DOKUZ EYLÜL ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

SPİN-S ENİNE ISING MODELİNİN DENGE VE DENGE DIŞI DAVRANIŞLARI

Fevzi KELEŞ

Haziran, 2023

İZMİR

SPİN-S ENİNE ISING MODELİNİN DENGE VE DENGE DIŞI DAVRANIŞLARI

Dokuz Eylül Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü

Yüksek Lisans Tezi

Fizik Anabilim Dalı

Fevzi KELEŞ

Haziran, 2023

İZMİR

YÜKSEK LİSANS TEZİ SINAV SONUÇ FORMU

Fevzi KELEŞ tarafından **PROF.DR. Gül GÜLPINAR** yönetiminde hazırlanan **"SPİN-S ENİNE ISING MODELİNİN DENGE VE DENGE DIŞI DAVRANIŞLARI"** başlıklı tez tarafımızdan okunmuş, kapsamı ve niteliği açısından bir Yüksek Lisans tezi olarak kabul edilmiştir.

.....

Prof.Dr. Gül GÜLPINAR

Danışman

.....

Prof. Dr. Rıza ERDEM

Juri Üyesi

.....

Prof. Dr. Hasan KARABIYIK

Juri Üyesi

Prof. Dr. Okan FISTIKOĞLU
Müdür
Fen Bilimleri Enstitüsü

TEŞEKKÜR

Yüksek lisans eğitimim boyunca çalışmalarımı yönlediren ve bilgi birikimini benimle paylaşan yüksek lisans danışmanım sayın Prof. Dr. Gül GÜLPINAR'a ve çalıştığımız araştırma alanındaki uzamanlığı ile yol gösteren sayın Prof. Dr. Rıza ERDEM'e

Her zaman yanımda olan, desteğini her zaman hissettiğim ve aynı zamanda çalışma arkadaşım olan Elif SÜNNETCİ'ye

Son olarak bugüne kadar maddi ve manevi olarak beni her konuda destekleyen, benimle birlikte olan değerli aileme teşekkürlerimi sunarım.

Fevzi KELEŞ

SPİN-S ENİNE ISING MODELİNİN DENGE VE DENGE DIŞI DAVRANIŞLARI

ÖZ

Bu tez çalışmasında ilk olarak hem termal hem de kuantum faz geçişleri sergileyen spin-S enine alan Ising modeli ve S=1/2 özel halinin iki varyasyonunun denge manyetik özellikleri ortalama alan yaklaşımı altında incelenmiştir. Bu amaçla spin-S enine alan Ising modelinin serbest enerjisini veren ifade ortalama alan yaklaşımı ve Bogliubov varyasyonel ilkesini birleştiren bir yöntemle türetildi. Aynı analiz ile rastgele boyuna alan etkisi altındaki ve metamanyetik özellik sergileyen spin-1/2 enine alan Ising modellerinin faz eğrileri elde edildi. Bir sonraki adımda bu sistemlerin sonlu sıcaklık termodinamik geometrik özellikleri termal faz geçişlerinin varlığında detaylıca incelendi. Rastgele boyuna dış manyetik alan etkisindeki spin-1/2 enine Ising modelinin sıcaklık ve mıknatıslanmadan oluşan iki boyutlu alt manifold için termodinamik eğriliği Ruppeiner metriği ile elde edildi ve sıcaklık ve dış alan ile değişimi çalışıldı. Metamanyetik spin-1/2 enine Ising modellinin metriği tanımlanırken ise sekmeli ve toplam mıknatıslanlardan oluşan ikiboyutlu termodinamik koordinat sisteminden yararlanıldı. Her iki sistem için Ricci skalerinin termal faz geçişleri komşuluğundaki sıcaklık ve alan davranışları kapsamlıca incelendi. Son olarak rastgele enine alan Ising modelinin termal kritik manyetik durulması denge istatistik mekaniğini doğrusal yanıt kuramı ile birleştiren bir yaklaşımla ele alındı.

Anahtar Kelimeler: Enine Alan Ising modeli, kuantum kritik nokta, termal faz geçişleri, rastgele alan, Ruppeiner geometrisi, Ricci skaleri

EQUILIBRIUM AND NON-EQUILIBRIUM PROPERTIES OF SPIN-S TRANSVERSE ISING MODEL

ABSTRACT

In this thesis, firstly, the magnetic properties of spin-S transverse field Ising model which undergoes thermal and quantum phase transitions for finite and zero temperatures are studied within mean field theory. Mean field free energy of the model is obtained by making use of the Bogliubov variational principle. In addition, two variations of the S=1/2 case spin-1/2 transverse field Ising model with random longitudinal magnetic field and metamagnetic spin-1/2 transverse field Ising model are investigated with same approach. After studying the equlibrium properties and obtaining phase diagrams wefocused on the behavior of the thermodynamic curvatures of these spin systems near the thermal (classical) critical and multicritical points. For this purpose, the thermo-geometric analysis of the random longitudinal transverse field Ising model is performed in two fold manifold whose coordinates are the magnetization and temperature of the system. In the metamagnetic case the Ricci scalar is obtained for the order parameter space. Finally, the thermal magnetic relaxation behavior of the transverse field Ising model under the effect of longitudinal magnetic field is studied with a method which combines statistical mechanics of phase transitions and linear response theory.

Keywords: Transverse field Ising model, Quantum phase transition, thermal phase transitions, Ruppeiner geometry, Ricci scalar

İÇİNDEKİLER

Sayfa

SINAV SONUÇ FORMU…….....ii

TEŞEKKÜR……iii

ÖZ……iv

ABSTRACT…….v

ŞEKİLLER LİSTESİ……...vi

BÖLÜM BİR – GİRİŞ……...…….1

BÖLÜM İKİ - ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR……...…….5

BÖLÜM ÜÇ – MODEL, YÖNTEM VE BULGULAR…….10

3.1 Faz Geçişleri……...……11

3.1.1 Klasik Faz Geçişleri ve Evrensellik……...……..11

3.2 Landau Teorisi……...……..13

3.2.1 Landau Fonksiyoneli……14

3.3 Konuma Bağlı Korelasyonlar ve Ginzburg-Landau Teorisi…….……...….17

3.3.1 Dalgalanmalar ve Ginzburg Kriteri……...…….……..20

3.4 Kuantum Faz Geçişleri……...…….…….21

3.4.1 Kuantum Faz Geçişi Sergileyen Deneysel Sistemler ve Faz Eğrileri..…24

3.4.2 Kuantum Faz Geçişi Sergileyen Teorik Modeller……..….……..…27

3.4.2.1 Enine Alan Ising Modeli……...……...28

3.5 Klasik ve Kuantum Dalgalanmalar……...……...31

3.6 Sıfır Boyutlu Enine Alan Modeli….……...……32

3.6.1 Boyuna Alanda Klasik Tek Spin……..……...……33

3.6.2 Manyetik Alan İçindeki Tek Kuantum Spin……..……..…..34

3.7 Riemann Geometrisi ve Ruppeiner Metriği……..……..35

3.7.1 Kooperatif Sistemlerin Termodinamik Geometrisi: Tarihçe ve Formülasyon …….……...35

3.7.2 Termodinamik Geometrinin Ortalama Alan Yaklaşımı Altında İncelenmesi……..….39

3.8 Enine Alan Ising Modelinin Ortalama Alan Yaklaşımı ile İncelenmesi…....44

3.8.1 Enine Alan Spin-S Ising Modelinin Ortalama Alan Yaklaşımı ile İncelenmesi……..…….45

3.8.2 Enine Alan Spin-S Ising Modelinin Temel Seviye Analizi…..……...…...49

3.8.3 Sonlu Sıcaklık Davranışı ve Termal Faz Geçişi……..…..……51

3.8.4 Klasik Modele Eşdeğerlik: Suzuki- Trotter Formalizması……53

3.9 Bimodal Rastgele Boyuna Alan Etkisi Altındaki Enine Alan Ising Modelinin Denge Manyetik Özellikleri……...……54

3.10 Enine Alan Ising Modelinin Termodinamik Geometrisi……..……..61

3.11 Metamanyetik Ising Model……...……..69

3.11.1 Metamanyetik Enine Alan Ising Modelinin Riemann Geometrisi…....78

3.12 Rastgele Enine Alan Ising Modelinin Termal Kritik Manyetik Durulması…84

3.12.1 Durulma Zamanının Termal Kritik Davranışı……..…..84

3.12.2 Rastgele Enine Alan Ising Modeline Ait Dinamik Alınganlıklarının Elde Edilmesi ve İncelenmesi…….……..86

BÖLÜM DÖRT - ÖZET VE SONUÇ……..…….……..91

KAYNAKLAR……..93

ŞEKİLLER LİSTESİ

Sayfa

Şekil 3.1 Sürekli bir kuantum faz geçişinin yakınında genel faz diyagramı……..…..22

Şekil 3.2 $LiHoF_4$'e ait enine alan-sıcaklık faz diyagramı……..……...25

Şekil 3.3 La_{2-x} Sr_x CuO_4'a ait katkılanma-sıcaklık faz diyagramı…….……..26

Şekil 3.4 Mott yalıtkanı metal geçişine ait faz diyagramı…….…….……..27

Şekil 3.5 Ferroelektrik kristallerde protonun maruz kaldığı çift kuyu potansiyeli…..28

Şekil 3.6 Spin-1 EAI modelinin kuantum faz geçişi yakınında a) boyuna b) enine mıknatıslanmaların Ω ile değişimi…….…….51

Şekil 3.7 Spin 1 EAI modelinin faz geçişi yakınında a) boyuna b) enine mıknatıslanmaların sıcaklıkla değişimi…….…...52

Şekil 3.8 Spin-1/2 ve Spin-1 için enine alan etkisinin dış manyetik alan etkisinin olmadığı durumda sıcaklıkla değişimini gösteren faz diyagramı…….…..52

Şekil 3.9 Rastgele EAI modelinin h=0 için kuantum faz geçişi yakınında a) boyuna b) enine mıknatıslanmaların Ω ile değişimi…….……..….56

Şekil 3.10 Rastgele EAI modelinin h=0.1 için kuantum faz geçişi yakınında a) boyuna b) enine mıknatıslanmaların Ω ile değişimi…….……..…….57

Şekil 3.11 Rastgele EAI modelinin Ω=1.2 için faz geçişi yakınında a) boyuna b) enine mıknatıslanmaların sıcaklık ile değişimi…….……...57

Şekil 3.12 Rastgele EAI modelinin T=0.992 ve h=0 için kuantum faz geçişi yakınında enine alan ile değişimi…….…….…..58

Şekil.3.13 Rastgele EAI modelinin Ω=0.3 için faz geçişi yakınında a) boyuna b) enine mıknatıslanmaların sıcaklık ile değişimi…….……..…….58

Şekil 3.14 Rastgele EAI modelinin T=0.91 ve h=0.1 için kuantum faz geçişi yakınında a) boyuna b) enine mıknatıslanmaların Ω ile değişimi…….…….….59

Şekil 3.15 Rastgele EAI modeline ait a) enine alan etkisinin dış manyetik alan etkisinin olmadığı durumda sıcaklıkla değişimini gösteren faz diyagramı b) boyuna alan etkisinin enine manyetik alan etkisinin olmadığı durumda sıcaklıkla değişimini gösteren faz diyagramı c) boyuna alan etkisinin enine manyetik alan etkisinin olduğu durumda sıcaklıkla değişimini gösteren faz diyagramı……..……...…60

Şekil 3.16 R'nin h=0.25 için ve enine alan etkisi altında sıcaklıkla değişimi…….....65

Şekil 3.17 R'nin h=0.3 için ve enine alan etkisi altında sıcaklıkla değişimi……65

Şekil 3.18 R'nin h=0.35 için ve enine alan etkisi altında sıcaklıkla değişimi……..….66

Şekil 3.19 R'nin h=0.4 için ve enine alan etkisi altında sıcaklıkla değişimi……..….66

Şekil 3.20 Rastgele EAI modeline ait a) enine alan etkisinin dış manyetik alan etkisinin olmadığı durumda sıcaklıkla değişimini gösteren faz diyagramı b) enine alan etkisinin dış manyetik alan etkisi altında sıcaklıkla değişimini gösteren faz diyagramı……..…....67

Şekil 3.21 a) Ricci skalerinin h=0 ve T=0.992 için enine alan ile değişimi b) Ricci skalerinin h=0.1 ve T=0.992 için enine alan ile değişimi c) Ricci skalerinin h=0.15 ve T=0.992 için enine alan ile değişimi…….……....67

Şekil 3.22 a) Boyuna mıknatıslanmanın h=0.8 ve Ω=0.3 birinci dereceden faz geçişi. b) Ricci skalerinin birinci dereceden faz geçişi kritik nokta yakınındaki davranışı c) Ricci skalerinin h=0.9 ve Ω=0 birinci dereceden faz geçişi kritik nokta yakınındaki davranışı……..…….……..68

Şekil 3.23 Ricci skalerinin üçlü kritik nokta yakınıdaki sıcaklıkla değişimi…..…....69

Şekil 3.24 Metamanyetik Ising modeline ait a) sekmeli b) toplam mıknatıslanmanın T=0, h=1, α=-1 için enine alanla değişimi...……..……...65

Şekil 3.25 Metamanyetik Ising modeline ait enine alanın sıfır sıcaklıkta boyuna alan ile değişimini gösteren faz diyagramı……...……75

Şekil 3.26 Metamanyetik Ising modeline ait a) sekmeli b) toplam mıknatıslanmanın h=0.675, Ω=0.1, α=-0.4 için sıcaklıkla değişimi……..…...…….76

Şekil 3.27 Metamanyetik Ising modeline ait a) sekmeli b) toplam mıknatıslanmanın h=0.6, T=0.475, α=-0.4 için enine alan ile değişimi……..……76

Şekil 3.28 Metamanyetik Ising modeline ait a) sekmeli b) toplam mıknatıslanmanın Ω=0.3, T=0.91, α=-0.4 için boyuna alan ile değişimi……..……...77

Şekil 3.29 Enine alanın sabit dış manyetik alan etkisi altında sıcaklık ile değişimi……..78

Şekil 3.30 R'nin h=0.675, $\Omega = 0.1$ ve $\alpha = -0.4$ için sıcaklık ile değişimi……..….80

Şekil 3.31 R'nin T=0.91, $\Omega = 0.3$ ve $\alpha = -0.4$ için boyuna alan ile değişimi……...81

Şekil 3.32 R'nin h=0.675, t=0.475 ve $\alpha = -0.4$ için enine alan ile değişimi……....82

Şekil 3.33 a) Durulma zamanının dış manyetik alanın olmadığı ve enine alan etkisi altında kritik nokta yakınında sıcaklıkla değişimi b) Durulma zamanının dış manyetik alanın olduğu ve enine alan etkisi altında kritik nokta yakınında sıcaklıkla değişimi.....86

Şekil 3.34 Boyuna dış manyetik alanın sıfır olduğu ve sabit enine alan etkisi altındaki kritik nokta yakınında denge alınganlığının sıcaklıkla değişimi……....87

Şekil 3.35 Manyetik dispersiyon katsayısının a) düşük frekans, b) yüksek frekans bölgesindeki sıcaklık davranışı……..89

Şekil 3.36 Rastgele EAI modeline ait manyetik absorpsiyon katsayısının a) düşük frekans, b) çok düşük c) yüksek frekans aralığı için sıcaklıkla değişimi…….…..….89

BÖLÜM BİR
GİRİŞ

Etkileşim gösteren sistemlerin termodinamik davranışlarının incelenmesi temel bilimler ve teknolojinin gelişimi açısından oldukça önemlidir. Teorik ve deneysel olarak çalışmalar birçok önemli ve etkili modellerin geliştirilmesine neden olmuştur. Bu araştırmalar sonucu ortaya çıkan modellerden biri olan spin modelleri katıhal fiziğinde merkezi önem taşır. Spin sistemlerinden söz edildiğinde ilk olarak akla Ising modelleri ve farklı varyasyonları gelir: Ising modeli 1920'li yıllarda Lenz'in doktora öğrencisi olan Ernst Ising tarafından ferromanyetik sistemleri modellemek için ortaya konmuştur (Ising, 1925). Model iki durumlu (spin yukarı ve spin aşağı) spin değişkenine ve tek düzen parametresine (mıknatıslanma) sahiptir. Yoğun madde fiziği ve istatistik mekanik Ising modellerinin en fazla çalışıldığı alanların başında gelir ve farklı sistemlerin incelenmesinde oldukça etkilidir. Basitliğine karşın Ising modelinin faz geçişi özellikleri sadece iki boyutta ve dış manyetik alan sıfır iken kesin olarak çözülebilmiştir (Onsager, 1944). Sonlu alanın varlığında ve yüksek spin içeren varyasyonları ise analitik olarak çözülebilmiş değildir. Bu nedenle bu modeller bir dizi yaklaşık çözüm yöntemleri ve benzetim (simülasyon) teknikleri ile incelenmiş ve incelenmeye devam etmektedir (Meijer vd., 1986).

Tünelleme terimi içeren Enine Alan Ising (EAI) modeli faz geçişi ve kritik olaylar teorisinde ilgi çeken modellerden biridir. Klasik Ising modelinden farklı olarak z yönüne dik bir enine alan terimi vardır ve bu düzen parametresinin iki boyutlu ve model Hamiltonyenin kuantum doğasına sahip olmasına neden olur. Tünelleme olarak anılan bu alanın varlığı iki önemli sonuca neden olur: (i) Enine alan Ising modeli klasik Ising modelinden farklı olarak hem manyetik sistemlerde hem de spin fonon etkileşimlerinin var olduğu sistemleri incelemede başarılıdır. (ii) Model sıfır sıcaklıkta enine alan teriminden kaynaklanan kuantum dalgalanmalara bağlı ikinci dereceden kuantum geçişi sergiler ve kuantum faz geçişi sergileyen en basit model olması nedeniyle ilgi çekicidir. (iii) Son yıllarda deneysel ve kuramsal çalışmalara sıkça konu olan ısıl dalgalanmaların baskın olduğu klasik karakterde termal faz geçişleri sergiler (Sachdev, 1999).

1996'da bulunan bir boyutlu nano mıknatıs üzerine gerçekleştirilen alınganlık çalışmaları enine alan içeren bu sistemin sıfır sıcaklık yakınında farklı üstele sahip bir kritiklik sergilediğini ortaya koymuştur. Bu keşfin ardından EAI modeline olan ilgi büyük bir artış sergilemiştir. Günümüzde EAI modeli sadece ferroelektrik veya z eksenine dik alan içeren manyetik sistemlerde değil kuantum faz geçişi ve kuantum bilgisayarları (qubiti) modellemede kullanılmaktadır. Uzay boyutları $d \geq 2$ için Ising sırası sonlu sıcaklıkta da mevcuttur. Deneysel olarak erişilebilir bir kuantum faz geçişine sahip kuantum Ising modeli, ferromanyetik etkileşimlere ve güçlü bir Ising anizotropisine sahip manyetik yalıtkanlarda gerçekleştirilebilir. İki örnek, üç boyutlu bir Ising sistemi olan (ancak en yakın komşu etkileşimler yerine uzun menzilli dipolar etkileşimlere sahip olan) LiHoF4 ve yarı tek boyutlu bir sistem olan $CoNb_2O_6$ 'dır (Bitko, 1996; Coldea vd., 2010).

Bu tez çalışmasında ise ilk olarak spin-S enine alan Ising modeli ve S=1/2 özel halinde alan düzensizliği ve metamanyetik karakter taşıyan Hamiltonyenleri ele alınmıştır: Rastgele boyuna alan enine alan Ising modeli ve metamanyetik EAI modeli. Model Hamiltonyeninin bu varyasyonları için denge manyetik özellikleri ortalama alan yaklaşımı altında incelenmiştir. Landau teorisi kullanılarak deneme serbest enerjisi yazılmış ve Bogoliubov varyasyonel hesabı ile denge serbest enerjisi elde edilmiştir. Denge koşulları tanıtılarak düzen parametresine (z yönündeki mıknatıslanma) ve x yönündeki mıknatıslanmaya ait hal denklemleri elde edilmiştir. İteratif sayısal yöntemler kullanılarak hal denklemleri çözülmüş ve spin-S EAI modelinin faz diyagramları elde edilmiştir. Benzer yolla rastgele boyuna alan enine alan Ising ve metamanyetik EAI modelleri çalışıldı ve boyuna alan düzensizliğinin ve zıt işaretli bir sonraki yakın komşu etkileşmelerinin varlığının termal ve kuantum faz geçişlerine etkisi incelendi.

Bir sonraki aşamada ise modellerin termodinamik geometrik özelliklerine odaklandık. Termodinamik geometri yöntemlerini EAI ve metamanyetik EAI modellerine uyguladık. Bu amaçla Ruppeiner geometrisinden yararlanarak metrikleri

tanımladık. Her iki çalışmada iki boyutlu manifoldlara ait termodinamik Ricci eğriliği hesaplandı. Buradaki eğrilik terimi spin sisteminin karmaşıklığının bir ölçüsü olup kritik noktalar yakınında tekillik sergilemektedir (Ruppeiner, 1995). Ruppeiner metriğinin özelliği Ricci skalerinin termodinamik dalgalanmalarının sistemin korelasyon fonksiyonu ile ilişkilendirilebilmesidir. Diğer yandan faz geçişi ve kritik olaylar teorisi korelasyon uzunluğunun ikinci dereceden ve üstü sürekli geçişlerde ıraksadığını ortaya koyar ve termodinamik eğrilik sürekli geçişler yakınında ıraksama davranışı sergiler. Birinci dereceden kesikli geçişler yakınında ise kesikli atlama sergilediğini ortaya koymuştur. Bunlara ek olarak termodinamik eğrilik bazen pozitif bazen de negatif değerler almıştır.

Bu tez çalışmasının kapsamında son olarak ortalama alan yaklaşımı altındaki EAI modelinin manyetik durulma davranışını ele aldık. Ortalama alan yaklaşımı altında sistemin serbest enerjisi sadece z yönündeki spin yöneliminin beklenen değeri olan mıknatıslanmaya bağlıdır. Bu nedenle bu özel durumda (düzen parametresinin klasik bir değişken olduğu özel durumda) sistemin dinamiği istatistiksel denge kuramı ve Onsager tersinmez termodinamik kuramını birleştiren bir yöntemle incelenebilir. Yakın zaman önce benzeri bir çalışma çoklu kuyu potansiyelleri içeren kuantum örgü modeli için Erdem ve arkadaşları tarafından gerçekleştirilmiştir (Erdem vd., 2023). Accharya ve arkadaşları ise ortalama EAI modelinin dinamiğini aynı yaklaşımla Glauber dinamiği kullanarak incelemişlerdir (Acharyya vd., 1994). Manyetik durulma davranışının kritik özelliklerini elde etmek amacıyla bir önceki bölümde elde edilen modelin alt örgü mıknatıslanmalarından yararlanılmıştır. Dış alanın denge değerinden hafifçe saptırıldığı durumun analizi ile durulma zamanları elde edilmiştir: Bu amaçla Helmotz serbest enerji üretimi ifadesi yazılarak sistemin kinetik denklemi elde edilmiştir. Kinetik denklemin çözümü bize durulma zamanına ait ifadeyi vermektedir. Durulma zamanı farklı sıcaklık ve alan değerleri için elde edilmiş, sürekli geçişler için beklenen kritik yavaşlama davranışı görüldü. Manyetik durulma dinamik alınganlık ile karakterizedir.

