*, 22: 076004.

- Silva, C. J., Caparica, A. A. ve Plascak, J. A. 2006. Wang-Landau Monte Carlo simulation of the Blume-Capel model. *Phys. Rev. E*, 73: 036702.
- Siqueira, A. F. ve Fittipaldi, I. P. 1986a. New effective-field theory for the Blume-Capel model. *Physica A*, 138: 592–611.
- Siqueira, A. F. ve Fittipaldi, I. P. 1986b. Thermodynamical properties of a mixed Ising ferromagnet system. *J. Magn. Magn. Mater.*, 54: 678–680.
- Strečka, J., Csernoková, I., Čanová, L., Jaščur, M. ve Balcerzak, T. 2004. Magnetic study of an anisotropic mixed spin- $\frac{1}{2}$ and spin-1 Ising model on a square lattice with the uniaxial crystal-field anisotropy. *Czech. J. Phys.*, 54: 575–578.
- Strečka, J., Dely, J. ve Čanová, L. 2009. Phase transitions of the mixed spin- $\frac{1}{2}$ and spin- S Ising model on a three-dimensional decorated lattice with a layered structure. *Physica A*, 388: 2394–2402.
- Strečka, J. ve Ekiz, C. 2012. Reentrant phase transitions and multicomensation points in the mixed-spin Ising ferrimagnet on a decorated Bethe lattice. *Physica A*, 391: 4763–4773.
- Theodorakis, P. E. ve Fytas, N. G. 2012. Monte Carlo study of the triangular Blume-Capel model under bond randomness. *Phys. Rev. E*, 86 (1): 011140.
- Uğurlu, F. H. 2019. Bazı tek tip ve karma-spin Ising zincirleri için Riemann skaler eğrilik diyagramlarının elde edilmesi. Yüksek Lisans tezi, Akdeniz Üniversitesi, Antalya.
- Wang, Y. L. ve Kimel, J. D. 1991. Multicritical behavior in the antiferromagnetic Blume-Capel model. *J. App. Phys.*, 69 (8): 6176–6178.
- Weinhold, F. 1975. Metric geometry of equilibrium thermodynamics. *J. Chem. Phys.*, 63 (6): 2479–2483.
- Xin, Z. H., Wei, G. Z. ve Liu, T. S. 1998. Phase diagrams of the diluted mixed-spin Ising model on a honeycomb lattice. *Physica A*, 248: 442–453.

- Yüksel, Y., Akıncı, Ü. ve Polat, H. 2009. An introduced effective-field approximation and Monte Carlo study of a spin-1 Blume-Capel model on a square lattice. *Phys. Scr.*, 79: 045009.
- Zhang, G. M. ve Yang, C. Z. 1993. Monte Carlo study of the two-dimensional quadratic Ising ferromagnet with spins $S = \frac{1}{2}$ and $S = 1$ and with crystal-field interactions. *Phys. Rev. B*, 48 (13): 9452.
- Zierenberg, J., Fytas, N. G., Weigel, M., Janke, W. ve Malakis, A. 2017. Scaling and universality in the phase diagram of the 2D Blume-Capel model. *Eur. Phys. J. Special Topics*, 226: 789–804.
- Žukovič, M. ve Bobák, A. 2013. Phase transitions in a triangular Blume-Capel antiferromagnet. *Phys. Rev. E*, 87: 032121.

ÖZGEÇMİŞ

Tuğçe AKKURT

ÖĞRENİM BİLGİLERİ

Yüksek Lisans	Akdeniz Üniversitesi
2021-2024	Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalı, Antalya
Lisans	Akdeniz Üniversitesi
2017-2021	Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Antalya

ESERLER

Ulusal-Uluslararası bilimsel toplantılarda sunulan ve bildiri kitaplarında basılan bildiriler

1- Akkurt T., Erdem R., Ekiz C. (2022). Thermodynamic metric geometry of 3D order parameter state space in a mixed spin- $\frac{1}{2}$ and spin-1 Ising ferromagnetic system. Turkish Physical Society 38th International Physics Congress, Bodrum, Muğla, Türkiye. (Özet Bildiri)

2- Akkurt T., Erdem R., Ekiz C. (2022). Blume-Capel modelinin termodinamik geometri çerçevesinde incelenmesi. 27. Yoğun Madde Fiziği- Ankara Toplantısı, Ankara, Türkiye. (Özet Bildiri)

3- Erdem R., Akkurt T., Özüm S., Güçlü N. (2023). Curvature Analysis of Equilibrium States in a Quantum Lattice Model for Ferroelectric Crystals. 3rd Global Summit on Polymer Science and Composite Materials, Lisbon, Portugal. (Özet Bildiri)