Dinamik alınganlık ifadesinin elde edilmesi için bu kez sistemin salınımlı bir dış alana cevabı doğrusal yanıt kuramı ile formüle edilmiştir. Dinamik (karmaşık) alınganlık sanal ve gerçel kısımlardan oluşur: Gerçel kısım manyetik dispersiyon, sanal kısım ise manyetik absorpsiyon katsayısı olarak anılır ve hem sıcaklık hem de dış alanın frekansının bir fonksiyonudur. Boyuna alan düzensizliği içeren EAI modeline ait manyetik dispersiyon ve absorpsiyon katsayılarının yüksek ve düşük frekans sıcaklık davranışları elde edilmiştir. Elde edilen sonuçlar literatürdeki öncel, kuramsal ve deneysel verilerle karşılaştırılmıştır.

BÖLÜM İKİ

ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR

Tezin bu bölümünde EAI modellerinin faz geçiş özelliklerinin denge ve denge dışı ve manyetik sistemlerin termodinamik geometrik özelliklerini irdeleyen bilimsel çalışmalar özetlenecektir. Bu amaçla ilk olarak saf spin-S ve rastgele boyuna alan düzensizliği içeren ve boyuna alan indüklemeli faz geçişleri sergileyen metamanyetik spin-1/2 enine alan Ising modellerine ait denge ve denge dışı bilimsel çalışmaları konu alan bir literatür özeti sunulması amaçlandı.

İlk olarak potasyum dihidrojen fosfat (KDP veya KH_2PO_4) kristalleri gibi bazı çift kuyulu ferroelektrik sistemlerdeki düzen-düzensizlik faz geçişini teorik olarak modellemek için kullanılan EAI modelinin çalışılması 1960'ların başlarına kadar uzanır (de Gennes, 1963; Blinc, 1960). Modelin ortalama alan faz diyagramı ve korelasyon fonksiyonları basit hidrojen bağlı ferroelektrik numuneler için elde edilen deneysel sonuçlarla iyi bir niteliksel uyum sergilemiştir (Stinchcombe, 1973). Katsura, EAI modelini manyetik alan etkisi altındaki anizotropik Heisenberg modelinin özel bir durumu olarak ele aldı ve tek boyutlu EAI modelinin temel uyarılmaları ile uyumlu serbest enerji ve dağılım ilişkilerinin tam çözümünü sundu (Katsura, 1962). Preuty ise Jordan-Wigner dönüşümü ile spin sistemini, fermiyonlar cinsinden yeniden formüle etti ve korelasyonların hesaplanması için genelleştirdi (Pfeuty, 1970). Fisher pertürbatif bir yöntemle, yüksek sıcaklık ve düşük sıcaklık seri açılımlarıile Bethe örgüsü ve bir boyutlu zincir için EAI modelinin enine alınganlığını hesapladı (Fisher, 1963; Fisher, 1995). İlerleyen yıllarda tek boyutlu enine alan Ising modeli ile kare örgü üzerindeki iki boyutlu klasik Ising modelinin bölüşüm fonksiyonunun limit durumu olduğu ortaya konuldu (Kogut, 1979). d boyutlu EAI modeli ile (d + 1) boyutlu klasik Ising modeli aynı "evrensellik" sınıfındadırlar (Elliot vd., 1970; Hertz, 1976).

Düzensizliklerin spin sistemlerinin manyetik özellikleri üzerine etkileri uzun süredir pek çok bilimsel araştırmaya konu olmaktadır. Renormalizasyon grup çalışmaları göstermektedir ki düzensizliklerin varlığı halinde ilgili sistemin faz diyagramı topolojisinde dramatik değişiklikler ortaya çıkmaktadır (Gülpinar ve Berker, 2009; Aharony ve Binder, 1980). Bu bağlamda düzensizlikler içeren EAI modeli pek çok yöntemle ele alınmıştır. 1982 yılında yerel donmuş rastgele boyuna alanın etkidiği EAI modeli ortalama alan yaklaşımı altında incelenmiştir (Saxena, 1982). Bu çalışmada alan düzensizliğini bimodal bir dağılıma göre rastgele dağılmış bir dış alan üzerinden tanıtıldı. Saf (herhangi bir düzensizlik içermeyen) EAI modeli tamamen ikinci dereceden geçişlerden oluşan bir faz diyagramı sergilerken, alan düzensizliğinin varlığı halinde sistemin faz diyagramı üç boyutlu bir hal almakta ve üçlü kritik noktalar karşımıza çıkmaktadır. Daha sonra Saxena bu kez boyuna dış alanın üç ayrı değeri rastgele olarak alabildiği bimodal dağılımın EAI modelinin faz eğrilerine etkisini ele almıştır (Saxena, 1983). Yokota ve Sugiyama ise, Gauss ve bimodal dağılımlara göre örneklenen rastgele boyuna alanların kuantum spin sistemlerinin manyetik özellikleri üzerine etkilerini incelemiş ve faz eğrilerini yeniden geçiş sergilediğini göstermiştir (Yokota ve Sugiyama, 1988). EAI modelini çift yaklaşımı ile inceleyen bir çalışmada modelin kritik üstelleri elde edilmiştir (Yokota, 1988). Uzun erimli kuantum Ising modelini ortalama alan yaklaşımı altında inceleyen diğer bir çalışmada kuantum kritik üsteller hesaplandı (Dutta ve Bhattacharjee, 2001).Yakın zaman önce antiferromanyetik EAI modelinin anizotropik, (Nascimento vd., 2017), site seyrekliği (site-diluted) (Liang vd., 2008) ve aynı anda hem boyuna hem de enine alanlar içeren varyasyonları etki alan yöntemiyle kapsamlıca ele alındı (Nascimento vd., 2012).

Güçlü eksenel olmayan anizotropiye sahip ferromanyetik özellikleri ancak S>1/2 kuantum Ising modelleri ile formülize edilebilirler: Bu amaçla spin-S Ising ve Blume Capel modellerinden yararlanılarak pek çok çalışma yapıldı. Genel spin değerlerine sahip EAI modelinin Green fonksiyon teorisi 1976 yılında Kamieniarz tarafından gerçekleştirilmiştir (Kamieniarz, 1976). Oitmaa ve Coombsise spin-S enine alan Ising modelinin manyetik özelliklerini yüksek sıcaklık seri açılımı yöntemi ile inceleyerek faz diyagramını elde ederek tüm spin değerleri için (s=1/2,1,3/2,2…) sıfır sıcaklıkta

faz geçişi gözlemlendiği ortaya koymuşlardır (Oitmaa ve Coombs, 1981). Tek site küme teorisini kullandıkları çalışmada Kaneyoshi ve çalışma arkadaşları keyfi spin EAI modelini ele almışlardır (Kaneyoshi vd., 1988). Daha sonra bir grup bilim insanı aynı yöntemi EAI modelini karma spin-1 spin-2 sistemlerine uygulamıştır. (Barreto vd. 1981; Barreto vd., 1985; Zong vd., 1990; Saber ve Tucker, 1991; Tucker, 1993; Kaneyoshi vd. 1993). Bal peteği örgü üzerindeki enine karma spin-1/2 spin-S Ising modeli genelleştirilmiş yıldız-üçgen dönüşümü ile incelenmiş ve faz diyagramı, kompanzasyon (telafi) sıcaklıkları, mıknatıslanma ve enine alınganlık gibi nicelikler elde edilmiştir (Lackova vd., 2003). Jiang ve arkadaşları kristal alan etkisi altındaki karma spin-1 ve spin-3/2 EAI modelinin üçlü kritik davranışını ve manyetik özelliklerini etkin alan kuramı ile incelemiştir (Jiang vd., 2003).

Kuantum faz geçişleri sadece enine manyetik alan ile değil enine kristal alanın varlığı halinde de karşımıza çıkabilir. Bu amaçla spin değeri S>1/2 olan sistemlerde model Hamiltonyenine kristal alan terimi eklenir. Böylesi model sistemler gerçek materyalleri modellemede oldukça başarılıdır. Nadir toprak geçiş metal filmlerinde (Suran vd., 1986) Co-M ince filmlerinde FeTaN/TaN/FeTaN sandviçlerindeki manyetik olmayan TaN ara tabakasının kalınlığı değiştirildiğinde (de Wit vd., 1987), $La_{0.67}Sr_{o.33}MnO_3$ ince filmlerinde (Chaluvadi vd., 2018) eksenel olmayan kristal alanın varlığı ortaya konmuştur (Strecka ve Jascur, 2004). Sonlu sıcaklıklardaki spin-S EAI modelinin S=1 hali analitik ve sayısal yöntemlerle detaylıca çalışılmıştır: Standart ortalama alan yaklaşımı (Sousa ve Branco, 2008; Eddeqaqi vd., 1999; Hu, 2010), etkin alan teorisi (Zang vd., 2002; Wen ve Lei, 2011), geliştirilmiş çift yaklaşımı (Carvalho ve Plascak, 2015), korelasyon içeren etkin alan teorisi (Costabile vd., 2015) ve etkin bağıntılı (korele) ortalama alan yaklaşımı (Viana vd., 2018). Daha karmaşık bir Hamiltonyene sahip olan ve enine kristal alan etkisi altındaki S=3/2 Blume-Emery-Griffiths modeli etkin alan teorisi ile incelenmiştir (Boughara vd., 2011). Rastgele enine kristal alanın spin-3/2 Blume-Capel modelinin manyetik özellikleri üzerine etkisi ortalama alan yaklaşımı ile incelenmiştir (Kple vd., 2021). Strecka ve Jascur yaptıkları çalışmada enine alan etkisi altındaki spin-S Ising modelini ortalama alan ve tek spin küme yaklaşımı altında incelemiştir (Strecka ve Jascur, 2015). Rastgele alanların varlığı halindeki karma spin-1/2 ve spin-1 enine alan Ising

modeli Benayad ve arkadaşları tarafından ortalama alan, renormalizasyon grup teori ve çift yaklaşımları kullanarak incelemiştir (Benayad vd,. 1998). Yang ve Zhong ise etkin alan kuramı ileenine alan S=1 Ising modelinin bazı sitelerin boş olduğu rastgele site düzensizliğinin manyetik özelliklere etkisini incelemiştir (Yang ve Zhong, 1989). Düzensiz kristal alan içeren enine alan spin-1 blume capel modelini ortalama alan yaklaşımı altında incelenmiştir (Albayrak, 2013).

Özetle, modelin denge davranışları istatistik mekanikte geliştirilen birçok teori ve yaklaşım ile incelenmiştir. Diğer yandan alan düzensizliği içeren EAI modelinin ve saf metamanyetik EAI modelinin termal faz geçişlerinin "Ricci skaleri" veya "termodinamik eğriliği" aracılığıyla detaylı bir analizi en iyi bilgimiz dahilinde henüz yapılmadı. Faz geçişlerinin geometrik açıdan incelenmesinde önemli bir yeri bulunan bir matematiksel nicelik olan termodinamik eğrilik Euclid-dışı bir geometri olan Riemann geometrisi çerçevesinde türetilmiştir (Ruppeiner 2012; Janke vd, 2003). Termodinamik geometrik yaklaşım kara delikler, tek ve çok bileşenli ideal gazlar, paramanyetik ideal gaz, ideal paramıknatıslar, ideal kuantum gazları, Takahashi ve van der Waals gazı gibi pek çok sisteme uzun bir süredir başarı ile uygulanmaktadır (Ruppeiner, 1995). Manyetik sistemler üzerindeki çalışmalar ise görece olarak daha yakın zamanda gerçekleştirildi ve başlarda tek boyutlu Ising zincirleri ve çift yaklaşımlı ortalama alan spin-1/2 Ising sistemleri ile sınırlı kaldı (Ruppeiner 1995; Janyszek ve Mrugała 1989; Erdem, 2018; Erdem, 2019). Ising modeline göre daha karmaşık bir model olan tek kristal alanın sıfır değerini aldığı izotropik Blume-Emery-Griffiths (BEG) modelinin termodinamik geometrisi Erdem ve Alata tarafından düzen parametrelerinin iki boyutlu manifoldları incelenerek ele alınmıştır (Erdem ve Alata, 2020). Bir boyutlu BEG modelini ve Blume-Capel ve Griffiths model limitlerinin kritik (südo-kritik) ve kritik olmayan parametre rejimleri için hal uzayı Riemann geometrisi elde edilmiştir (Sanwari ve Sahay 2022a). BEG modeli (kristal alanın sonlu değerler aldığı) Alata ve Erdem tarafından ortalama alan yaklaşımında incelenerek Ricci katsayısının kritik, üçlü kritik, kritik son nokta, ikili kritik son nokta yakınında ıraksadığı gösterilmiştir. Süreksiz geçişlerde ise sonlu atlama davranışı sergilediğini göstermiştir (Alata ve Erdem 2021). Sanwari ve Sahay ortalama alan BEG modelinin Euclid dışı geometrisini termodinamik hal uzayında inceleyerek üç boyutlu parametre

uzayındaki herhangi bir nokta için sadece iki bağımsız denge dalgalanma yönü olduğunu göstermişlerdir. Bu nedenle çalışmalarını üç boyutlu uzayın iki farklı hiper yüzeyinde gerçekleştirmişlerdir (Sanwari ve Sahay, 2022b). Spin-1 Ising sisteminin Gaussian eğrilikleri paramanyetik çözümlerin minimal yüzeyinin varlığı halinde elde edilmiştir (Erdem, 2023). Yerel üç kuyu potansiyeli içeren kuantum örgü sisteminin termodinamik eğriliği Ruppeiner metriği kullanılarak çalışılmıştır (Erdem, 2020).

BÖLÜM ÜÇ

MODEL, YÖNTEM VE BULGULAR

Tez çalışmasının bu bölümünde ilk olarak klasik ve kuantum faz geçişi sergileyen EAI modelinden ve bu rastgele boyuna alan ve metamanyetik karakterin modelin denge özelliklerine etkisini üzerinde duracağız. Bu maksatla faz geçişi ve kritik olaylar teorisi ve evrenselliğe dair kuramsal bilgiler vererek başlamayı uygun bulduk. Bu kapsamda faz geçişlerinin tanımı ve sınıflandırılması, ortalama alan yaklaşımının tam bir formülasyonu Landau teorisi ve uzaya bağlı özelliklerin varlığında Landau Ginzburg teorisinden söz edilecektir.

Son yıllarda faz geçişleri klasik ve kuantum faz geçişleri olarak ikiye ayrılmaktadır. Bu bağlamda model ve yöntem bölümünde kuantum faz geçişleri ve bu geçişleri sergileyen deneysel sistem ve modellerden bahsedildi. Özelde tez çalışmasına konu olan ve kuantum faz geçişi sergileyen en basit kuantum spin modeli EAI modeli ve manyetik özellikleri sıfır boyuttan başlanarak incelendi.

Daha sonra, rastgele alan düzensizliği içeren EAI modelinin denge özellikleri ortalama alan yaklaşımı altında Bogoliubov varyasyonel hesabı gerçekleştirilerek denge serbest enerjisi hesaplanmıştır. Serbest enerjinin düzen parametresine göre minimize edilmesinden hal denklemleri türetilmiştir. Bu model için iki ayrı analiz gerçekleştirilmiştir: Biri yaygın türden (mıknatıslanma) diğeri ise yoğun türden (sıcaklıkla orantılı) iki parametreli manifold için termodinamik eğriliğin faz geçişi noktaları yakınındaki davranışı ortalama alan yaklaşımı altında elde edildi. Elde edilen veriler ile rastgele boyuna alan düzensizliği içeren EAI modelinin geometrik faz diyagramları elde edilerek tartışıldı. Yukarıda anlatılan işlem ve analiz basamakları metamanyetik EAI modeli için izlendi. Ortalama alan denge hal denklemleri ve faz diyagramları elde edildi. Bu modelin Ricci skalerinin manyetik termal düzen düzensizlik faz geçişleri yakınındaki davranışı diferansiyel goemetride Ruppeiner metriği kullanılarak incelendi. Bu amaçla metamanyetik EAI modelinin sekmeli ve toplam mıknatıslanmalarına karşılık gelen iki düzen parametresi ile tanımlı iki boyutlu

manifoldda çalışıldı. Birinci, ikinci dereceden ve çoklu kritik noktalar için Ricci skaleri sıcaklık ve dış alana bağlı olarak elde edildi ve geometrik faz eğrileri sunuldu.

3.1 Faz Geçişleri

Dış parametrelerin küçük değişikliklerine dayanıklı olan (sonsuz küçük parametre değişikliklerine karşı kararlı olan) maddenin denge durumuna faz adı verilir. Termodinamik potansiyel belli bir fazda analitik bir şekilde değişir ve fazlar, yoğunluk işlemcilerinin simetrileriyle karakterize edilebilir. Faz geçişleri bir sistemin denge özelliklerinin nitel olarak değiştiği parametre uzayındaki noktadır. Faz geçişinde sistem, harici parametrelerin sonsuz küçük değişimlerine karşı kararsızdır; bu, termodinamik potansiyelin sistem parametrelerinin fonksiyonu olarak analitik olmayan davranışı ile karakterizedir.

Düzenin termal dalgalanmalar tarafından yok edildiği termal faz geçişlerini belirleyen ayarlama parametresi (tunning parameter) sıcaklıktır. Bu nedenle, faz geçişi düzenli bir düşük sıcaklık fazından düzensiz bir yüksek sıcaklık fazına gerçekleşir. Düzen parametresinin ve serbest enerji ve entropinin geçiş noktası yakınında davranışının yapısına göre faz geçişleri süreksiz veya sürekli geçişler olmak üzere ikiye ayrılır.

3.1.1 Klasik Faz Geçişleri ve Evrensellik

Bu bölümde, faz geçişlerini karakterize etmek için faydalı olan birkaç terim ve tanımı özetleyeceğiz. Burada, bir ferromanyetik maddenin düzen-bozukluk geçişine uygun olan terminolojiyi kullanacağız; ancak kavramlar çok daha geneldir.

Düzen parametresi (DP): φ gözlenebilir bir düzen parametresidir:

$$< \varphi >= 0 \rightarrow \ d\ddot{u}zensiz\ faz,$$
$$< \varphi >\neq 0 \rightarrow \ d\ddot{u}zenli\ faz. \tag{3.1}$$

Burada, köşeli parantezler <·>, uygun bir Gibbs kümesindeki termodinamik bir ortalama için ve kuantum sistemler için kuantum-mekanik bir beklenen değeri ifade etmek için kullanılır. DP çoğu durumda φ'nin uzay ve zamandaki her noktada (ilkesel olarak) tanımlanabileceği bir yerel gözlenebilir olarak seçilir. Ferromanyetik için doğal düzen parametresi mıknatıslanmadır. Düzen parametresinin seçimi tek değildir ve hatta etkileşimle yönlendirilen metalden yalıtkana geçiş gibi bazı durumlarda uygun bir düzen parametresi seçimi kolay olmayabilir. Düzen parametresinin faz geçişi noktasındaki davranışına göre kuantum faz geçişleri iki alt gruba ayrılır:

1. Faz geçişinde düzen parametresi süreksiz olarak değişiyorsa kesikli (birinci dereceden) kuantum faz geçişi.
2. Düzen parametresi faz geçişinde sürekli değişim sergiliyorsa sürekli (ikinci dereceden ve üstü) kuantum faz geçişi olarak anılır.

Faz geçişi ve kritik olaylar teorisinde korelasyonlar büyük önem taşır ve sürekli geçişler yakınında korelasyon fonksiyonları ıraksak değerler alır. Korelasyonlar: Uzay ve zamana bağlı bir düzen parametresi ($\varphi = \varphi(\vec{r}, t)$), içinkorelasyon fonksiyonları $< \varphi(\vec{r}, t)\varphi(\overrightarrow{r'}, t') >$'dir. Sürekli geçişler yakınında tekillik sergileyen diğer bir nicelik ise korelasyon uzunluğudur (ξ). Kararlı fazlarda düzen parametresikorelasyon fonksiyonu $< \varphi(\vec{r})\varphi(\vec{r}') > - < \varphi(\vec{r}) >< \varphi(\vec{r}') > \propto e^{\frac{|\vec{r}-\vec{r}'|}{\xi}}$ şeklinde bir üstel yasayı takip eder. Kritik nokta yakınında ξ hızla artar ve kritik noktada $\xi \rightarrow \infty$ olur. Özetle geçiş noktasından uzaktaki üstel azalma yerini kuvvet yasasına bırakır. Kuvvet yasalarının ölçekten bağımsız (scale invariant) olup kritik noktaya yakınken, korelasyon uzunluğu düşük enerjili fiziği karakterize eden tek uzunluk ölçeği haline gelir.

Kendiliğinden (spontan) simetri kırılması: $\hat{H}$ Hamiltonyeni ile tanımlanan sistem için $\hat{S}$ simetri işlemi düşünelim. Eğer $\hat{H}$, $\hat{S}$ altında simetrik ise: $\left[\hat{H},\hat{S}\right]_{-} = 0$ olur. Sistemin yoğunluk operatörü $\hat{\rho}$,$\hat{S}$ altında simetrik değil ise, $\left[\hat{\rho},\hat{S}\right]_{-} \neq 0$ olacaktır. Bu durumda simetri $\hat{S}$ kendiliğinden kırılır. Gibbs topluluklarında simetri kırılmasına izin vermek için ($\left[\hat{H},\hat{S}\right]_{-} = 0$ iken$\left[e^{-\beta\hat{H}},\hat{S}\right]_{-} = 0$ geçerli olmalıdır ve düzen parametresine eşlik eden (küçük) bir alan dahil etmek gereklidir: $\hat{H} \rightarrow \hat{H}$ - hφ. Kendiliğinden simetri kırılması, h→0 limitinin tekil olması anlamına gelir:

$$\lim_{h\rightarrow 0}\hat{\rho}\,(h) \neq \hat{\rho}\,(h=0). \qquad (3.2)$$

Diğer yandan simetri kırılması ancak ve ancak termodinamik limitte mümkündür: N → ∞, L → ∞,$d = \frac{N}{L^d} \rightarrow sabit$. Bunun nedeni sonlu boyuttaki bir sistemin, sonlu bir sıcaklıkta faz geçişi sergileyememesidir. Çünkü sonlu boyutta bir sistemde $e^{-\beta\hat{H}}$ ile verilen Boltzman faktörünün, sonlu sayıda üssü çarpımı mevcuttur ve tekillik sergilemez. Sonuç olarak, kendiliğinden (spontan) simetri kırılması iki limitin ($\lim_{h\rightarrow 0}\lim_{N\rightarrow\infty} \neq \lim_{N\rightarrow\infty}\lim_{h\rightarrow 0}$) sırasının önemli olduğu durumdur.

3.2 Landau Teorisi

Şimdi faz geçişi ve kritik olaylar ile ilgili bilgi verdiğimiz bu bölüme Landau teorisinin özeti ile devam edelim. Landau teorisi, yerel bir düzen parametresi φ kavramına dayanır ve ($T \rightarrow T_c$) bu parametrenin faz geçişi yakınında küçük değerler aldığı varsayılır. Deneysel gözlemler kritik noktalara yakın iken bu varsayımın doğru olduğunu kanıtlar. Teorinin amacı, faz geçişlerinin yakınındaki termodinamik özellikleri türetmektir. Basit hesaplamalardaki önemli bir engel, termodinamik potansiyelin ve türevlerinin kritik noktada analitik olmamasıdır; Taylor serisi açılımı yapılamaz. Bu sorun Landau teorisinde, düzen parametresine açık bir bağımlılık içeren genelleştirilmiş bir potansiyel kullanılarak çözülür.

3.2.1 Landau Fonksiyoneli

Landau'nun yaklaşımı, dış değişkenlere ek olarak düzen parametresine de bağlı olan genelleştirilmiş termodinamik potansiyel f tanıtarak başlar. Örneğin, bir ferromıknatıs düşünelim: denge durumunda, dış manyetik alan H ve sıcaklık T belirleyerek manyetizasyon φ ≡ M'yi tanımlar. Landau yaklaşımı, denge potansiyelini f(T, H) 'den f(T, H, φ) şeklinde genelleştirmeyi hedefler. Sonrasında, f(T, H, φ) 'nin düzen parametresine göre fonksiyon olarak tekilsizlik olduğu varsayılır. Ayrıca, sistemin denge durumunun ∂f(T,H, φ)/∂φ = 0 olarak tanımlanan φ_{eq} tarafından belirlendiği postüle edilir. Termodinamik potansiyel, f(T, H) = f(T, H, φ_{eq} (T, H)) olarak ifade edilir.

Genel olarak, f(T, H, φ) formu bilinmemektedir. Ancak, φ'nin küçük olduğu kritik noktalara yakın bir bölgede, analitiklik varsayımına dayanarak f(T, H, φ) formülü φ'nin Taylor serisinde genişletilebilir:

$$f = f_n + f_0\left(\frac{a}{2}\varphi^2 + \frac{b}{4}\varphi^4 + \frac{c}{6}\varphi^6 + \cdots - \varphi h\right). \tag{3.3}$$

Burada $h = \frac{H}{f_0}$, düzen parametresine bağlanan (veya "eşlenik olan") harici alandır ve f_n ihmal edilecek kadar küçüktür.

Yukarıdaki açılım, tüm simetriye izin veren terimleri içerir: Bir alan olmadığında, potansiyel φ işaretinden bağımsız olmalıdır φ ↔ (- φ) temelindeki Z_2 (veya Ising) simetrisini yansıtarak, bu tek φ kuvvetlerine izin vermez. Temelinde O(N) simetrisi olan bir vektör düzen parametresi ~ φ için, tüm terimler O(N) dönüşümlerine karşı değişmez olmalıdır, böylece $\vec{\varphi}^2 = \vec{\varphi}.\vec{\varphi}, (\vec{\varphi})^2, (\vec{\varphi}^2)^3$ vb. izin verilir. (3.3) denklemi, düzen parametresi için etkili bir modeli temsil ettiğinden, katsayıları a, b, vb. simetrileri koruyan dış parametrelerin düzgün fonksiyonları olarak kabul edilebilir (özellikle sıcaklık simetrisini koruyanlar).

Dördüncü dereceye kadar genişlemesi için h = 0 için tartışma: φ 'nin bir fonksiyonu olarak potansiyel f'nin minimumları ($\frac{\partial f}{\partial \varphi} = 0$) belirlenir ve bunlar şu şekilde verilir;

$$\varphi = \begin{cases} 0\,, & a > 0 \qquad (düzensiz\ faz) \\ \pm\sqrt{-a/b}, & a < 0 \qquad (düzenli\ faz). \end{cases} \tag{3.4}$$

Burada düzenli faz için b > 0 gereklidir. φ = 0, a < 0 için $\frac{\partial f}{\partial \varphi} = 0$ denkleminin bir çözümüdür, ancak burada f'nin bir maksimumuna karşılık gelir ve düzensiz bir durum olarak yorumlanır. a = 0, faz geçiş noktasına (T = T_c) karşılık gelir. a sıcaklığın düzgün bir fonksiyonu olmalıdır, bu nedenle en düşük sıfır olmayan düzeye genişletebiliriz $a(T) = \alpha(T - T_c)/T_c \equiv \alpha t$, burada indirgenmiş sıcaklığı tanımlamak için αt kullanılmıştır.

$$t = \frac{|T - T_c|}{T_c}. \tag{3.5}$$

Düzen parametresi daha sonra şu şekilde verilir:

$$\varphi = \begin{cases} 0, & T > T_c \\ \pm\sqrt{\frac{\alpha}{b}(-t)}, & T < T_c. \end{cases} \tag{3.6}$$

Bu karekök davranışı Landau teorisine özgüdür. İki olası işaret, varsayılan Z_2 simetrisinin kendiliğinden olarak kırılmasına karşılık gelir; vektör düzen parametresi için büyüklüğü $\sqrt{-a/b}$ tarafından sabitlenirken yönü keyfi olacaktır. Termodinamik gözlemlenebilirler, Landau fonksiyonunun ifadesine φ değerinin yerleştirilmesi ve uygun türevlerin alınmasıyla elde edilir:

$$f_n = \begin{cases} f_n(T) & T > T_c, \\ f_n(T) - f_0\frac{\alpha^2}{4b}\left(\frac{T_c - T}{T_c}\right)^2 & T < T_c, \end{cases} \tag{3.7}$$

$$\frac{S}{V} = -\frac{\partial F}{\partial T} = \begin{cases} s_0(T) & T > T_c, \\ s_0(T) - f_0 \dfrac{\alpha^2}{2b} \dfrac{T_c - T}{{T_c}^2} & T < T_c, \end{cases} \tag{3.8}$$

$$C = T\frac{\partial (S/V)}{\partial T} = \begin{cases} c_0 & T > T_c, \\ c_0 + f_0 \dfrac{\alpha^2}{2b} \dfrac{1}{T_c} & T < T_c. \end{cases} \tag{3.9}$$

$h \neq 0$: f'nin φ'ye göre minimizasyonundan

$$\alpha t\varphi + \mathrm{b}\varphi^3 = h, \tag{3.10}$$

elde edilir. Eşitlik (3.8)'de t > 0 için bir çözüm varken, t < 0 küçük h değerleri için üç çözüm (biri f'nin bir maksimumuna karşılık gelir) ve büyük h değerleri için ise tek bir çözüm vardır. φ işaretinin birine bağlı olarak f'nin iki minimumu vardır. Ferromanyetikler için, spinler alana paralel olmayı şeçtiğinden düzen parametresini $\varphi(\mathrm{h}) = \varphi_{spont} + \chi(T) * h$ şeklinde tanımlamak faydalıdır, burada $\chi = \frac{\partial \varphi}{\partial h}|_{h\to 0}$ düzen parametre alınganlığı ve φ_{spont} ise düzen parametresinin manyetik alanın sıfır olduğu durumdaki değerini ifade eder. Denklem (3.6) kullanılarak alınganlığı veren ölçekleme ifadesi elde edilir:

$$\chi(T) = \begin{cases} \dfrac{1}{t} & T > T_{c,} \\ \dfrac{1}{2|t|} & T < T_c. \end{cases} \tag{3.11}$$

Bu nedenle, faz geçişi noktasına yaklaştıkça χ artar ve T_c'de ıraksar. $T = T_c$'de serbest enerjideki φ^2terimi sıfıra gider, bu da kritik izoterm boyunca düzen parametresinin alan bağlılığını verir.

$$\varphi \propto h^{\frac{1}{3}}. \tag{3.12}$$

3.3 Konuma Bağlı Korelasyonlar ve Ginzburg-Landau Teorisi

Şimdiye kadar düzen parametresinin konuma homojen olarak bağlı olduğunu varsaydık. Bu varsayım, konuma bağlı olarak değişen bir düzen parametre alanının tanıtılmasıyla genelleştirilebilir:

$$\varphi \rightarrow \varphi(\vec{r}). \tag{3.13}$$

Burada, $\vec{r}$ sürekli bir uzay koordinatıdır. Böyle bir süreklilik-limiti açıklaması, yukarıda belirtildiği gibi mikroskobik serbestlik derecelerinin uygun bir genelleştirmesini gerektirir. Bu da, kavramsal olarak, $\varphi(\vec{r})$'nin mikroskobik uzunluklardan çok dahabüyük uzunluk ölçeklerindeki konuma bağlı değişimleri yakalayan pürüzsüz bir$\vec{r}$fonksiyonu olması gerektiği anlamına gelir. Bu tür değişimlerin bir enerji maliyeti getirmesi beklenir, böylece Landau fonksiyonu aşağıdaki gibi genelleştirilebilir.

$$f\big(T, H, \varphi(\vec{r})\big) = f_n + f_0\left(\frac{a}{2}\varphi(\vec{r})^2 + \frac{b}{4}\varphi(\vec{r})^4 + \xi_0^2\big(\vec{\nabla}_{\vec{r}}\varphi(\vec{r})^2\big) - \varphi(\vec{r})\mathrm{h}\right). \tag{3.14}$$

Uzaysal ters çevirme simetrisinin varlığından dolayı serbest enerji fonksiyonu gradyanların tek kuvvetlerinin varlığına izin vermez. Bu nedenle denklem (3.12)'dekigradyan terimi, φ'in simetriile uyumlu ($\varphi(\vec{r}) \rightarrow -\varphi(\vec{r})$) kuvvetlerinde ve gradyanlarında bir genişlemeyle ortaya çıkan en düşük ek terimdir. f(T, H, $\varphi(\vec{r})$) yerel bir enerji yoğunluğudur ve Ginzburg Landau (serbest) enerjisi olarak anılır. Ginzburg Landau serbest enerjisi (F) bu yoğunluk cinsinden aşağıdaki gibi ifade edilebilir:

$$F = \int d^d r\, f(\vec{r}). \tag{3.15}$$

Ginzburg-Landau teorisi özellikle süperiletkenlik alanında kullanılmaktadır, burada karmaşık bir skaler alan olan φ, dış bir manyetik alanın varlığındaki süperiletken (kondensat) yoğuşmayı tanımlar ve bu yoğuşma vorteks durumlarına yol açarak heterojen hale gelebilir. DP'nin(φ) uzaysal korelasyonlarını Ginzburg-Landau teorisi ile hesaplayabiliriz. Uzaya bağlıkorelasyonlar:

$$G(\vec{r},\vec{r}') =< \varphi(\vec{r})\varphi(\vec{r}') > - < \varphi(\vec{r}) >< \varphi(\vec{r}') >=< \varphi(\vec{r})\varphi(\vec{r}') > -\varphi_0^2. \quad (3.16)$$

ile verilir. Burada φ_0,$\varphi(\vec{r})$ 'nin uzaysal olarak homojen haline karşılık gelir. Düzenli fazda, ($\varphi_0 \neq 0$olduğunda), yansıtıcı uzun menzilli düzen vardır ve $G(\vec{r},\vec{r}')$, φ_0 etrafındaki dalgalanmaların korelasyonlarının bir ölçütüdür.

$$\lim_{|\vec{r}-\vec{r}'|\to\infty} < \varphi(\vec{r})\varphi(\vec{r}') >= \varphi_0^2, \quad (3.17)$$

ve

$$\delta F = \frac{f_0}{2}\int d^d r\delta\varphi(\vec{r})\left(\alpha t + 3b\varphi_0^2 - \xi_0^2\vec{\nabla}_{\vec{r}}^{\,2}\right)\delta\varphi(\vec{r}). \quad (3.18)$$

$\delta\varphi$'nin Fourier açılımı ayrıştırmasından sonra korelasyon fonksiyonu, $e^{-\beta\delta F}$ile beklenen değer olarak hesaplanabilir. Sonuç olarak;

$$G(k) =< \delta\varphi(\vec{k})\delta\varphi(-\vec{k}) >= \frac{kT}{f_0(A+\xi_0^2k^2)}. \quad (3.19)$$

Burada $A = \alpha t + 3b\varphi_0^2$. Fourier-dönüşümünün gerçek uzaya geri dönüşü G(r)'yi verir. Daha büyük $r = |\vec{r} - \vec{r}'|$için korelasyon fonksiyonunun limiti vardır

$$G(r) \propto \frac{e^{-\frac{r}{\xi(T)}}}{r^{\frac{d-1}{2}}} \xi^{\frac{3-d}{2}}, \tag{3.20}$$

ve büyük mesafelerde eksponansiyel terimin üsteli baskındır. Ginzburg-Landau teorisine göre korelasyon uzunluğu indirgenmiş sıcaklık t'ye aşağıdaki gibi bağlıdır

$$\xi(T) = \begin{cases} \frac{\xi_0}{\sqrt{\alpha t}} & T > T_{c,} \\ \frac{\xi_0}{\sqrt{2\alpha|t|}} & T < T_c. \end{cases} \tag{3.21}$$

ξ'nin ıraksaması $\xi \propto |t|^{-\nu}$şeklindedir ve $\nu = \frac{1}{2}$'dir. Farklı bir korelasyon uzunluğu, kritik noktaya yaklaştıkça, artan boyutta yerel olarak düzenli adaların (manyetik domain) varlığını ima eder. Kritik noktaya yakın, düzen parametresinin uzayda yavaşça değiştiği gerçeği, Ginzburg-Landau teorisindeki gradyan genişlemesinin ana gerekçesidir.

Kritik nokta yakınında korelasyon uzunluğuna paralel olarak korelasyon süresi de ıraksar. Kritik yavaşlama olarak bilinen bu fenomen kritikliğe yaklaştıkça manyetik domenlerdeki dalgalanmaları çok daha yavaş hale getirir.

Korelasyon fonskiyonu için Ginzburg-Landau ifadesini denklem (3.19) kullanarak, kritik noktadaki korelasyon fonksiyonunun bir kuvvet yasası ile verildiğini gösterebiliriz

$$G(r) \propto r^{2-d} (\xi = \infty). \tag{3.22}$$

Bu noktada bu sonucun yalnızca d > 2 için geçerli olduğunu belirtelim.

3.3.1 Dalgalanmalar ve Ginzburg Kriteri

Şimdiye kadar Landau teorisini, bir veya daha fazla yerel düzen parametresine sahip sistemlere uygulanabilen, faz geçişini tanımlayan basit bir fenomenolojik teori olarak tanımladık. Landau teorisi, düzen parametresi alanının φ uzay ve zamanda dalgalanmasına izin verildiği daha genel bir teorinin (yol integral dilinde formüle edilmiş) eyer noktası çözümü olarak yorumlanabilir. Eyer noktası çözümü φ sabitlendiğinden, dalgalanmaları Landau teorisinde ihmal edilir ve bu durum ortalama alan yaklaşımına karşılık gelir.

Landau teorisine dayanan basit bir tanım kullanarak sıcaklık sıfıra giderken ($t \to 0$) dalgalanmaların ihmal edilmesinin geçerliliğini gösterebiliriz:

$$|t|^{\frac{d-4}{2}} \to \begin{cases} 0 & d > 4, \\ \infty & d < 4\,. \end{cases} \tag{3.23}$$

Ginzburg kriteri olarak bilinen bu durum, d < 4 boyutlarında kritikliğe yaklaşıldığında dalgalanmaların kaçınılmaz olarak önemli hale geldiğini, oysa d > 4 için önemsiz olduklarını göstermektedir. Bu, Landau teorisinin d > 4 için, özellikle kritik üsteller için asimptotik olarak kesin olduğunu ima eder. Landau teorisi tarafından tahmin edilen üsteller (genellikle ortalama alan üstelleri olarak adlandırılır) d > 4 için kesindir. Buna karşılık, d < 4 için kritikliğe yakın dalgalanmalar ihmal edilemez ve bu nedenle Landau teorisi başarısız olur. $d_c^+ = 4$, üsteli kritik boyut olarak adlandırılır. Bu durum hakkında iki açıklama vardır:

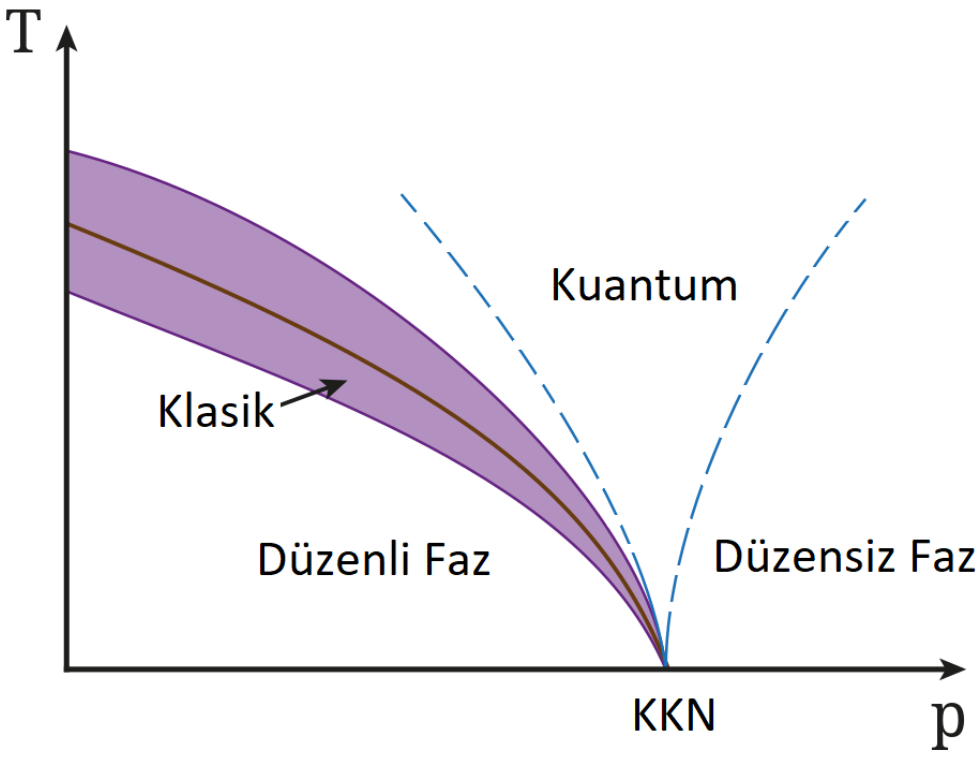
(i) Diğer pek çok yaklaşık teorinin tersine Landau teorisi kendi başarısızlığını tahmin edebilir.

(ii) Dalgalanma terimlerinin önündeki sayısal ön faktör küçükse d = 3 için ortalama alan üstellerinin deneysel olarak gözlemlenebildiği sistemler vardır: Geleneksel süperiletkenlerin d = 3'teki süperiletken geçişinde geçiş sıcaklığı ve Fermi sıcaklığı arasındaki küçük oran nedeniyle dalgalanmalar yalnızca $t < 10^{-10}$veya daha fazla ise önemli hale gelir.

3.4 Kuantum Faz Geçişleri

Klasik faz geçişlerinden çok daha farklı doğaya sahip kuantum faz geçişleri (KFG), sıfır sıcaklıkta (T = 0), basınç, (enine) manyetik alan veya kimyasal bileşim ve uzaya bağlı değiş-tokuş etkileşmesi gibi termal olmayan kontrol parametrelerinin değiştirilmesiyle meydana gelirler. KFG, yerel enerjinin kontrol parametrelerinden kaynaklanan analitik olmayan davranışından ileri gelir.

Sıfır sıcaklıkta termal dalgalanmalar olmadığından, KFG "kuantum dalgalanmaları" tarafından yönlendirilir. Bu noktada "dalgalanmalar" terimi dikkatli bir şekilde kullanılmalıdır: Sıfır sıcaklıkta, bir kuantum sistemi tek bir faz uyumlu (çoklu cisim) dalga fonksiyonu ile tanımlanır. Bir referans durumundan (örneğin, düzenli manyetik bir sistemden) sapmaları karakterize etmek için en uygun terim dalgalanmalardır (Vojta, 2015).



Şekil 3.1 Sürekli bir kuantum faz geçişinin yakınında genel faz diyagramı

Deneysel olarak, sıfır sıcaklığa erişilemez. KFG'nin neden ilginç olduğunu anlamak için, genel "kuantum kritik" faz diyagramını, hem termal olmayan kontrol parametresi hem de sıcaklık olarak işlev gören şekliyle düşünmemiz gerekiyor, şekil 3.1 sürekli bir KFG için, sıfır sıcaklık ekseni, bir kuantum kritik nokta (KKN) tarafından ayrılmış iki kararlı faza bölünür. Sonlu-T kısmı, kararlı fazlardan türetilen iki düşük sıcaklık aralığı ve KKN'nin üstündeki yüksek sıcaklıklarda bir "kuantum kritik" bölge içerir.

Kuantum ve düzensiz fazı ayıran kesikli çizgiler önde gelen kritik tekilliklerin gözlemlenebildiği kuantum kritik bölgenin sınırlarını gösterir; bu geçiş çizgileri $k_B T \sim |\Omega - \Omega_c|^{\alpha}$ tarafından verilir. Düzen, sonlu sıcaklıkta da var olabilir. Kesintisiz çizgi, düzenli ve düzensiz fazlar arasındaki sonlu sıcaklık sınırını işaretler. Bu çizgiye yakın kritik davranış klasiktir.

Şekil 3.1'de sıfır sıcaklık ekseni, Ω_c'de bir kuantum kritik noktasıyla ayrılan iki sabit temel duruma sahiptir. Düşük sıcaklık davranışı, temel durumun üstündeki temel uyarımlar dikkate alınarak anlaşılabilir. Düzensiz (simetrisi bozuk olmayan) fazda, bu uyarımlar tipik olarak sonlu bir enerji aralığı Δ olan iyi tanımlanmış yarı parçacıklardır. Karşılık gelen düşük sıcaklık rejimi, üstel olarak küçük bir termal olarak uyarılmış kuasi parçacık yoğunluğu ile temel durumun özelliklerini koruyacaktır - bu, kuantum düzensizliği olarak adlandırılan rejimdir. Benzer bir tartışma, KFG'nin düzenli fazı için iki komplikasyonla birlikte geçerlidir:

(i) Termal dalgalanmalar, zaten sonsuz sıcaklıktaki düzeni bozabilir: Bu, d = 1'deki Ising sistemleri ve d = 2'deki Heisenberg sistemleri için geçerlidir ve termal olarak yol açar. Şekil 3.1'de gösterildiği gibi herhangi bir sonlu sıcaklıkta düzensiz faz sergilenir.

(ii) Sonlu T'de düzen var olmaya devam etse bile, sürekli bir simetrinin kendiliğinden kırılması durumunda uyarım boşluğu olmayacaktır. Bununla birlikte, termal olarak uyarılmış yarı parçacıkların yoğunluğu küçük olacaktır.

Bu noktadaki önemli husus düzenin sonlu T olduğu yerde, sonlu bir sıcaklık geçişi vardır. Yukarıdaki tartışmaya göre, sonlu-T geçiş çizgisine yakın dar bir rejim için geçerli olan $k_B T \gg \omega_c$ ise kritik davranış klasiktir.

Son olarak, özellikle yüksek sıcaklıklarda, kritiklikten uzaktaki davranış evrensel olmaktan çıkar. Bu, düzen parametresi korelasyon uzunluğu ξ artık büyük olmadığında geçerlidir - bu, J'nin temsili bir mikroskobik enerji ölçeği olduğu $k_B T \gtrsim J$ sıcaklıkları için geçerlidir. Sayısal simülasyonlar, yalıtkan mıknatıslardaki kuantum kritik davranışın, J'nin değişim sabiti olduğu J/3 sıcaklıklarına kadar gözlemlenebileceğini göstermiştir (Kopp, 2005).

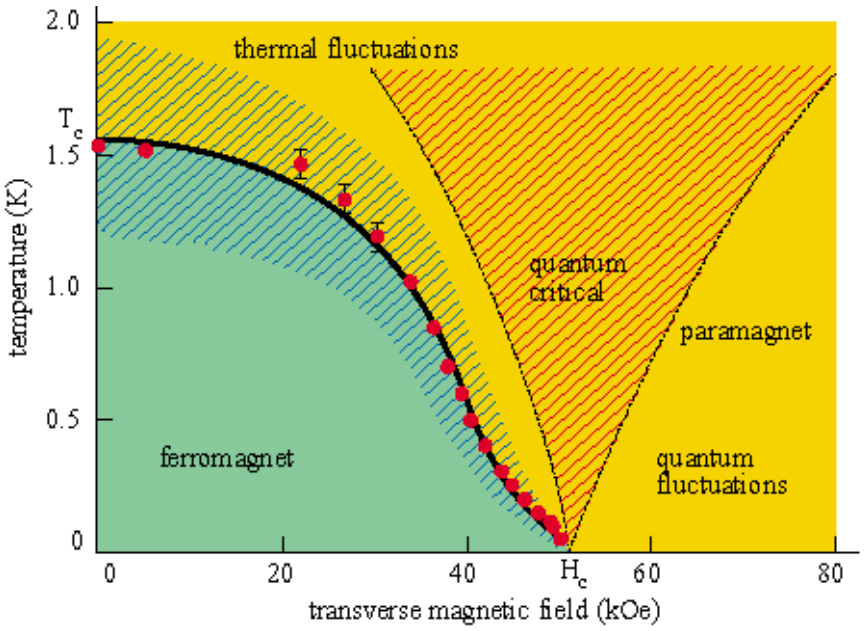
Kararlı fazlar genellikle geleneksel kuaziparçacık uyarılmaları sergiler, uygun spektral fonksiyonlarda keskin tepe noktaları aracılığıyla tanımlanabilen geleneksel kuantum sayılarına (ve istatistiklere) sahip nesneler; örnekler, bir Fermi sıvısındaki

parçacık-boşluk uyarılmaları veya düzenli bir manyetikte spin dalgalarıdır. Bu durumda, düşük sıcaklık termodinamiği, bu kuaziparçacık durumlarının termal işgalini tanımlayarak $C(T) \propto T$ örneğinde olduğu gibi bir özgül ısıya sahip olabilir.

Buna karşılık, kuantum kritik temel durumunun elementer uyarılmaları genellikle kuazi parçacıklar olarak tanımlanamaz, ancak kritik bir süreklilikte uyarılmalar vardır. KKN'den başlayarak sıcaklığı arttırdığımızda, bu kritik süreklilik uyarılacak ve sıcaklığın fonksiyonu olarak termodinamik gözlemlerin güç yasası davranışına neden olacaktır ve bu yasaların ilkel olmayan üstelleri vardır. Bu güç yasaları, kuantum kritikliğin deneysel olarak erişilebilirişaretleridir; bu, KKN'deki temel durumunun bir "yeni madde durumu" olduğunu belirtir.

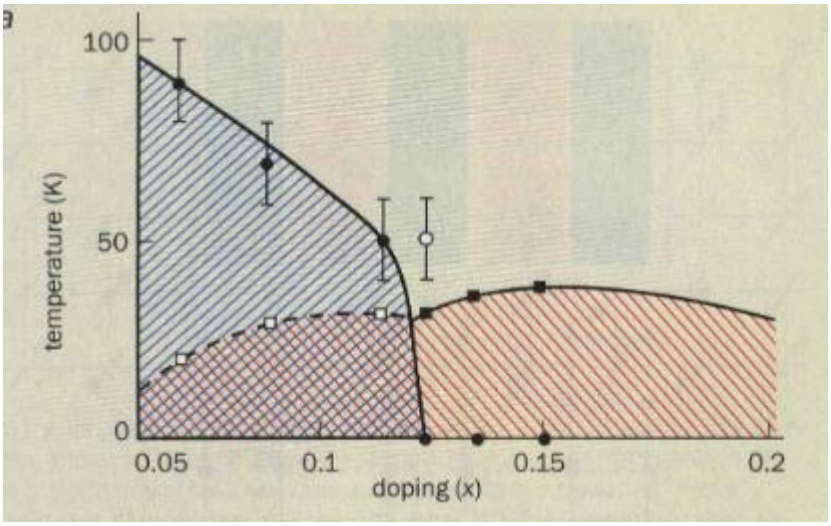
3.4.1 Kuantum Faz Geçişi Sergileyen Deneysel Sistemler ve Faz Eğrileri

Manyetik sistemlerdeki klasik faz geçişleri spinlerin eş yönelme eğilimi ile oluşan manyetik düzeni yok eden termal dalgalanmaların bir sonucudur. Diğer değişle kritik ve kritik son noktalar düzen ile termal dalgalamalar arasındaki bir rekabetin sonucudur. Kuantum faz geçişlerindeki mekanizma ise tamamen farklıdır: Heisenberg belirsizlik ilkesi sonucu oluşan kuantum dalgalanmaların bir sonucu olarak ortaya çıkar. Yakın zaman önce gerçekleştirilen deneysel ve kuramsal çalışmalar sıfır sıcaklık kuantum kritik noktanın pek çok katı hal sisteminin davranışını incelemede ışık tutacağını göstermektedir. Bunlara örnek olarak nadir toprak manyetik yalıtkanlar, yüksek sıcaklık süperiletkenleri ve iki boyutlu elektron gazları verilebilir.



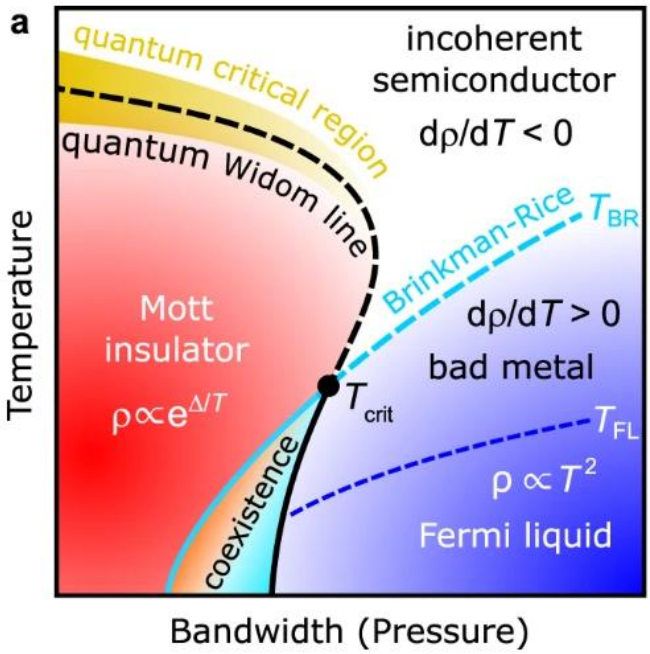
Şekil 3.2 $LiHoF_4$'e ait enine alan-sıcaklık faz diyagramı (Bitko, 1996)

Tarihsel olarak kuantum kritiklik sergileyen ilk sistemlerden biri olan $LiHoF_4$ isimli bir ferromanyetiktir. Bitko ve Rosenbaunnve Aeppli Chicago ve Prinston Üniversitelerinde eş zamanlı gerçekleştirdikleri alınganlık ölçümü çalışmalarında $LiHoF_4$'ün kuantum kritiklik sergilediğini gözlemlemiştir. Şekil 3.2'de bu ferromanyetiğin sıcaklık-enine alan faz diyagramı verilmiştir. Sürekli siyah çizgi ferro ve para fazları ayıran faz geçişlerini belirtir. Bu geçişler sıcaklık tarafından yönlendirilen termal geçişlerdir ve standart Ising evrensellik sınıfında yer alırlar. H=0 iken T=Tc'de klasik bir faz geçişi gerçekleşirken aynı durum T=0, H=Hc iken geçerli değildir. Bu son noktadaki faz geçişi tamamen farklı bir doğaya sahiptir. Ve kuantum faz geçişi olarak anılır. Bu malzemenin kuantum faz geçişi sergilediğinin gözlemlenmesi ile ileriki bölümlerde söz edeceğimiz EAI modeli büyük popülerite kazanmıştır (Bitko, 1996).



Şekil 3.3 La_{2-x} Sr_x CuO_4'a ait katkılanma-sıcaklık faz diyagramı (Hunt vd., 1999)

Daha sonra Hunt ve arkadaşları sıfır sıcaklık kuantum kritik nokta içeren faz diyagramını nükleer durulma deneyleri ile incelenmişler ve La_{2-x} Sr_x CuO_4'a ait faz diyagramlarını şekil 3.3'deki gibi elde etmişlerdir (Hunt vd., 1999). Yapılan ölçümlerde küçük katkılama değerleri (x) için kuasi klasik dalga davranışı, yüksek katkılama değeleri için ise kuasi klasik parçacık davranışı sergilediği ortaya konmuştur. Faz diyagramındaki kırmızı taralı bölgeler süperiletken faza karşılık gelmektedir.



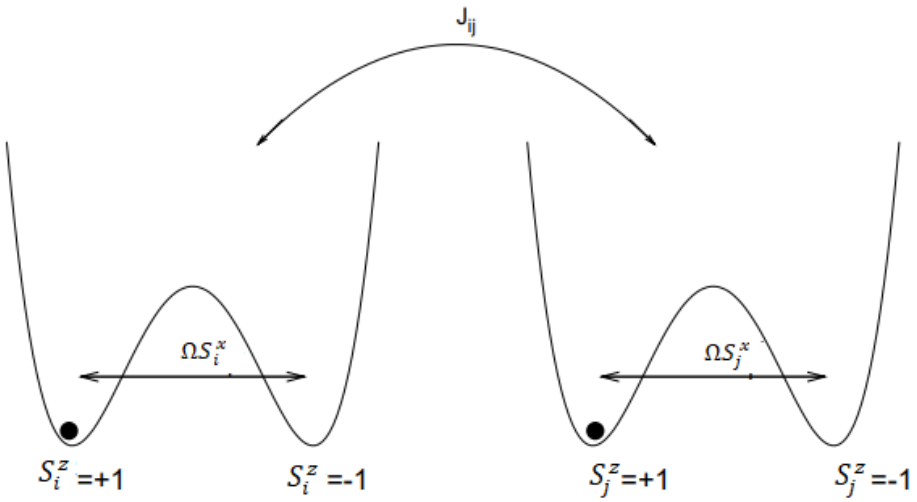
Şekil 3.4 Mott yalıtkanı metal geçişine ait faz diyagramı(Pustagow vd., 2021)

Son olarak κ-(BEDT-TTF)$_2$Cu$_2$(CN)$_3$ tek kristalleri için yalıtkanlarına ait kuantum faz geçişi, kuantum kritik faz geçişi sergileyen faz diyagramı şekil 3.4'de verilmiştir (Pustagow vd., 2021). Bu da Mott yalıtkan metal geçişleri için bir örnektir.

3.4.2 Kuantum Faz Geçişi Sergileyen Teorik Modeller

Bu bölümde, kuantum faz geçişleri olarak adlandırılan sıfır sıcaklıkta gerçekleşen faz geçişi sergileyen model sistemlerine değineceğiz. Bu modeller sırasıyla kuantum Ising modeli, kuantum rotor ve çiftlenimli-dimer modelleridir. Bu tez çalışmasında ise kuantum Ising modeli olarak da anılan EAI modeli çalışılmıştır. Bu nedenle bu alt bölümün kalan kısmında biri uzun erimli düzeni destekleyen diğeri ise düzeni bozma eğiliminde olan yerel kuantum dalgalanmalarını destekleyen iki Hamiltonyen terimi arasındaki rekabetle karakterize edilen EAI modeline odaklanacağız.

3.4.2.1 Enine Alan Ising Modeli



Şekil 3.5 Ferroelektrik kristallerde protonun maruz kaldığı çift kuyu potansiyeli

Çift kuyu potansiyeline sahip potasyum dihidrojen fosfat (KDP veya KH_2PO_4) kristalleri gibi ferroelektrik sistemlerindeki düzenli-düzensiz faz geçişini başarı ile açıklayan EAI modeli uzun yıllardır çalışılmaktadır. Böylesi sistemlerdeki manyetik düzeni ve ilgili mekanizmaları anlayabilmek için ferroelektriklerdeki çift kuyu yapısına bakmakta yarar vardır: Şekil 3.5'de KPD sistemindeki her bir oksijenden kaynaklanan çift kuyu potansiyeli hidrojen (proton) için iki olası minimum enerjili hal oluşturur. Proton iki minimadan birinde yer alabilir ve bu haller $|\uparrow>$ ve $|\downarrow>$ ile gösterilebilir. Diğer yandan yeterince düşük sıcaklıklarda termal dalgalanmalar yok olsa dahi bu sistemdeki protonun kuantum doğasından dolayı düşük sıcaklıklarda ısıl dalgalanmalar olmasa dahi tünelleme olayı mümkündür. Şekil 3.5'deki ΩS^x terimi bu tünellemeyi belirtir. Tünelleme olayını formüle etmenin spin temsil karşılığını oluşturmak Pauli spin operatörlerinden S^x'i kullanmakla mümkündür. Bu nedenle bu model literatürde südo-spin modeli olarak da geçer:

$$S^x|\uparrow> = |\downarrow> \text{ ve } S^x|\downarrow> = |\uparrow>, \tag{3.24}$$

burada |↑>, (+1) öz değerine, |↓> ise (-1) öz değerine sahip baz vekörleridir. Bunlar

$$|\uparrow> = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, |\downarrow> = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}. \tag{3.25}$$

Yukarıda belirtilen özelliklere haiz sistemleri aşağıdaki Hamiltonyen ile betimleyebiliriz:

$$H_I = -\sum_{<ij>} J_{ij} S_i^z S_j^z - \Omega \sum_i S_i^x. \tag{3.26}$$

Bu Hamiltonyen ilk olarak de Gennes tarafından enine alan Ising modeli olarak anılmış ve pek çok çalışmaya konu olmuştur (de Gennes, 1963). Denklem (3.26)ile verilen Hamiltonyende Ω tünelleme integralini imler ve ilgili parçacığın kütlesini ve enerji bariyerinin genişlik ve yüksekliğine bağlıdır. (3.26)'daki ilk terim, değiş tokuş etkileşmesinden ileri gelirken ikinci terim modelin $S_i^z \leftrightarrow -S_i^z$'ye karşılık gelen bir Z_2 simetrisine sahip olacağı şekilde, Ising eksenine dik bir yönde harici bir manyetik alana karşılık gelir. Burada J spinler arası değiş tokuş etkileşim enerjisini temsil eder. Son olarak boyutsuz Ω parametresi sistemin T = 0'daki davranışını kontrol eder. Spin değişkenleri Pauli spin matrislerine sahiptir:

$$S^x = \begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}, S^y = \begin{pmatrix}0 & -i\\i & 0\end{pmatrix}, S^z = \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}. \tag{3.27}$$

Enine alan Ising modeli ortalama alan yaklaşımı dışında bir kuantum spin modelidir ve spinler arasında aşağıda verilen komütasyon ilişkileri geçerlidir:

$$\left[S_i^\alpha, S_j^\beta\right] = 2i\delta_{ij} \in_\alpha \beta_\gamma S_i^\gamma. \tag{3.28}$$

Şimdi enine alanın limit durumlarına bakalım:

$\Omega \rightarrow 0$ limitinde temel durum, mükemmel hizalanmış durum $|\uparrow>=\prod_i|\uparrow>_i$ $veya$ $|\downarrow>=\prod_i|\downarrow>_i$olacaktır. Bu temel durum kendiliğinden kırılmış bir Z_2 simetrisine sahiptir. Küçük sonlu Ω değerleri için, bazı spinler terslenmeye başlar ancak halen Z_2simetrisi kırılmış durumdadır. Bu düzenli durumda, düzen parametresi $<0|S_i^z|0>=\pm N_0$, tekdüze bir mıknatıslanmayı (bölge başına), bir ferromanyetik fazı temsil eder. $\Omega \rightarrow \infty$ limitinde ise durum farklıdır; temel durum $|0>=\prod_i|\rightarrow>_i$ halini alır, spinler alan yönünde kutuplanmıştır. Büyük sonlu Ω değerleri için, birlikte yönelmeyen spin çiftleri temel duruma katkı verir. Bu düzensiz durum, Hamiltoniyenin herhangi bir simetrisini bozmaz. Bu nedenle, Ω'nin değiştirilmesi ile T = 0'da bir faz geçişi gerçekleşir. Tersine Ω'nin azaltılması halinde $\Omega = \Omega_c$'de düzen tekrar oluşur. Özetle $\Omega = \Omega_c$, T=0 kuantum faz geçişinin koordinatlarıdır ve yüksek sıcaklıklarda gerçekleşen termal faz geçişlerinden farklı ölçekleeme davranışına sahiptir, d uzay boyutlarındaki bu kuantum faz geçişi, d + 1 boyutlu klasik Ising modelinin evrensellik sınıfındadır.

Uzay boyutları d ≥ 2 olduğunda Ising düzeni sonlu sıcaklıkta da mevcuttur. Deneysel olarak erişilebilir bir kuantum faz geçişine sahip kuantum Ising sistemi, ferromanyetik etkileşimlere ve güçlü bir Ising anizotropisine sahip manyetik yalıtkanlarda gerçekleştirilebilir. Kuantum Ising faz geçişleri sergileyen iki gerçek sistem üç boyutlu bir Ising sistemi olan (ancak en yakın komşu etkileşimler yerine uzun menzilli dipolar etkileşimlere sahip olan) $LiHoF_4$ ve kuazi-tek boyutlu bir sistem olan $CoNb_2O_6$ (Bitko, 1996; Coldea vd., 2010).

3.5 Klasik ve Kuantum Dalgalanmalar

Gibbs kanonik topluluğundaki bölüşüm fonksiyonu şu şekilde verilir:

$$Z = Tr\left[e^{-\beta\hat{H}}\right], \tag{3.29}$$

klasik sistemler için kinetik ve potansiyel parçalara ayırır:

$$H = T + V, \tag{3.30}$$

$$Z = Tr\left[e^{-\beta\hat{H}}\right] = Tr\left[e^{-\beta T}e^{-\beta V}\right], \tag{3.31}$$

$e^{-\beta T}$ Gauss integrallerinin bir ürünü olan kinetik enerji, ($T = \sum_i {p_i}^2/2m$), jenerik olarak bölüşüm fonksiyonuna analitik katkıda bulunur. Dolayısıyla, Z'deki herhangi bir analitik olmama, faz geçişine karşılık gelen, yalnızca $e^{-\beta V}$ potansiyel teriminden kaynaklanabilir.

Dinamik kritik üstel olan z dışındaki tüm dinamik üsteller bölüşüm fonksiyonun statik kısmından elde edilir. Klasik faz geçişlerinden tamamen farklı olarak kuantum faz geçişlerinde dinamik kritik üstel z diğer kritik üstellerden bağımsızdır. Belirli bir "statik" evrensellik sınıfı, farklı dinamiklere sahip olabilir. Buna karşılık, kuantum sistemler için durum farklıdır: Genel olarak, $\left[\hat{T}, \hat{V}\right]_- \neq 0$. Sonuç olarak, kinetik ve potansiyel işlemciler, bölüşüm fonksiyonunda yer değiştirmez (komüt değildirler):

$$e^{-\beta\hat{H}} \neq e^{-\beta T}e^{-\beta V}. \tag{3.32}$$

Bu nedenle, statik ve dinamik her zaman birleştirilir ve z dinamik üsteli, belirli bir evrensellik sınıfının üstelleri kümesinin ayrılmaz bir parçasıdır. Kuantum ve klasik

geçişlerin varlığı halinde herhangi bir sürekli faz geçişine yakın, korelasyon uzunluğu ve korelasyon süresi ıraksar:

$$\xi \to \infty, \quad \tau_c \to \infty, \tag{3.33}$$

τ_c'nin sapması, kritiklikte sıfıra giden düzen parametresi dalgalanmaları için tipik enerjiyi temsil eden bir $\hbar\omega_c$ enerji ölçeğinin varlığını ima eder. Bu, klasik ve kuantum faz geçişleri arasında keskin bir ayrım sağlar: Düzen parametresi dalgalanmaları klasik istatistiksel mekaniği takip ediyorsa, yani geçiş klasiktir.

$$k_B T_c \gg \hbar\omega_c. \tag{3.34}$$

Sonuç olarak $T_c > 0$ olan tüm faz geçişleri, uzun mesafe dalgalanmalarının klasik limitte olması anlamında (asimptotik olarak) klasiktir. Bunun düzenli durumun altında yatan fizik hakkında bir açıklama sunmadığına dikkat edin: Örneğin, süperiletkenlik sergileyen sistemler kuantumlu olsa da, sonlu-T için süperiletken bir duruma sahip faz geçişinin klasik termal bir doğaya sahiptir.

T_c=0 için, düzen parametresi dalgalanmalarını açıklamak için kuantum istatistiklerine kaçınılmaz olarak ihtiyaç duyulur, dolayısıyla tüm sıfır sıcaklık geçişleri doğası gereği kuantumdur. Sıcaklık ve termal olmayan bir kontrol parametresi tarafından yayılan bir faz diyagramında, bir kuantum faz geçişi tipik olarak sonlu sıcaklık geçişleri çizgisinin bitiş noktasıdır, genişliği Tc → 0 olarak sıfıra giden klasik geçişe yakın bir bölgede karşılanmaktadır.

3.6 Sıfır Boyutlu Enine Alan Ising Modeli

Ising modelinin en basit durumu h manyetik alanı içindeki bir tek spindir. Bu sistem için Ising modeli hem klasik durum hem de kuantum durum için çözülebilir.

Bu bölümde, mıknatıslanma, manyetik alınganlık ve korelasyon fonksiyonu hem klasik durum hem de kuantum durum için hesaplanmıştır.

3.6.1 *Boyuna Alanda Klasik Tek Spin*

Boyuna alanda klasik spin modeli h ile başlayarak, Hamiltoniyen basitçe şu şekilde yazılabilir:

$$H_{klasik} = -hm, \tag{3.35}$$

burada m ϵ {-1,1}. Yukarı ve aşağı durum arasındaki enerji farkı, enerji aralığı ile adlandırılır ve Δ=2h olarak ifade edilir. Hamiltoniyenden bölüşüm fonksiyonu, serbest enerji ve mıknatıslanma hesaplanabilir.

$$Z = \sum_{\mathrm{m} \in \{-1,1\}} e^{-hm/T} = e^{-h/T} + e^{h/T} = 2\cosh(h/T), \tag{3.36}$$

$$F = -TlnZ = -Tln\left[2cosh\left(\frac{h}{T}\right)\right], \tag{3.37}$$

$$M = -\frac{\partial F}{\partial h} = \tanh\left(\frac{h}{T}\right), \tag{3.38}$$

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial h} = -\frac{1}{Tcosh^2\left(\frac{h}{T}\right)}. \tag{3.39}$$

Düşük sıcaklık için, M≈1 olacak şekilde, spin çoğunlukla *h* alanı boyunca yönlenir. Sıcaklık arttıkça, enerji aralığı daha az önemli hale gelir ve spin yukarı olma olasılığı ve aşağı olma olasılığı eşitlenir ($P_-/P_+ = e^{-\Delta/T} \xrightarrow{(T\to\infty)} 1$). Bu nedenle, mıknatıslanma (M) azalır ve T>>Δ limitinde tamamen yok olur. Alınganlıkta ise herhangi bir

süreksizlik yoktur ve bu durum ikinci dereceden bir geçişin olmadığını işaret eder. Klasik model kuantum dalgalanmalarını yakalamadığından, zaman-korelasyon fonksiyonu zamana bağlı değildir. Spin, m durumunda ölçüldüğünde sonsuza kadar orada kalır ve model statiktir (Boesen, 2019).

3.6.2 *Manyetik Alan İçindeki Tek Kuantum Spin*

Kuantum durumunda işler biraz daha ilginçtir. Her şeyden önce, model artık bir enine $h_\perp$ alanlarına sahip olabilir ve Hamiltoniyeni:

$$\widehat{H} = -h_\parallel \hat{S}^z - h_\perp \hat{S}^x = -\begin{pmatrix} h_\parallel & h_\perp \\ h_\perp & h_\parallel \end{pmatrix}, \tag{3.40}$$

şeklinde matris gösteriminde verilir. Buradan öz durumlara karşılık öz değerler hesaplanabilir.

$$E_\pm = \pm\sqrt{{h_\parallel}^2 + {h_\perp}^2} \text{ve } v_\pm = \frac{1}{\sqrt{2h}}\begin{pmatrix} \frac{h_\perp}{\sqrt{h \pm h_\parallel}} \\ \mp\sqrt{h \pm h_\parallel} \end{pmatrix}. \tag{3.41}$$

Sıfır boyutlu etkileşmeyen enine alan Ising modeli, sıfır sıcaklıkta bir kuantum faz geçişi gösteir ve kritik nokta r = 0 dır, z = 0 için alınganlık ise:

$$\chi(x, z = 0) = \frac{\beta}{x}\tanh x, \tag{3.42}$$

şeklindedir. Bu noktada e^{-2r}'nin düşük sıcaklık açılımı yapıp yerine yazarsak

$$\chi(x, z = 0) = \frac{\beta}{x}\left(1 - e^{-2r} + O(e^{-4r})\right), \tag{3.43}$$

halini alır ve sıfır sıcaklık limitinde $e^{-2r} \to 0$ olacağından alınganlık ifadesi:

$$\chi(x, z = 0) = \frac{\beta}{x}, \tag{3.44}$$

şekline dönüşür. Sonuç olarak x = 0 da kritik bir davranış açıkça mevcuttur (Boesen, 2019). Kritik noktanın kendisi fiziksel olmasa da, kritik nokta matematiksel mapping yoluyla bir boyutlu klasik Ising modeline karşılık geldiği için kritik davranışı matematiksel olarak görmek ilginç olabilir.

3.7 Riemann Geometrisi ve Ruppeiner Metriği

Yukarıda bahsettiğimiz üzere bu tezin amaçlarından biri, düzensiz boyuna alan etkisi altındaki ve ferromanyetik en yakın ve antiferromanyetik bir sonraki en yakın etkileşim içeren metamanyetik enine alan Ising modelinin klasik (termal) faz geçişi yakınındaki termodinamik geometrik özelliklerinin Ruppeiner metriği ile formülize edilmesidir. Bu nedenle bu alt bölümde kooperatif sistemlerin termodinamik geometrisi ve bu geometriye ait Ricci skaleri (termodinamik eğrilik) hakkında temel bilgi ve metrik tanımı verilecektir.

Diğer yandan araştırmamızı en basit yaklaşım olan ortalama alan yaklaşımı ile sınırlandırdık. Bu bağlamda bölüm 3.7'nin ikinci alt bölümü termodinamik geometrinin ortalama alan yaklaşımı altında incelenmesine ayrılmıştır.

3.7.1 *Kooperatif Sistemlerin Termodinamik Geometrisi: Tarihçe ve Formülasyon*

Yüzey, çizgi, katı ölçümleri, açı ve aralarındaki ilişkilerle ilgilenen matematik dalı "geometri" ile adlandırılır. Geometri alanında yapılan ilk çalışmalar M.Ö. 300'lü yıllara kadar uzanır ve "Euclid Geometrisi" olarak bilinir. Diğer geometriler ise Euclid dışı geometriler olarak anılır ve çok daha ileriki yıllarda M.S. 19. yüzyılda,

ortaya çıkmıştır. Riemann geometrisi, Euclid dışı geometri olup üç boyutlu Euclid uzayına gömülmüş yüzey ve eğrilerin integral ve differansiyel hesaplamaları üzerine kurulu diferansiyel bir geometridir. Riemann geometrisi Gauss'un doktora öğrencisi olan Gerg Friedrich Riemann tarafından kurulmuştur (1826-1866). Riemann, 1855 yılında verdiği bir derste ilk defa "manifold" kavramını kullanmış ve manifoldlara ait metrik ilişkilerinin nasıl olacağını açıklamıştır. Riemann son olarak Gauss "yüzey eğriliği" kavramını daha yüksek boyutlu uzaylara genelleştirmiştir. Riemann geometrisinin kavramları Einstein tarafından Genel Görelilik teorisinin oluşturulmasında kullanılmıştır. Bu geometri, türevlenebilir uzaylardaki eğri yüzeylerin geometrisi ile ilgilenen özel bir geometri çeşididir ve fizik alanında pek çok uygulaması mevcuttur.

Gauss'un iki boyutlu metrik yapısını, *n* boyutlu uzaya genişleten Riemann, *n* boyutlu uzay kavramını tanımlamıştır. Bu tanıma göre uzayda bulunan herhangi bir A noktasının bulunduğu koordinatlar $(x^1, x^2, \dots, x^n)$ olarak veriliyorsa ve bu noktanın çok yakınında bulunan diğer bir B noktasının koordinatları da $(x^1 + dx^1, x^2 + dx^2, \dots, x^n + dx^n)$ olacaktır. Uzayda bulunan bu iki nokta arasındaki mesafenin karesini tanımlayan metrik denklem:

$$ds^2 = g_{ij} dx^i dx^j, \tag{3.45}$$

olarak verilir. Burada g_{ij} metrik tensör olarak isimlendirilir ve $(x^1, x^2, \dots, x^n)$ değişkenlerinin bir fonksiyonudur. Uzayda bulunan bu iki nokta (A ve B) üst üste gelmediği sürece, dx^i bileşenleri kuadratik olacağı için yay uzunluğunun karesi olarak da bilinir, ds^2 daima pozitif olacaktır. Bu metrik "Riemann metriği" olarak adlandırılır ve bu metrik ile tanımlanan uzaya ise "Riemann uzayı" adı verilir. Euclid uzayının n boyutlu hali Riemann uzayının özel bir durumudur. Burada $g_{11} = 1, g_{22} = 1, \dots, g_{nn} = 1$ olduğu zaman $ds^2 = (dx^1)^2 + (dx^2)^2 + \cdots + (dx^n)^2$ şeklinde yazılır.

Riemann geometrisinin temel niceliklerinden biri eğrilik skaleridir. İki veya daha fazla boyutlu uzayların eğrilik skaleri üretilirken genel bir formalizasyondan yararlanılır. Buna göre, ilk olarak g_{ij} metrik tensör bileşenlerinden yararlanılarak

$$\Gamma_{jk}^{i} = \frac{1}{2} g^{il}\left(\partial_k g_{lj} + \partial_j g_{lk} - \partial_l g_{jk}\right), \text{(i,j,k,l=1,2)}, \tag{3.46}$$

şeklinde Christoffel sembolleri elde edilir (Ruppeiner vd. 1990). Burada g^{ij} kontravaryant metrik tensörü g_{ij} kovaryant metrik tensörünün tersidir $\left(g^{kj} g_{ik} = \delta_i^j\right)$. Bir sonraki adımda Christoffel sembollerinden Riemann tensörü bulunur:

$$R_{jkl}^{i} = \partial_k \Gamma_{jl}^{i} - \partial_l \Gamma_{jk}^{i} + \Gamma_{mk}^{i} \Gamma_{jl}^{m} - \Gamma_{ml}^{i} \Gamma_{jk}^{m}, \quad \text{(i,j,k,l,m=1,2)}, \tag{3.47}$$

Bunun ardından R_{jkl}^{i} Riemann tensörü yardımı ile Ricci tensörü hesaplanır:

$$R_{ij} = R_{inj}^{n}. \tag{3.48}$$

Son bir daraltma (kontraksiyon) işlemi ile Ricci skaleri elde edilir:

$$R = G^{ij} R_{ij} = R_i^i. \tag{3.49}$$

Burada Einstein toplam kuralı gereği üst ve alt indisler aynı olduğunda ilgili indisler üzerinden toplam alınmaktadır. R=0 durumu vakum durumundaki bir geometriye (Euclid) karşılık gelirken, R>0 veya R<0 durumlarında düz olmayan bir metrik ve dolayısıyla eğri uzayı karşımıza çıkar.

Riemann geometrisinin termodinamikte başarılı bir şekilde uygulanması ile "Termodinamik Geometri" alanı ortaya çıkmıştır. Termodinamik geometride uzay kavramı yerine "faz uzayı" veya "parametre uzayı" kullanılır. Bundan dolayı faz uzayının eğriliği "termodinamik eğrilik" olarak adlandırılır. Bu terim "Ricci skaleri" olarakta bilinir. (q^1, q^2) şeklinde iki farklı termodinamik değişkenden oluşan iki

boyutlu bir termodinamik faz uzayında Ricci skalerini hesaplamak için aşağıdaki formülden de yararlanılır (Erdem, 2020):

$$R = -\frac{1}{\sqrt{|g|}}\left[\frac{\partial}{\partial q^1}\left(\frac{g_{12}}{g_{11}\sqrt{|g|}}\frac{\partial g_{11}}{\partial q^2} - \frac{1}{\sqrt{|g|}}\frac{\partial g_{22}}{\partial q^1}\right) + \frac{\partial}{\partial q^2}\left(\frac{2}{\sqrt{|g|}}\frac{\partial g_{12}}{\partial q^2} - \frac{1}{\sqrt{|g|}}\frac{\partial g_{11}}{\partial q^2} - \frac{g_{12}}{g_{11}\sqrt{|g|}}\frac{\partial g_{11}}{\partial q^1}\right)\right]. \quad (3.50)$$

$$g = \det(g_{ij}) = g_{11}g_{22} - g_{12}^2, \quad (3.51)$$

ve

$$g_{11} = -\beta\partial_1\partial_1\phi$$

$$g_{12} = g_{21} = -\beta\partial_1\partial_2\phi,$$

$$g_{22} = -\beta\partial_2\partial_2, \quad (3.52)$$

şeklindedir. Eşitlik (3.52)'deki ϕ serbest enerji ve $\partial_1 = \frac{\partial}{\partial q^1}$, $\partial_2 = \frac{\partial}{\partial q^2}$, $\beta = 1/k_BT$'dir. Bu noktada belirtmekte yarar olan bir husus vardır: termodinamik sistemin özelliklerine göre q^i, q^j parametreleri farklı şekillerde seçilebilir. Bazı çalışmalar iki parametrenin yoğun türden değişken olduğu durumu tercih etmişlerdir. Örneğin Janke ve arkadaşları rastgele ağdaki Ising modeli için faz uzayını yoğun türden termodinamik değişkenler $(\beta, \beta h)$ cinsinden tanımlamıştır (Janke vd,. 2003). Oysaki iki düzen parametreli spin-1 Ising modeli için faz uzayı yaygın türden değişkenler olan mıknatıslanma ve kuadrupolar dipol moment cinsinden formülize etmişlerdir.

3.7.2 *Termodinamik Geometrinin Ortalama Alan Yaklaşımı Altında İncelenmesi*

Kısım 3.7.1'de Riemann geometrisi ve termodinamik eğrilik ile ilgili temel bilgi verildi. Yaptığımız literatür taraması anlamlı bir termodinamik eğrilik (sıfırdan farklı) bulabilmek için manifoldun en az iki boyutlu olması gerektiğini ortaya koymaktadır. Bu nedenle faz geçişi sergileyen sistemlerin termodinamik geometrisini inceleyebilmek için manifold parametrelerinin seçimi merkezi önem taşır. Bu tez çalışmasında iki ayrı sistemin faz geçişi özelliklerinin termodinamik incelemesi ortalama alan yaklaşımı altında gerçekleştirildi. Metamanyetik EAI modelinde var olan iki ayrı düzen parametresi bize manifoldu yaygın türden değişkenler diğer deyişle düzen parametresi uzayında seçmemize izin verdi. Ancak aynı durum rastgele EAI modeli için geçerli değildir. EAI modelinde ikincil bir düzen parametresi (enine mıknatslanma) vardır ancak Gibbs serbest enerjisi bu düzen parametresinin bir fonksiyonu değildir. Bu nedenle termodinamik eğrilik hesabında manifold (m_z, m_x) hal uzayında tanımlanamaz. Bu bizi aşağıda ayrıntılı olarak anlatılan biri yaygın türden biri yoğun türden değişkenden oluşan alternatif bir seçime yöneltmiştir. Yapılan literatür taramasında genel eğilimin manifoldu iki ve daha çok yoğun türden değişken ya da yaygın türden değişken (düzen parametresi) cinsinden formülize etmek olduğu görülmüştür. Diğer yandan Janyszek ve arkadaşları ortalama alan yaklaşımı (OAY) altındaki model Hamiltonyenin mekanik bir terim içermesi halinde manifoldun sıcaklık ve mıknatıslanma cinsinden seçilebileceğini ortaya konmuştur. Bu nedenle tezde bu tartışmaya yer vermeyi uygun bulduk.

Weiss tarafından önerilen fenomenolojik ferromanyetizma teorisi spinlerin etkileşiminin mıknatıslanma M ile orantılı bir ortalama moleküler alan aracılığıyla tanımlanabileceği varsayımına dayanır (Weiss, 1906). Bu varsayımın özü, her bir spinin diğer tüm spinler tarafından üretilen bir ortalama alanla etken bir şekilde etkileşime girmesidir. Bu kısa erimli etkileşime sahip en yakın komşu etkimleşimli Ising modelinin tersine etkileşim aralığının çok uzun olduğu ve her spinin diğer tüm spinlerle etkinalan üzerinden etkileştiği duruma karşılık gelir. Weiss'ın fenomenolojik teorisinin bu tür mikroskobik yorumu, Kac'ın tek boyutlu bir durumu ele alması ve

Kac'ın sonuçlarını daha yüksek boyutlara genelleyen Lebowitz ve Penrose sayesinde ortaya çıktı (Lebowitz ve Penrose, 1966). Sisteme ait Hamiltonyen şu şekilde yazılabilir:

$$H = \sum_{i,j} \Phi\left(\left|r_i - r_j\right|\right) s_i s_j - H \sum_{i=1}^{N} s_i. \tag{3.53}$$

Her bir spin, diğer tüm spinlerle aynı kuvvetle etkileşime giriyorsa, şunu koyabiliriz:

$$\sum_{i,j} \Phi\left(\left|r_i - r_j\right|\right) s_i s_j = -\frac{\alpha}{N} \sum_{i,j} s_i s_j, \tag{3.54}$$

$$\alpha = -\int \Phi(|r|)\mathrm{dr} \geq 0. \tag{3.55}$$

Bu durumda Hamiltonyen;

$$H = -\frac{\alpha}{N} \sum_{i,j} s_i s_j - H \sum_{i=1}^{N} s_i, \tag{3.56}$$

halini alır. $H = F_1 + F_2$ formuna sahiptir ve:

$$F_1 = -\frac{\alpha}{N} \sum_{i,j} s_i s_j \, , F_2 = -H \sum_{i=1}^{N} s_i. \tag{3.57}$$

Bu terimlerin beklenen değerleri şu şekilde verilir:

$$m_1 =< F_1 >= U, \; m_2 =< F_2 >= -HM, \tag{3.58}$$

Denklem (3.53) ile verilen sisteme ait bölüşüm fonksiyonu ise aşağıdaki gibi yazılır:

$$Z(\beta, \beta H) = e^{-\frac{\alpha\beta}{2}}. \tag{3.59}$$

Bununla birlikte, Z'nin açık formuna ihtiyacımız olmayacağından metrik tensörün bileşenleri için fenomenolojik çözüm formüllerini kullanacağız. Bu bileşenler, termodinamik limitte hesaplanan ısı kapasiteleri c_M ve c_H ve manyetik alınganlık χ gibi termodinamik tepki fonksiyonları aracılığıyla ifade edilir. Uzayda bulunan bu iki nokta arasındaki mesafenin karesini tanımlayan metrik denklem:

$$ds^2 = g_{ij} d\beta^i d\beta^j = g^{ij} dm_i dm_j, \tag{3.60}$$

$$g^{ij} = -\frac{\partial^2 S}{\partial m_i m_j}, \tag{3.61}$$

burada S entropidir. ds^2'düzenlenip tekrar yazılırsa:

$$ds^2 = -\frac{1}{T}\frac{\partial^2 U}{\partial m_i \partial m_j}\partial m_i \partial m_j = -\frac{1}{T}\frac{\partial^2 G}{\partial T^2}(dT)^2 + \frac{1}{T}\frac{\partial^2 G}{\partial M^2}(dM)^2, \tag{3.62}$$

olur. Burada $m_1 = T$ ve $m_2 = M$ ve G serbest enerjidir. T ve M koordinatlarındaki metrik tensör köşegendir. Bileşenleri, aşağıdaki formüllerle verilen çok basit termodinamik yorumlara sahiptir:

$$g_{TT} = -\frac{1}{T}\left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2}\right)_M = c_M T^{-2},$$

$$g_{MM} = \frac{1}{T}\left(\frac{\partial^2 G}{\partial M^2}\right)_T = T^{-1}{\chi_T}^{-1}. \tag{3.63}$$

Köşegen metrik tensör için skaler eğrilik R:

$$R = -\frac{1}{2g^2}\begin{vmatrix} -\frac{1}{T}\frac{\partial^2 G}{\partial T^2} & 0 & \frac{1}{T}\frac{\partial^2 G}{\partial M^2} \\ \frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{1}{T}\frac{\partial^2 G}{\partial T^2}\right) & \frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{1}{T}\frac{\partial^2 G}{\partial T \partial M}\right) & \frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{1}{T}\frac{\partial^2 G}{\partial M^2}\right) \\ \frac{\partial}{\partial M}\left(\frac{1}{T}\frac{\partial^2 G}{\partial T^2}\right) & \frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{1}{T}\frac{\partial^2 G}{\partial T \partial M}\right) & \frac{\partial}{\partial M}\left(\frac{1}{T}\frac{\partial^2 G}{\partial M^2}\right) \end{vmatrix}. \quad (3.64)$$

Diğer yandan cebirsel işlemler yürütüldüğünde:

$$R = -\frac{1}{\sqrt{g}}\left(\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{1}{\sqrt{g}}\frac{\partial g_{MM}}{\partial T}\right) + \frac{\partial}{\partial M}\left(\frac{1}{\sqrt{g}}\frac{\partial g_{TT}}{\partial M}\right)\right), \quad (3.65)$$

halini alır. Ortalama alan yaklaşımı altında mıknatıslanmanın sabit olduğu durumlarda ısı kapasitesinin sıfır olduğunu için ($c_M = 0$) $g_{TT} = 0$ ve $g = g_{TT}g_{MM} = 0$ değerini alır. Bu dejenerasyon rastgele iki spin arasındaki sürekli bir etkileşimden kaynaklanır. Hamiltonyen'i tekrardan yazacak olursak:

$$H = -\frac{\alpha}{N}\sum_{i=1}^{N} s_i \sum_{j=1}^{N} s_j - H\sum_{i=1}^{N} s_i, \quad (3.66)$$

burada $j \neq i$'dir.

$$-\frac{\alpha}{N}\sum_{j=1}^{N} s_j = H_{mol}, \quad (3.67)$$

H'ın yeni formu:

$$H = -(H_{mol} - H)\sum_i s_i = -H_{et}\sum_i s_i, \tag{3.68}$$

halini alır. H_{mol} ve H_{et} sırasıyla tüm spinler tarafından üretilen ortalama manyetik alan ve etkin manyetik alanı temsil eder. Nitekim ortalama alan yöntemi iki varsayıma dayanmaktadır ve bunlardan ikincisi stokastik bir değişkenin yerini alır. Sonuç olarak iki stokastik bağımsız değişken doğrusal bağımlı hale gelir ve Hamiltonyen F_1+F_2 yapısını kaybeder. Dağılım fonksiyonunda βH_{et}'nin tek bir istatistiksel parametreye bağlı oluşu nedeniyle manifold tek boyuta çöker ve böylesi bir sistem için termodinamik eğrilik tanımlanamaz.

Diğer yandan tamamen manyetik terimler içeren (H_m) Hamiltonyenine spin örgü mekanik enerjisine karşılık gelen ek bir H_l terimi eklenmesi halinde ($H = H_l + H_m$) halini alır. Bu durumda g_{TT} artık sıfırdan farklı hale gelir ve parametre uzayının Riemann yapısını yeniden inşa etmek ve anlamlı bir eğrilik elde etmek mümkün olur. Bu parametre seçimi için metrik bileşenleri:

$$g_{TT} = c(T)T^{-2},$$

$$g_{MM} = T^{-1}{\chi_T}^{-1}, \tag{3.69}$$

halini alır. Burada c(T) örgüye ait ısı kapasitesidir. g_{TT} M'ye bağlı olmadığından Ricci skaleri aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$R = -\frac{1}{\sqrt{g}}\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{1}{\sqrt{g}}\frac{\partial g_{MM}}{\partial T}\right). \tag{3.70}$$

R'nin Curie noktası (T_c kritik sıcaklık) civarında davranışına bakalım:

$$g_{MM} = T^{-1}{\chi_T}^{-1} = \frac{\epsilon}{T} + \eta^2, \tag{3.71}$$

burada $\epsilon = (T - T_c)/T_c$ olup $\epsilon \to 0$ ve $g_{MM} \to 0$ olduğu için Riemann matrisinin determinantı $g = detg_{ij} \to 0$ olur. Bununla beraber $T \to T_c$ iken $\frac{\partial g_{MM}}{\partial T} \neq 0$ olduğu için Ricci skaleri:

$$R = \frac{c}{T^2}\frac{\left(\frac{\partial g_{MM}}{\partial T}\right)^2}{2g^2}, \tag{3.72}$$

halini alır ve açıkça görüldüğü gibi kritik sıcaklıkta Ricci skaleri ıraksama tekilliği sergiler:

$$T \to T_c \; için \; R \to \infty. \tag{3.73}$$

Diğer yandan, klasik Ising ve Kac modelinden farklı olarak EAI modeli Hamiltonyeni enine alan terimi içerir. Tünelleme integrali olarak da anılan bu terim hem manyetik hem de spin-fonon etkileşimlerini modeller ve mekanik orijinlidir. Bu nedenle rastgele EAI modelinin termodinamik eğriliği çalışılırken Riemann metriği için denklem (3.63) ile verilen yol izlenecektir.

3.8 Enine Alan Ising Modelinin Ortalama Alan Yaklaşımı ile İncelenmesi

Kooperatif sistemleri açıklayan pek çok model gibi klasik Ising ve EAI modellerinin tam çözümleri istisnai durumlar haricinde mümkün değildir. Bu nedenle faz geçişi ve kritik olayların incelenmesinde yaklaşık yöntemler büyük önem taşır. Bu bölümde, basitliği nedeniyle genellikle manyetik alanın içindeki karmaşık örgü spin

sistemlerinin davranışını açıklamak için birincil araç olarak kullanılan ortalama alan yaklaşımı (OAY) ve bu tez çalışmasında analiz ettiğimiz EAI modellerine uygulamaları kapsamlı bir şekilde anlatılacaktır. Bu amaçla bir sonraki bölümde enine alan etkisi altındaki spin-S Ising modelinin kritik özellikleri OAY ile incelenecektir (Weiss, 1907).

3.8.1 *Enine alan Spin-S Ising modelinin Ortalama Alan Yaklaşımı ile İncelenmesi*

Bu bölümde enine alan spin-S Ising modelinin Bogoulibov varyasyonel ilkesi kullanılarak yapısal ortalama analizi gerçekleştirilecektir. Enine alan spin-S Ising modeli aşağıdaki Hamiltoniyen ile tanımlanabilir:

$$\widehat{H} = -J \sum_{<ij>}^{Nq/2} \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z - \Omega \sum_{k=1}^{N} \hat{S}_k^x \tag{3.74}$$

Burada j'inci sitedeki spin-S operatörünün iki farklı uzamsal bileşeni ($\hat{S}_j^x$ ve $\hat{S}_j^z$) arasında $\left[\hat{S}_j^z, \hat{S}_j^x\right] = i\hat{S}_j^y$ $(i^2 = -1, \hbar = 1)$ ile verilen komütasyon ilişkisi vardır. Hamiltonyen'deki ilk toplamdaki J, en yakın komşu spin çiftleri arasındaki Ising (değiş-tokuş) etkileşimini açıklarken, ikinci terim Ω ise enine alandaki manyetik momentlerin Zeeman enerjisine karşılık gelir. Bunun bir sonucu olarak, Hamiltoniyen (3.74) tarafından verilen enine alan Ising modelinin manyetik davranışı, temel olarak kuantum dalgalanmalarından etkilenir.

OAY altındaki enine alan spin-S Ising modelinin deneme Hamiltoniyeni $\gamma_z$ve γ_x şeklinde iki farklı parametre içerecektir:

$$\widehat{H}_0 = -\gamma_z \sum_{i=1}^{N} \hat{S}_i^z - \gamma_x \sum_{i=1}^{N} \hat{S}_i^x. \tag{3.75}$$

Bu parametreler her bir spin üzerinde etkili olan sırasıyla boyuna ve enine yön boyunca yönelmiş etkin alanlara karşılık gelir. Diğer yandan deneme Hamiltoniyeni'ni (3.75) tek spinli Hamiltoniyen H_i 'nin toplamı olarak yeniden yazmak mümkündür.

$$\widehat{H}_0 = \sum_{i=1}^{N} \widehat{H}_i \tag{3.76}$$

$$\widehat{H}_i = -\gamma_z \hat{S}_i^z - \gamma_x \hat{S}_i^x. \tag{3.77}$$

Burada bireysel spinler, ortalama alan teorisi çerçevesinde birbirinden bağımsız olarak ele alınır. Tek spin Hamiltoniyeni $\widehat{H}_i$ genel olarak (2S + 1) × (2S + 1) boyutlu matris ile temsil edilir ve deneme bölüşüm fonksiyonunu hesaplamak için köşegenleştirilmesi gerekir:

$$Z_0 = Trexp\left(-\beta \widehat{H}_0\right) = \prod_{i=1}^{N} Tr_i \exp(-\beta \widehat{H}_i). \tag{3.78}$$

Burada, Tr ve Tr_i sembolleri, sırasıyla Ising spinlerinin tam setinin ve i 'ninci Ising spininin serbestlik dereceleri üzerinde iz alma işlemini temsil eder. Tek spin Hamiltonyeni $\widehat{H}$ 'nin en basit şekilde köşegenleştirmesi spin rotasyon dönüşümü ile gerçekleştirilebilir:

$$\hat{S}_i^x = \hat{S}_i^{x\prime} cos\phi + \hat{S}_i^{z\prime} sin\phi, \tag{3.79}$$

$$\hat{S}_i^z = -\hat{S}_i^{x'} sin\phi + \hat{S}_i^{z'} cos\phi. \tag{3.80}$$

Bu da tek spin Hamiltonyeni $\widehat{H}_i$ 'yi aşağıdaki forma getirir:

$$\widehat{H}_i = -\hat{S}_i^{z\prime}(\gamma_z cos\phi + \gamma_x sin\phi) + \hat{S}_i^{x\prime}(-\gamma_z sin\phi + \gamma_x cos\phi). \tag{3.81}$$

Eşitlik (3.81)'de $tan\varphi = \gamma_x/\gamma_z$ dönüş açısının uygun bir seçim yardımı ile $\widehat{H}_i$ köşegenleştirilir:

$$\widehat{H}_i = -\hat{S}_i^{z\prime}\sqrt{\gamma_z^2 + \gamma_x^2}, \tag{3.82}$$

$$Z_0 = \prod_{i=1}^{N} Tr_i \exp(-\beta \widehat{H}_i) = \left[\sum_{n=-S}^{S} exp\left(\beta n\sqrt{\gamma_z^2 + \gamma_x^2}\right)\right], \tag{3.83}$$

(3.83)'deki deneme bölüşüm fonksiyonu Z_0'ın elde edilmesi ile Gibbs serbest enerjisi G_0:

$$G_0 = -k_B T ln Z_0 = -N k_B T ln\left[\sum_{n=-S}^{S} cosh\left(\beta n\sqrt{\gamma_z^2 + \gamma_x^2}\right)\right], \tag{3.84}$$

ve $\frac{\partial G_0}{\partial m_z} = 0, \frac{\partial G_0}{\partial m_x} = 0$ denge koşullarından tanıtılarak, boyuna ve enine mıknatıslanmalar (m_z, m_x) elde edilebilir: Burada $m_z =< \hat{S}_i^z >_0$ ve $m_x =< \hat{S}_i^x >_0$'dir.

$$m_z = -\frac{1}{N}\frac{\partial G_0}{\gamma_z} = \frac{\gamma_z}{\sqrt{\gamma_z^2 + \gamma_x^2}} \frac{\sum_{n=-S}^{S} n sinh\left(\beta n\sqrt{\gamma_z^2 + \gamma_x^2}\right)}{\sum_{n=-S}^{S} cosh\left(\beta n\sqrt{\gamma_z^2 + \gamma_x^2}\right)}, \tag{3.85}$$

$$m_x = -\frac{1}{N}\frac{\partial G_0}{\gamma_x} = \frac{\gamma_x}{\sqrt{\gamma_z^2 + \gamma_x^2}} \frac{\sum_{n=-S}^{S} n sinh\left(\beta n\sqrt{\gamma_z^2 + \gamma_x^2}\right)}{\sum_{n=-S}^{S} cosh\left(\beta n\sqrt{\gamma_z^2 + \gamma_x^2}\right)}. \tag{3.86}$$

Bu aşamada, Denklem (3.74) ile verilen Hamiltonyenle açıklanan model sistemi için gerçek ve deneme Hamiltoniyenleri arasındaki fark için kanonik topluluk ortalaması hesaplanabilir:

$$< H - H_0 >_0 = -\frac{Nq}{2} J m_z^2 - N\gamma_z m_z - N(\Omega - \gamma_x) m_x. \tag{3.87}$$

Denklem (3.84) ile verilen G_0 deneme Gibbs serbest enerjisi kullanılarak varyasyonel Gibbs serbest enerjisi Φ aşağıdaki gibi ifade edilebilir:

$$\Phi = -Nk_B T ln \left[\sum_{n=-S}^{S} cosh\left(\beta n \sqrt{\gamma_z^2 + \gamma_x^2} \right) \right] - \frac{Nq}{2} J m_z^2 - N\gamma_z m_z - N(\Omega - \gamma_x) m_x. \tag{3.88}$$

Denklem (3.88) ile verilen Varyasyonel Gibbs serbest enerjisinin varyasyon parametreleri γ_z ve γ_x'e göre minimalizasyonundan aşağıdaki ifadeler elde edilir:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \gamma_z} = 0 \iff (qJm_z - \gamma_z) \frac{\partial m_z}{\partial \gamma_z} + (\Omega - \gamma_x) \frac{\partial m_x}{\partial \gamma_z} = 0, \tag{3.89}$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \gamma_x} = 0 \iff (qJm_z - \gamma_z) \frac{\partial m_z}{\partial \gamma_x} + (\Omega - \gamma_x) \frac{\partial m_x}{\partial \gamma_x} = 0. \tag{3.90}$$

Yukarıdaki eşitlikleri sağlayan etkin alan değerleri (varyasyonel parametreler):

$$\gamma_z = qJm_z \text{ ve } \gamma_x = \Omega, \tag{3.91}$$

olduğunda sağlanır. Varyasyonel Gibbs serbest enerjisinin ortalama alan tahmini artık ekstremum koşulu (3.91) tarafından verilen değişken parametrelerin denklem (3.89) ile değiştirilmesiyle elde edilebilir:

$$G = -Nk_BT\left\{\sum_{n=-S}^{S} cosh\left(\beta n\sqrt{\gamma_z^2+\gamma_x^2}\right)\right\}+\frac{Nq}{2}Jm_z^2, \tag{3.92}$$

boyuna ve enine mıknatıslanmalar:

$$m_z = \frac{qJm_z}{\sqrt{(qJm_z)^2+\Omega^2}}\frac{\sum_{n=-S}^{S} nsinh\left(\beta n\sqrt{(qJm_z)^2+\Omega^2}\right)}{\sum_{n=-S}^{S} cosh\left(\beta n\sqrt{(qJm_z)^2+\Omega^2}\right)}, \tag{3.93}$$

ve

$$m_x = \frac{\Omega}{\sqrt{(qJm_z)^2+\Omega^2}}\frac{\sum_{n=-S}^{S} nsinh\left(\beta n\sqrt{(qJm_z)^2+\Omega^2}\right)}{\sum_{n=-S}^{S} cosh\left(\beta n\sqrt{(qJm_z)^2+\Omega^2}\right)}. \tag{3.94}$$

3.8.2 *Enine Alan Spin-S Ising Modelinin Temel Seviye Analizi*

Burada enine bir manyetik alandaki spin-S Ising modelinin temel durumunu inceleyeceğiz. Denklem (3.93) ve (3.94)'den boyuna ve enine mıknatıslanmalarının $\Omega_c = qJS$ iken çarpıcı bir niteliksel değişime uğradığı kolayca kanıtlanabilir. Temel seviye analizi gerçekleştirildiğinde enine alan spin-1/2 Ising modeline ait sıfır sıcaklık hal denklemini:

$$m_z = \frac{1}{2}\left[\frac{(2m_zJ)}{\sqrt{(2m_zJ)^2+\Omega^2}}\right]. \tag{3.95}$$

Benzer şekilde enine alan spin-1 Ising modeline sıfır sıcaklık hal denklemi ise:

$$m_z = \left[\frac{(2m_zJ)}{\sqrt{(2m_zJ)^2+\Omega^2}}\right], \tag{3.96}$$

şeklinde elde edilir. En genel hali ile enine alan spin-S Ising odeline ait temel seviye düzen parametresi aşağıdaki gibi verilir:

$$m_z = S\left[\frac{(2m_zJ)}{\sqrt{(2m_zJ)^2+\Omega^2}}\right]. \tag{3.97}$$

Enine alan Ising modelinin ferromanyetik ve paramanyetik durumları arasındaki düzen düzensizlik faz geçişinin kesin doğasını araştırmak da özellikle ilgi çekici olabilir. Kritik nokta yakınında $m_z \to 0$ olduğundan:

$$\frac{\sum_{n=-S}^{S} n sinh(\beta_c n\Omega)}{\sum_{n=-S}^{S} cosh(\beta_c n\Omega)} = \frac{\Omega}{qJ}, \qquad \left(\beta_c = \frac{1}{k_B T_c}\right), \tag{3.98}$$

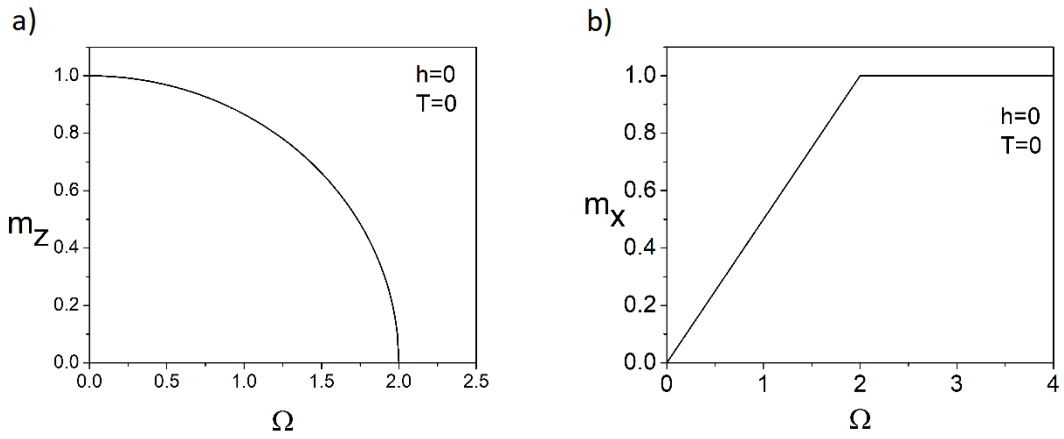
elde edilir ve $\Omega_c = qJS$ olduğu görülür. Diğer yandan spin-S durumu için $\Omega = 0$ iken gerçekleşen klasikfaz geçişi sıcaklığı aşağıdaki eşitliği sağlar:

$$\lim_{\Omega\to 0} \frac{k_B T_c}{qJ} = \frac{S(S+1)}{3}. \tag{3.99}$$

Denklem (3.97)'den görüldüğü üzere T=0'da düzen düzensizlik faz geçişine yol açan parametre mikroskobik bir parametre olan enine alandır. Diğer yandan sistemin düzen parametresi olan m_z aşağıdaki ölçekleme bağıntısına uyar ve ikincil düzen parametresi m_x ise T=0'da gerçekleşen kuantum faz geçişinde tekillik sergilemez.

$$m_z = \begin{cases} S\left[1-\left(\frac{\Omega}{\Omega_c}\right)^2\right]^{\frac{1}{2}} \\ 0 \end{cases}, m_x = \begin{cases} S\frac{\Omega}{\Omega_c}, & için\ \Omega < \Omega_c, \\ S, & için\ \ \Omega \geq \Omega_c. \end{cases} \tag{3.100}$$

$\Omega \to \Omega_c$ iken $m_z \to 0$olması sıfır manyetik alan etkisi altındaki klasik Ising modelinin sürekli faz geçişi ile büyük bir benzerlik sergiler.



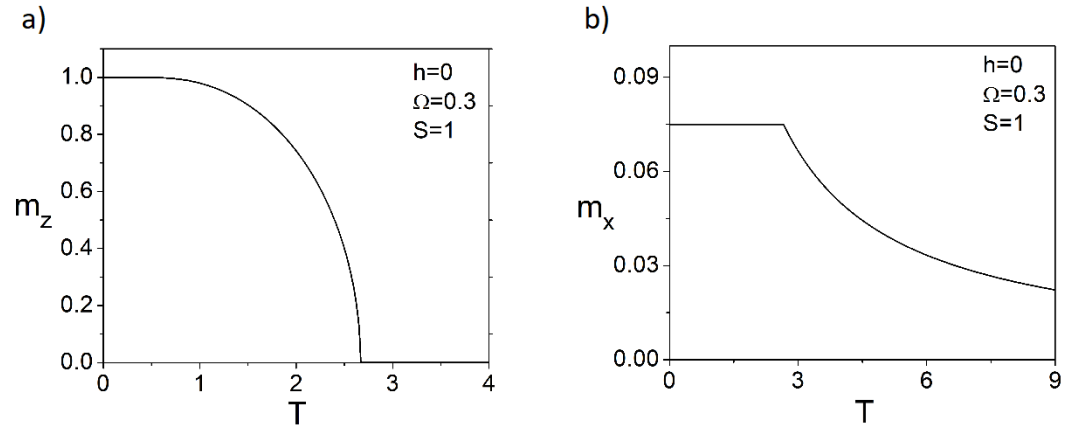
Şekil 3.6 Spin-1 EAI modelinin kuantum faz geçişi yakınında a) boyuna b) enine mıknatıslanmaların Ω ile değişimi

Şekil 3.6 (a) ve (b)'de görüldüğü üzere, $\Omega < \Omega_c$ iken temel durumsıfırdan farklı m_z ile karakterize özel bir ferromanyetik düzene sahiptir. Burada önemli olan husus kuantum faz geçişinde uzun menzilli düzeninin bozan mekanizmanın termal dalgalanmalar tarafından değil, kuantum dalgalanmalar tarafından belirlenmesidir. Ω'nın varlığı nedeniyle kuantum dalgalanmalar tetiklenir ve spin-S Ising modelinde T=0'da ortaya çıkan sürekli düzenli-düzensiz faz geçişi kuantum kritik nokta olarak adlandırılır. Düzensiz fazda $\Omega \geq \Omega_c$için $m_z = 0$ iken enine mıknatıslanma m_x=S değerine satüre olur.

3.8.3 *Sonlu Sıcaklık Davranışı ve Termal Faz Geçişi*

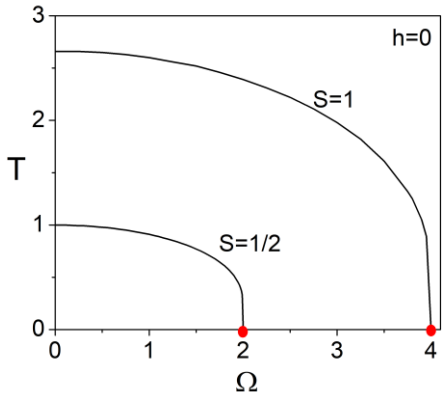
EAI modeli sadece sıfır sıcaklıkta kuantum faz geçişi sergiler, yüksek sıkcalıklarda termal etkiler baskın hale gelir ve geçişler klasik karakterdedir. Gibbs varyasyonel

ilkesi ile elde ettiğimiz hal denklemlerinin nümerik çözümlerini gerçekleştirerek spin-S EAI modelinin sonlu sıcaklık denge manyetik özelliklerini açıklamak mümkündür.



Şekil 3.7 Spin 1 EAI modelinin faz geçişi yakınındaa) boyuna b) enine mıknatıslanmaların sıcaklıkla değişimi

Bu amaçla S=1 hali için boyuna ve enine mıknatıslanmalarının sıcaklıkla değişimleri Şekil 3.7'da verilmiştir. İlk olarak şekil 3.7 (a)'da enine alan teriminin kritik değerinin altındaki bir değeri için mıknatıslanmanın sıcaklıkla değişimi verilmiştir. m_z artan sıcaklıkla azalmakta ve sonlu bir sıcaklıkta ikinci dereceden faz geçişi sergilemktedir. Şekil 3.7 (b) ise aynı Ω değeri için enine mıknatıslanmanın düzenli fazda sabit bir değer aldığı termal düzensiz fazda ise sıcaklıkla azalma eğilimi sergilediği görülmektedir.



Şekil 3.8 Spin-1/2 ve Spin-1 için enine alan etkisinin dış manyetik alan etkisinin olmadığı durumda sıcaklıkla değişimini gösteren faz diyagramı

Spin-S enine alan Ising modelinin faz geçişi özellikleri (T, Ω) faz diyagramı ile açıklanabilir. m_x ve m_z için temel seviye ve sonlu sıcaklık hal denklemleri çözülerek spin-1 ve spin-1/2 enine alan Ising modellerine ait faz eğrileri şekil 3.8'deki gibi elde edildi. Siyah ile verilen sürekli çizgiler kinci dereceden termal faz geçişlerini, kırmızı noktalar ise tünelleme terimi tarafından oluşturulan kuantum dalgalanmaları ile ortaya çıkan kuantum kritik noktalardır. Görüldüğü üzere spin değeri arttıkça kuantum düzenli fazın sınırı genişlemektedir $\Omega_c = \mathrm{Sz}.\ \Omega = 0$ iken gözlenen kritik noktalar her iki model için tamamen klasik ikinci dereceden termal faz geçişlerine karşılık gelir. S değeri arttıkça sıfır enine alan kritik noktanın değeri de artar (Strecka ve Jascur, 2015).

Son olarak, enine bir manyetik alandaki spin-S Ising modelinin, kristal alan terimi sıfır iken birinci dereceden faz geçişleri sergileyemeyeceği görülmektedir. Diğer yandan sonlu T değerleri için EAI modeli aşağıdaki ölçekleme kuralına uyar. Denklem (3.101)'den görüldgü üzere EAI modeli sonlu sıcaklıklarda sergilediği klasik kritik noktalarda klasik Ising modeli ile aynı evrensellik sınıfındadır.

$$m_z = \begin{cases} S\left[1 - \left(\frac{\mathrm{T}}{\mathrm{T}_c}\right)\right]^{\frac{1}{2}} & için \quad T < T_c, \\ 0 & için \quad T \geq T_c. \end{cases} \tag{3.101}$$

3.8.4 *Klasik Modele Eşdeğerlik: Suzuki- Trotter Formalizması*

Önceki bölümlerde bahsedildiği üzere d boyutlu EAI modeli ile (d + 1) boyutlu klasik Ising modeli aynı "evrensellik" sınıfındadırlar. Diğer yandan bazı EAI modellerinin klasik Ising modellerine dönüştürülmesi mümkündür. Suzuki- Trotter dönüşümü ile $K_M = (1/2)ln[cot(\Omega/Mk_BT)], K = J\beta$ iken Spin-1/2 EAl modelinin klasik eşdeğerinin etkin Hamiltonyeni $H_{et} = -\sum_{j=1}^{N}\sum_{k=1}^{M}\left[\frac{K}{M}S_{j,k}S_{j+1,k} + K_M S_{j,k}S_{j,k+1}\right]$ ile verilir.

3.9 Bimodal Rastgele Boyuna Alan Etkisi Altındaki Enine Alan Ising Modelinin Denge Manyetik Özellikleri

N spin içeren ve boyuna rastgele dış manyetik alan etkisi altındaki rastgele enine alan Ising (REAI) modelinin Hamiltonyeni:

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{i\neq j} J_{ij} S_i^z S_j^z - \sum_i H_i S_i^z - \sum_i \Omega S_i^x. \qquad (3.102)$$

Burada $S_i^\alpha (\alpha = x, y, z)$ denklem (3.27)'de verilen spin-1/2Pauli spin opetatörlerine karşılık gelir. Burada Ω tünelleme etkisini belirten enine alan, ($J_{ij} = \mathrm{J}$) bipolar değiş tokuş etkileşimi, H_i ise i. sitedeki spine etki eden dış manyetik alandır.

Bu model pek çok teorik ve deneysel araştırmalara konu olmuştur (Belanger ve Young, 1991). Rastgele alan, ferromanyetik fazdan paramanyetik faza klasik Ising geçişinin geçiş sıcaklığını (T_c) etkili bir şekilde azaltır. Ayrıca düzen bozucu bir kritik alan görevi görür, h_r^c rastgele alanın kritik değeridir. $h_r > h_r^c$ için, sistem paramanyetik fazdadır. Düzensizliğin bir diğeri etkisi belli bir eşik değerinin altındaki boyutasahip sistemler için düzenli faz tamamen yok olur. Bu sistem için daha düşük kritik boyutsallığın iki olduğunu gösterir (Bricmont, 1987).

Diğer yandan üç boyutlu modelde düşük sıcaklık ve zayıf rastgele alan için uzun menzilli düzenin varlığı kesin olarak kanıtlanmıştır (Bricmont, 1987). Klasik modelin ortalama alan çalışmalarından, rastgele alanın dağılım fonksiyonu sıfır alanda fonskiyonunun minimumu h=0'da iken (örn. Binary dağılım), rasgele alanın daha büyük değerleri için geçiş süreksiz hale gelir. Diğer yandan eğer dağılım fonksiyonu h'nin büyüklüğünün artmasıyla monoton bir şekilde azalıyorsa (Gauss dağılımında olduğu gibi), geçiş her zaman süreklidir (Schneider, 1977). Bu nedenle Gauss dağılımı benzeri rastgele dış alanların varlığında hiçbir sonlu boyutlu sistem üçlü kritik nokta sergilemez. Geçiş ikinci dereceden ise, ölçekleme argümanları, $2-$

α formununkorelasyon uzunluğu ve özgül ısı üstellleri için değiştirilmiş bir hiper ölçekleme ilişkisini önerir (Villian, 1985; Bray, 1985; Fisher, 1992).

Son olarak bu tez çalışmasında rastgele dış alan bimodal dağılımı boyunca ($p(h_i) = \frac{1}{2}[\delta(h_i - h_0) + \delta(h_i + h_0)]$) kuralına uyacak şekilde seçilir. OAY altındaki REAI modeli için Gibbs serbest enerjiifadesi aşağıdaki gibi yazılır:

$$\frac{F}{N} = \frac{1}{2}Jzm^2 - \frac{1}{2\beta}ln\left[4cosh\left(\frac{\beta[(Jzm+h)^2+\Omega^2]^{\frac{1}{2}}}{2}\right)cosh\left(\frac{\beta[(Jzm-h)^2+\Omega^2]^{\frac{1}{2}}}{2}\right)\right]. \quad (3.103)$$

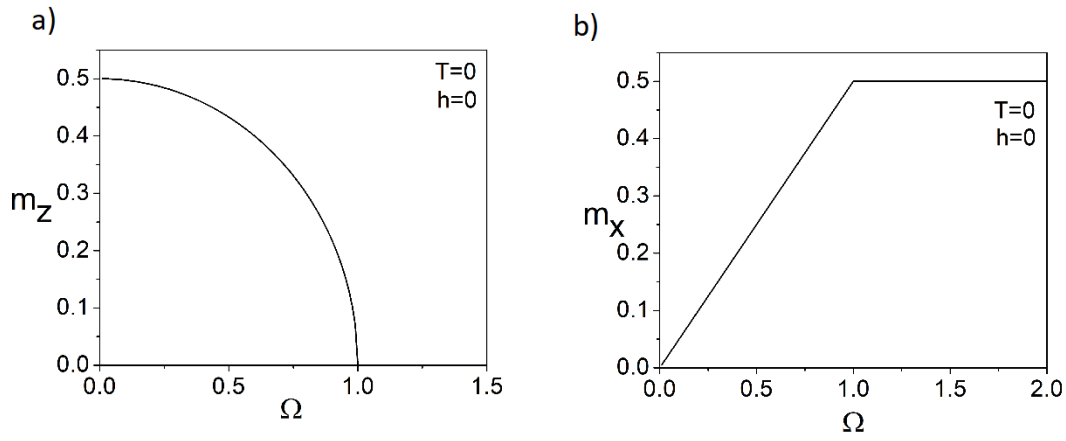
Burada k_B Boltzmann sabiti ve T sıcaklık, N toplam spin sayısı, z koordinasyon (en yakın komşu sayısı) sayısıdır. Diğer yandan $\beta = 1/k_BT$ ve $m = <\hat{S}_i^z>$ortalama spin momenti (mıknatıslanma). Son olarak $\frac{\partial F}{\partial m_z} = 0, \frac{\partial \mathrm{F}}{\partial m_x} = 0$ ile verilen denge koşullarından öz tutarlılık denklemleri elde edilir (Saxena, 1982):

$$m_z = \frac{1}{4}\left\{\begin{array}{l}\left[\frac{Jzm+h}{[(Jzm+h)^2+\Omega^2]^{\frac{1}{2}}}\right]tanh\left(\frac{\beta[(Jzm+h)^2+\Omega^2]^{\frac{1}{2}}}{2}\right) \\ +\left[\frac{Jzm-h}{[(Jzm-h)^2+\Omega^2]^{1/2}}\right]tanh\left(\frac{\beta[(Jzm-h)^2+\Omega^2]^{1/2}}{2}\right)\end{array}\right\}, \quad (3.104)$$

$$m_x = \frac{1}{4}\left\{\begin{array}{l}\left[\frac{\Omega+\mathrm{h}}{[(Jzm+h)^2+\Omega^2]^{\frac{1}{2}}}\right]tanh\left(\frac{\beta[(Jzm+h)^2+\Omega^2]^{\frac{1}{2}}}{2}\right) \\ +\left[\frac{\Omega-h}{[(Jzm-h)^2+\Omega^2]^{1/2}}\right]tanh\left(\frac{\beta[(Jzm-h)^2+\Omega^2]^{1/2}}{2}\right)\end{array}\right\} \quad (3.105)$$

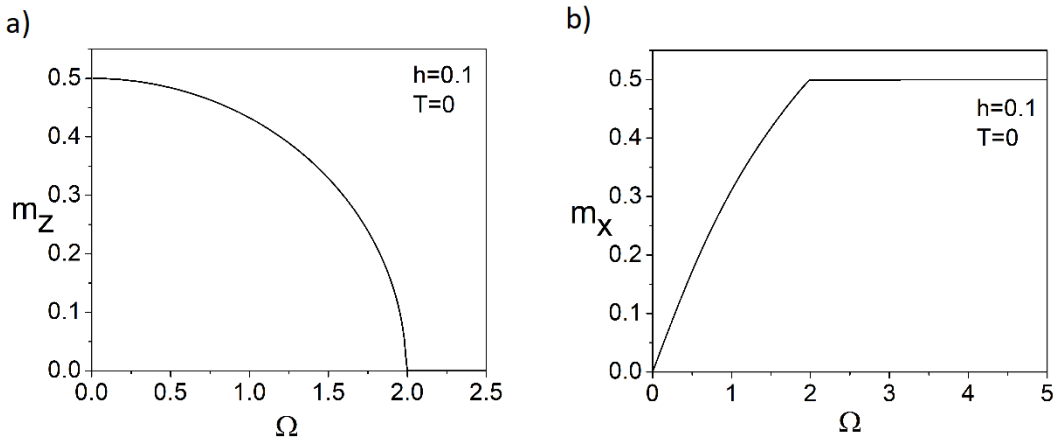
Aşırı kuantum limitinde (T = 0), termal dalgalanmalar yok olur. Bununla beraber sistem iki ayrı kaynaktan ileri gelen dalgalanmaların etkisindedir: i) Boyuna alandaki düzensizlik ii) Tünelleme integrali. Bu iki dalgalanma uzun menzilli düzeni bozma eğilimindedir. Denklem (3.109)'ten düzenlenmiş ortalamalı boyuna mıknatıslanma şu şekilde yazılabilir (Dutta vd., 1996):

$$m_z = \left[\frac{(2m_zJ + h)}{\sqrt{(2m_zJ + h)^2 + \Omega^2}}\right] + \left[\frac{(2m_zJ - h)}{\sqrt{(2m_zJ - h)^2 + \Omega^2}}\right] \tag{3.106}$$

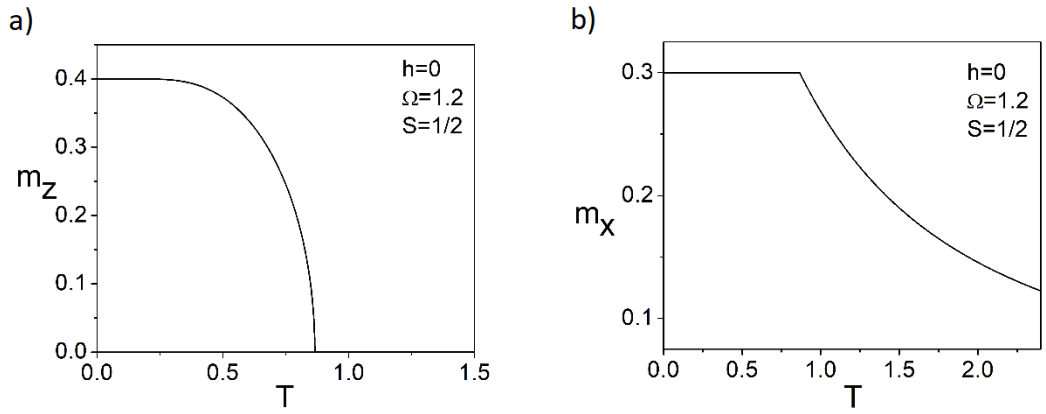


Şekil 3.9 Rastgele EAI modelinin h=0 için kuantum faz geçişi yakınında a) boyuna ve b) enine mıknatıslanmaların Ω ile değişimi.

Şekil 3.9 (a)-(b) ve 3.10 (a) ve (b)'de sıfır sıcaklıktaki manyetik düzeni veren grafikler sunulmuştur. Açıkça görülmektedir ki faz geçişi ısıl dalgalanmalardan değil enine alanın yarattığı kuantum dalgalanmalarından kaynaklanmaktadır. Kuantum kritik nokta Ω'ya bağlıdır. Boyuna alanın homojen olduğu durumdan farklı olarak sonlu h değerlerinde kuantum faz geçişi mevcuttur. Beklendiği üzere m_x Ω ile artmakta ve düzensiz fazda ise sabit kalmaktadır.



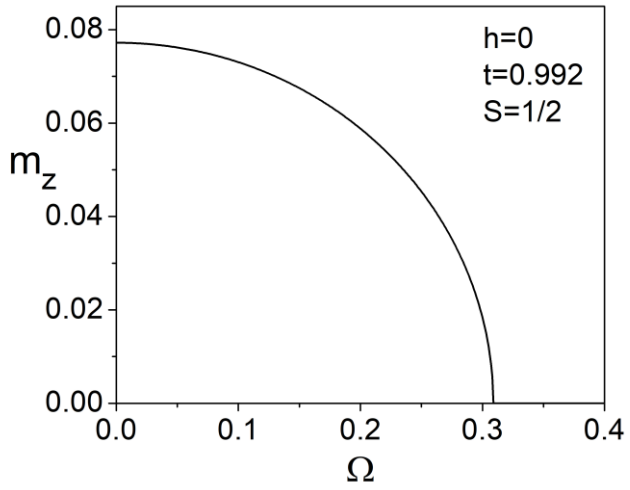
Şekil 3.10 Rastgele boyuna alan etkisi altındaki EAI modelinin h=0.1 için kuantum faz geçişi yakınında a) boyuna b) enine mıknatıslanmaların Ω ile değişimi.



Şekil 3.11 Rastgele EAI modelinin Ω=1.2 için faz geçişi yakınında a) boyuna ve b) enine mıknatıslanmaların sıcaklık ile değişimi.

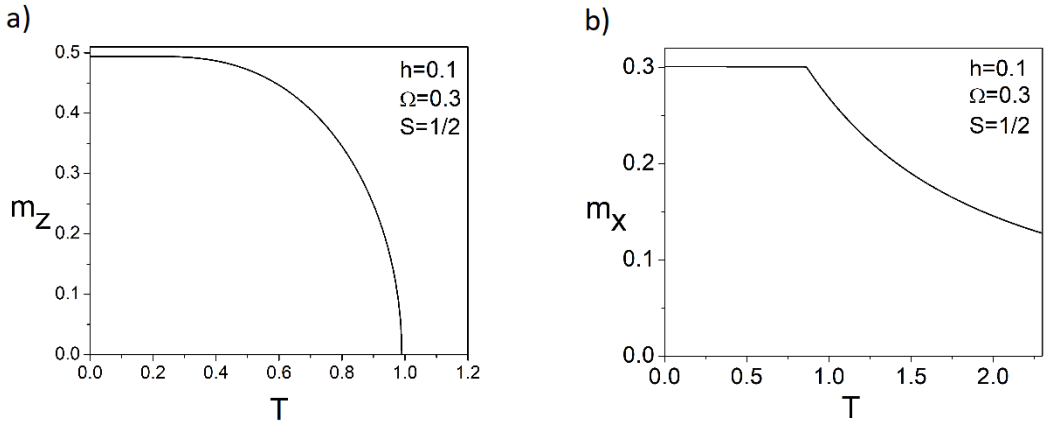
Sonlu sıcaklıklarda termal dalgalanmalar kuantum dalgalanmalara baskın hale gelir. Bu nedenle sonlu sıcaklıklardaki faz geçişleri Ising evrensellik sınıfı ile uyumludur. Oysaki aynı durum az önce detaylıca bahsedilen T=0'daki ve $\Omega=\Omega_c$ kuantum faz geçişleri için geçerli değildir. Bu geçişler Chiral-Ising evrensellik sınıfındadır. Sabit enine manyetik alanın 1.2 ve rastgele dış boyuna manyetik alanın sıfır değerini aldığında boyuna ve enine mıknatıslanmaların sıcaklık ile değişimleri Şekil 3.11'de sunulmuştur. h=0 olduğu için şekil 3.11 (a) ve (b)'de spin-1/2 enine alan Ising modeli ile özdeştir. Boyuna mıknatıslanma sıfır sıcaklıkta enine manyetik alan nedeniyle mıknatıslanmanın kuantum azalmasına maruz kalırken, bu azaltılmış başlangıç değeri sıcaklık artışı üzerine termal dalgalanmalar tarafından kademeli

olarak bastırılır, ta ki boyuna mıknatıslanma kritik sıcaklığa ulaşarak tamamen yok olana kadar devam eder. Buna karşılık, enine mıknatıslanma kritik sıcaklığa ulaşılmadıkça sabit kalır ve daha sonra sıcaklık arttıkça monoton bir düşüş gösterir.



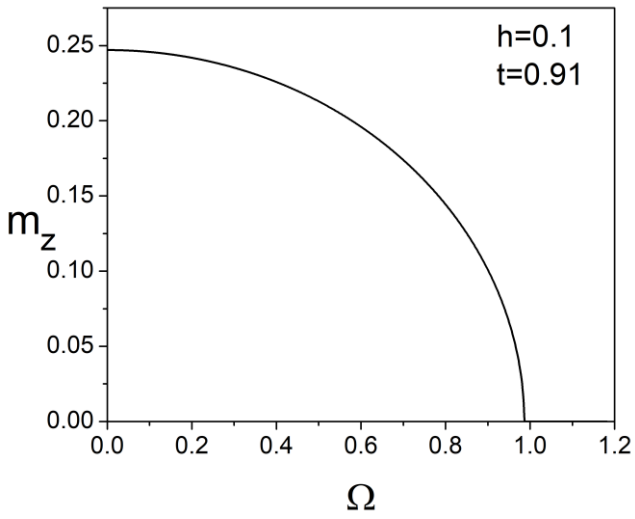
Şekil 3.12 Rastgele boyuna alan etkisi altındaki EAI modelinin T=0.992 ve h=0 için kuantum faz geçişi yakınında enine alan ile değişimi.

Şekil 3.12 boyuna mıknatıslanmanın sonlu sıcaklıktaki tünelleme terimi ile değişimine ayrılmıştır.



Şekil.3.13 Rastgele boyuna alan etkisi altındaki EAI modelinin Ω=0.3 için faz geçişi yakınında a) boyuna b) enine mıknatıslanmaların sıcaklık ile değişimi.

Şekil 3.13 (a)'da spin-1/2 rastgele alan enine Ising modelinin düzen parametresi olan z yönündeki mıknatıslanmanın sıcaklık ile değişimi görülmektedir. Düzen parametresi olan mıknatıslanmanın dış manyetik alan etkisi olmasına rağmen kritik sıcaklık değerinden sonra sıfır olduğu görülmektedir. Şekil 3.13 (b)'de ise aynı modele ait x yönündeki düzen parametresinin farklı bir enine alan değeri altında sıcaklıkla değişimi gösterilmektedir. Burada z yönündeki mıknatıslanma belirli bir kritik değerde sıfır olduğu görülürken x yönündeki mıknatıslanmanın sıfır olmadığı enine manyetik alan ve dış manyetkik alan etkisi ile hareket ettiği görülmektedir. Şekil 3.14'de ise sabit sıcaklık değeri altında z yönündeki mıknatıslanmanın enine alan ile değişimi gösterilmektedir. Beklendiği gibi z yönündeki mıknatıslanma enine alan etkisi ile düzenli olarak azalmakta ve kritik enine alan değerinden sonra sıfır olmaktadır.

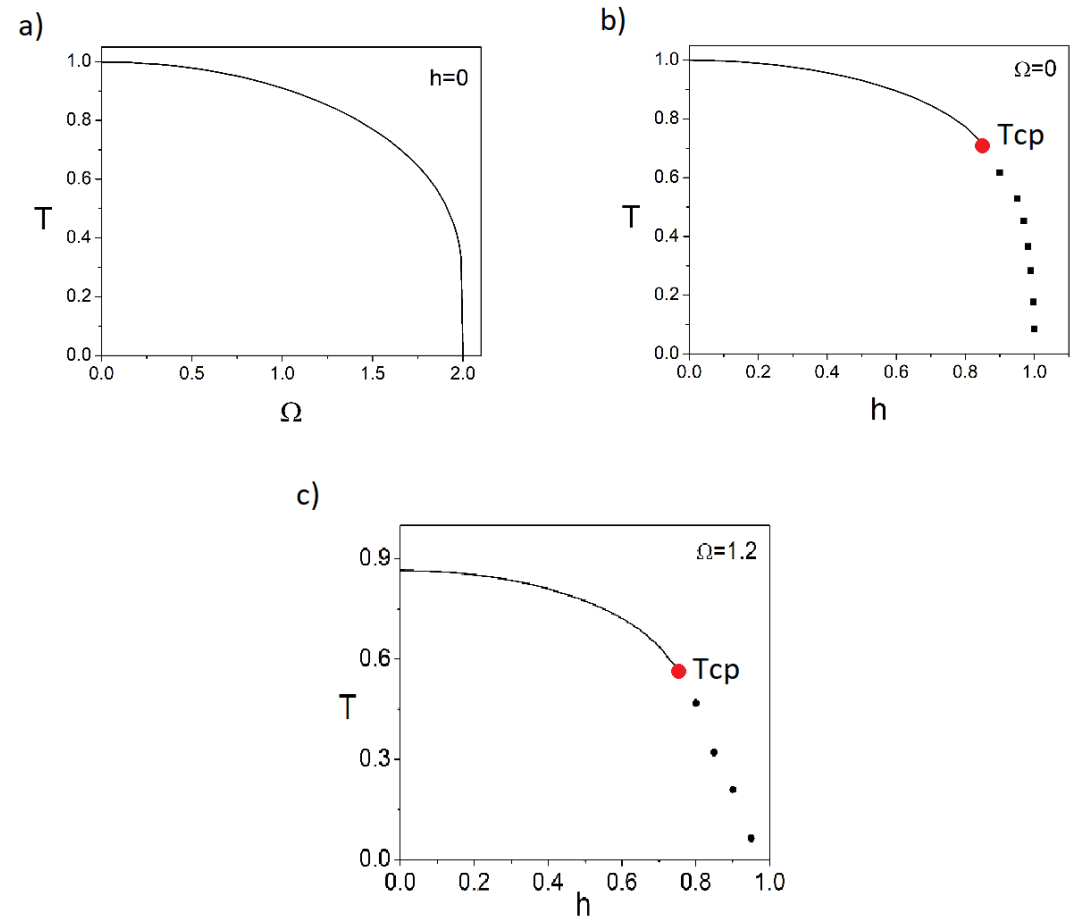


Şekil 3.14 Rastgele boyuna alan etkisi altındaki EAI modelinin T=0.91 ve h=0.1 için kuantum faz geçişi yakınında a) boyuna b) enine mıknatıslanmaların Ω ile değişimi.

Bu noktada sistemin kritik özelliklerine değinmek istiyoruz. Düşük sıcaklık ve rastgele alan için, serbest enerji $m_z \neq 0$ için minimum olur (simetri kırılır). Sürekli geçişler için, faz geçişi noktası hal denklemlerinin $m_z = 0$ civarındaki seriaçılımı ile elde edilir.

$$m_z \sim a m_z - b(m_z)^3 - c(m_z)^5 - \cdots. \qquad (3.107)$$

b> 0 olduğu sürece, a = 1 olduğunda ikinci dereceden bir geçiş gerçekleşir. b< 0 olduğunda ise, geçiş birinci derecedendir ve a = 1 ve b = 0 noktası, faz sınırında ferromanyetitk fazı ($m_z \neq 0$), paramanyetik fazdan ($m_z = 0$) ayıran üçlü kritik noktayı karakterize eder. Klasik durumda ($\Omega = 0$), $a = 2\beta J(1 - t^2)$ ve $b = \frac{1}{3}(2\beta J)^3[(1 - t^2)(1 - 3t^2)]$ ifadeleri bulunur. Burada $t = tanh\beta h$. Bimodal rastgele alan için üçlü kritik nokta, $\beta J = 3/4, tanh^2(\beta h_0) = 1/3$ koşullarını sağlar



Şekil 3.15 Rastgele boyuna alan etkisi altındaki EAI modeline ait a) enine alan etkisinin dış manyetik alan etkisinin olmadığı durumda sıcaklıkla değişimini gösteren faz diyagramı b) boyuna alan etkisinin enine manyetik alan etkisinin olmadığı durumda sıcaklıkla değişimini gösteren faz diyagramı c) boyuna alan etkisinin enine manyetik alan etkisinin olduğu durumda sıcaklıkla değişimini gösteren faz diyagramı.

Denklem (3.102) Hamiltonyeni ile verilen modelin faz diyagramı üç boyutludur (Saxena, 1982). Biz burada amaçlarımızla uyumlu olarak faz diyagramının T, Ω ve T,h iz düşümlerini elde ettik. Şekil 3.15 (a),(b) ve (c)'de T, Ω ve T,h faz diyagramları verildi. Şekil 3.15 (a)'dan görüldüğü üzere h=0 kesitinde tüm T, Ω değerleri için faz geçişleri ikinci derecedendir. Oysaki şekil.3.15 (b)'de enine alanın sıfır değerini aldığı durumda (rastgele Ising modeline özdeş olarak) düşük sıcaklıklarda birinci dereceden rastgele alanın genliğinin büyük olduğu değerler için ikinci dereceden geçişler gerçekleşmiştir. Üçlü kritik nokta vardır.

3.10 Rastgele boyuna alan etkisi altındaki Enine Alan Ising modelinin termodinamik geometrisi

Ortalama alan denge manyetik özellikleri Bölüm 3.9'da elde edilen EAI modelinin Gibbs serbest enerjisi denklem (3.103) ikinci düzen parametresi olan m_x'in fonksiyonu değildir. Bu nedenle Ruppeiner metriği (m_x, m_z) manifoldunda tanımlanamaz. Diğer yandan denklem (3.102) ile verilen Hamiltonyendeki tünelleme terimi ($\sum_i \Omega S_i^x$) spin-fonon etkileşimlerini modeller ve mekanik orijinlidir (Blinc ve Zeks, 2006). Bölüm 3.7.2'de detaylıca açıklandığı üzere etkili alanda mekanik bir terim olması halinde Ricci skaleri biri yaygın türden biri yoğun türden iki boyutlu uzayda incelenebilir. Önemli diğer bir husus ise modelin denge özelliklerinin ortalama alan yaklaşımı ile incelenmesidir. Enine alan Ising modelleri kuantum spin modelleridir ancak OAY altında elde edilen serbest enerji sadece kuantum spin operatörlerinin beklenen değerlerine bağlıdır. Denklem (3.103)'de verilen serbest enerji z doğrultusundaki spin operatörünün beklenen değeri olan m_z'nin fonksiyonudur. Bu nedenle metrik hesabı klasik sistemlerdeki gibi gerçekleştirilebilir (Janyszek ve Mrugala, 1989; Nakamura, 2022). Özetle tünelleme teriminin varlığı modelin termodinamik geometrisini m_z, T iki boyutlu manifoldda incelememize izin verir. Bu durumda termodinamik uzayda bulunan bu iki nokta arasındaki mesafenin karesini, termodinamik uzunluğu, tanımlayan metrik denklem:

$$ds^2 = g^{ij} dm_z dT. \tag{3.108}$$

burada:

$$g^{ij} = -\frac{1}{T}\frac{\partial^2 G}{\partial m_z \partial T}, \tag{3.109}$$

ds^2'yi düzenleyip tekrar yazmak istersek:

$$ds^2 = -\frac{1}{T}\frac{\partial^2 G}{\partial m_z \partial T}\partial m_z \partial T = -\frac{1}{T}\frac{\partial^2 G}{\partial T^2}(dT)^2 + \frac{1}{T}\frac{\partial^2 G}{\partial (m_z)^2}(dm_z)^2. \tag{3.110}$$

Burada G serbest enerjidir. T ve m_z koordinatları ile açıklanan metrik tensör köşegendir (Janyszek ve Mrugala, 1989). Diğer yandan, metrik tensörün denklem (3.111) ile verilen bileşenleri sırasıyla ısı kapasitesi ve alıngalık ile ilişkilidir.

$$\begin{aligned} g_{TT} &= -\frac{1}{T}\left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2}\right)_M = cT^{-2}, \\ g_{MM} &= \frac{1}{T}\left(\frac{\partial^2 G}{\partial {m_z}^2}\right)_T = T^{-1}{\chi_T}^{-1}. \end{aligned} \tag{3.111}$$

Kısım 3.7.2'de elde edilen denklem (3.64) EAI modeline uygulandığında ($m = m_z$) Ricci skaleri:

$$R = -\frac{1}{\sqrt{g}}\left(\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{1}{\sqrt{g}}\frac{\partial g_{MM}}{\partial T}\right) + \frac{\partial}{\partial m_z}\left(\frac{1}{\sqrt{g}}\frac{\partial g_{TT}}{\partial m_z}\right)\right), \tag{3.112}$$

şeklinde verilir.

Denklem (3.102)'deki serbest enerji kullanılarak metrik terimleri hesaplanmıştır. Ancak elde edilen ifadelerin karmaşıklığı nedeni ile sembolik sonuçları vermektense ortalama alan yaklaşımı denge mıknatıslanmalarını kullanarak elde ettiğimiz sayısal sonuçları grafiklerle sunmayı tercih ettik. Sayısal hesaplamalar ile düzen parametreleri ve denklem (3.112)'deki Ricci skaleri hesaplandığında rastgele boyuna alan etkisi altındaki EAI modelinin termodinamik geometrisine ait termodinamik eğriliğin faz geçişleri yakınındaki sıcaklık davranışı elde edildi.

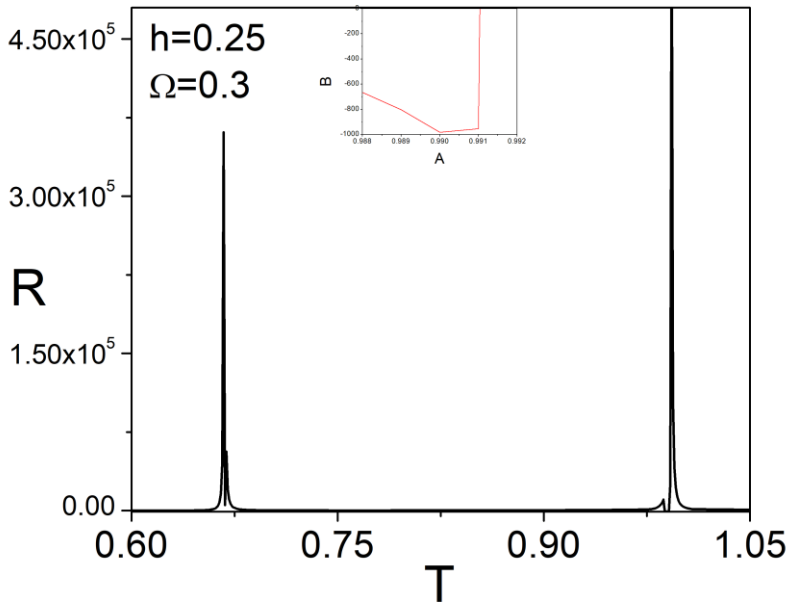
Şekil 3.16-3.19'da sabit enine alan için ($\Omega_c>\Omega=0.3$) Ricci skalerinin sıcaklıkla değişimi rastgele boyuna alanın (h) farklı değerleri için verilmiştir. İlk olarak şekil 3.16'da boyuna alan düzensizliğinin olduğu EAI modeli (h=0.25) için ele alındı. Bu şekilden görüldüğü üzere h=0.25 için Ricci skaleri geçiş sıcaklığı yakınında ıraksama davranışı sergilemektedir. Bunun yanı sıra herhangi bir faz geçişinin sergilenmediği düzenli fazdaki sonlu bir sıcaklıkta yüksek genlikli bir pik gözlemlenmiştir. Şekil 3.17'de bu kez rastgele boyuna alanın genliği arttırılmış ve düzenli fazda gözlemlenen pikin genliğinde gözle görülür bir azalma görülmüştür. Daha sonra şekil 3.18'de h=0.35 durumu ve şekil 3.19'da h=0.4 için olan rastgele EAI modelinin Ricci skalerinin sıcaklıkla değişimi verilmiştir. Görüldüğü üzere bu anomali rastgele alanın artan değeri için azalarak yok olma eğilimindedir. h'ın tüm değerleri için Ricci skaleri geçiş sıcaklığının yakınında kısa bir sıcaklık aralığı için sıfırın altına düşmektedir. Sonra düzensiz fazda tekrar pozitif değerler almaktadır. Bu durum her bir grafikte kırmızı renkteki eğri ile gösterilmiştir.

Şekil 3.20'de yukarıda detaylıca bahsedilen anomalilerin konumları h=0 ve h=0.1 olan rastgele EAI modelinin (T,Ω) faz diyagramlarında işaretlenmiştir. Diğer yandan şekil 3.19'da görüldüğü üzere ve negatife düştüğü bölge çok dar bir aralıkta yer alır. Bu nedenle minimumlu faz diyagramında işaretlenmemiştir. Spin-1 modelleri için gerçekleştirilen ortalama alan çalışmalarında Ricci skalerinin $T<T_c$ iken negatif, düzensiz fazda ise ($T>T_c$) pozitif değerler aldığını ve $T=T_c$'de ıraksak olduğunu ortaya koymuştur. Diğer yandan yeniden geçiş sergileyen faz eğrisine sahip sistemlerde kritik nokta öncesinde Ricci skalerinin negatife düşmediği haller rapor edilmiştir (Alata vd.,

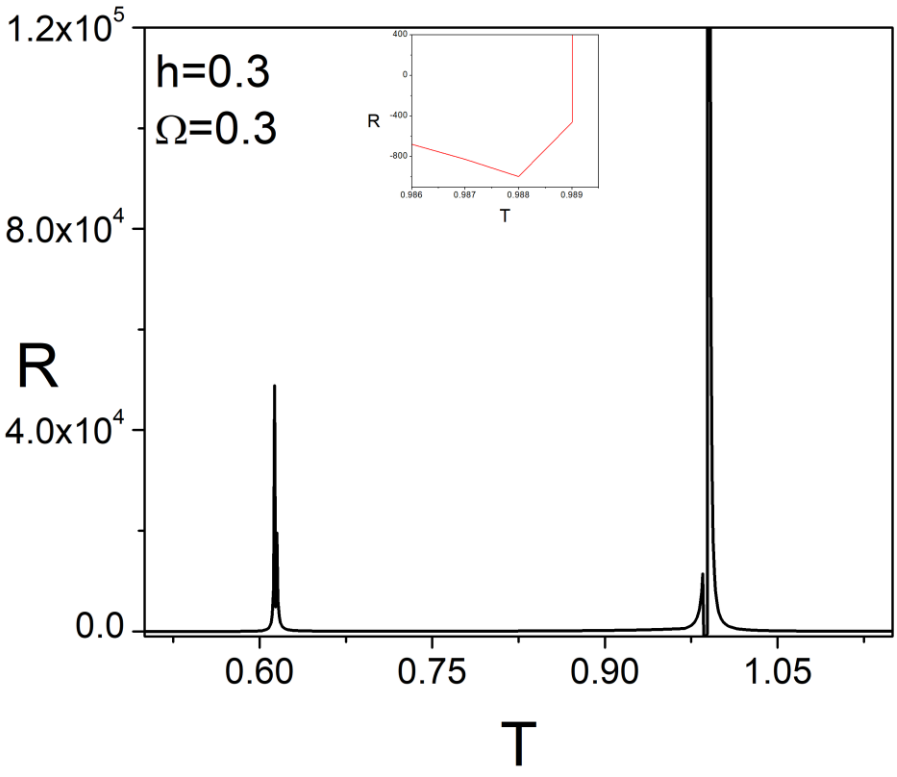
2023). Bir sistemin yeniden geçiş sergilemesi için o sistemin simetri kırılmasına neden olan temel etkileşmeler ve ısıl dalgalanmalar arasında rekabet olması gerekir. Bizim sistemimizde benzeri bir rekabet sıcaklık ile tünelleme terimi arasında mevcuttur. Diğer yandan geçişler klasik karakterde olsa dahi tünelleme teriminin varlığı kuantum dalgalanmalara neden olur. Özetle rastgele EAI modeli sisteminde Curie sıcaklığı yakınında Ricci skalerinin pozitif kalması termal ve kuantum dalgalanmalar arasındaki rekabetten kaynaklanmaktadır.

Şekil 3.21 (a) (b) ve (c)'de ise Ricci skaler izotermlerinin enine alana bağlılıkları verilmiştir. Beklendiği üzere sabit sıcaklık için alanın kritik değerine erişildiğinde Ricci skaleri ıraksama davranışı sergilemektedir. Benzer davranış rastgele alanın h=0.1 değeri için görülürken genlikte düşmeler boyuna alandaki düzensizliğe bağlanabilir. h=0.15 değeri alması halinde Ricci skaleri beklenmedik bir davranış sergilemektedir. Negatif değerler almakta ve $\Omega = \Omega_c$ için kasp (sivri uç) davranışı sergilemektedir. En iyi bilgimiz dahilinde ortalama alan yaklaşımı ile yapılan hiçbir çalışmada böylesi bir davranış görülmemiştir. Bunun rastgele alandaki düzensizlikle enine alandan kaynaklanan kuantum dalgalanmalarının bir sonucu olabileceği kanaatindeyiz.

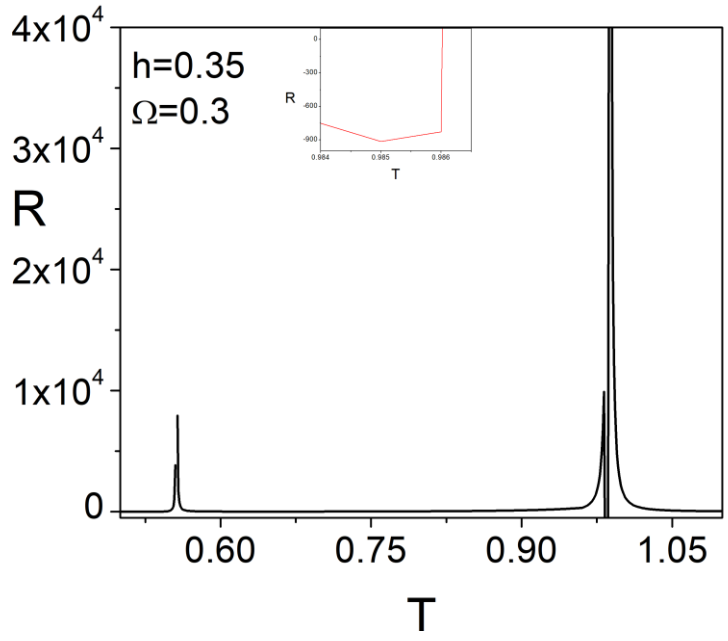
Termodinamik eğriliğin ikinci dereceden geçişler yakınındaki davranışının ıraksama sergilediği önceki çalışmalarda ortaya konmuştur. Ising modeli, izotropik BEG modeli ve BEG modeli için düzen parametresi uzayında gerçekleştirilen çalışmalarda aynı davranış görülmüştür. Diğer yandan Ruppeiner termodinamik dalgalanma teorisinde Ricci skalerini $T \rightarrow T_c$ iken dalgalanlamalarla ilişkili olduğunu ortaya koymuştur: $R \sim \xi^d$ (Ruppeiner, 1995). Diğer yandan Erdem antiferromanyetik Ising modeline üzerine gerçekleştirdiği termodinamik geometri incelemesinde Ricci skalerinin sürekli geçişler yakınında $|T - T_c|^{-2}$ şeklinde ölçekleme ilişkesinee sahip olduğunu göstermiştir. Bu sonuçlara uyumlu şekilde EAI modelinin sonlu sıcaklık faz geçişi yakınında Ricci skaleri ıraksak bir davranış sergilemiştir.



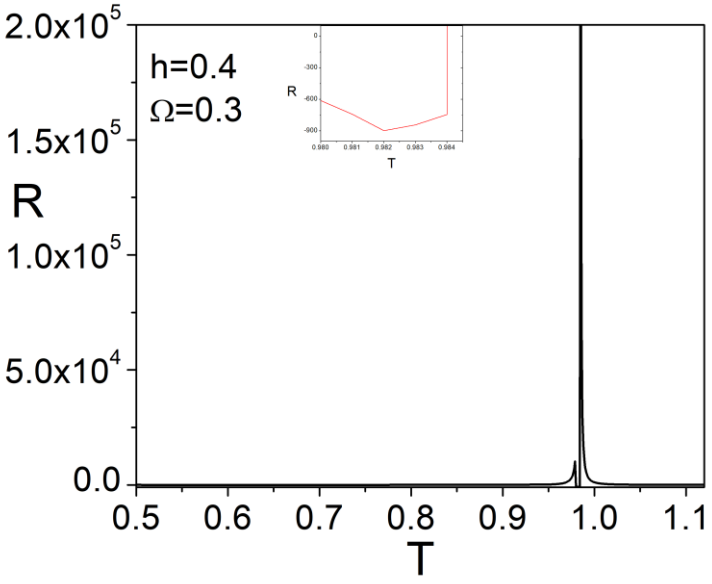
Şekil 3.16 Rastgele boyuna alan etkisi altındaki EAI modeli için h=0.25 iken Ricci skalerinin sıcaklıkla değişimi.



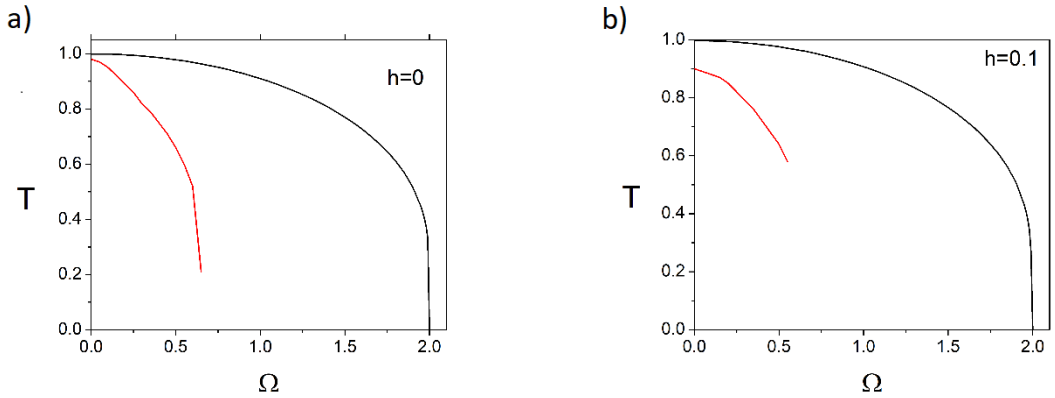
Şekil 3.17 Ricci skalerinin h=0.3 için ve sabit enine alan için sıcaklıkla değişimi.



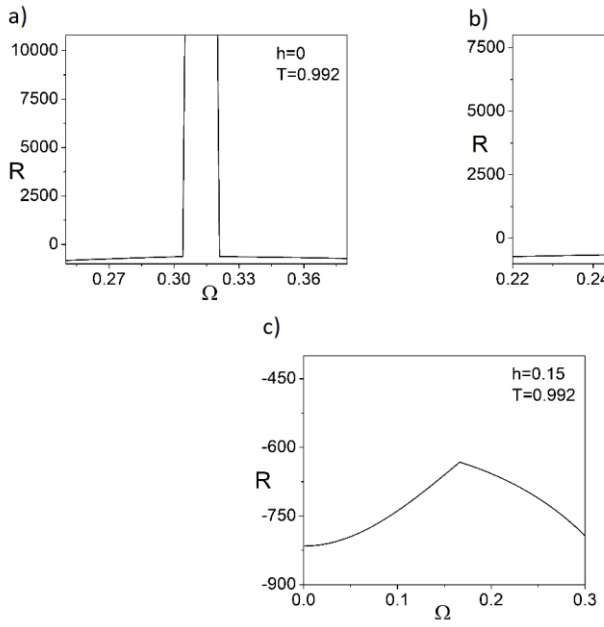
Şekil 3.18 Ricci skalerinin h=0.35 için ve enine alan etkisi altında sıcaklıkla değişimi.



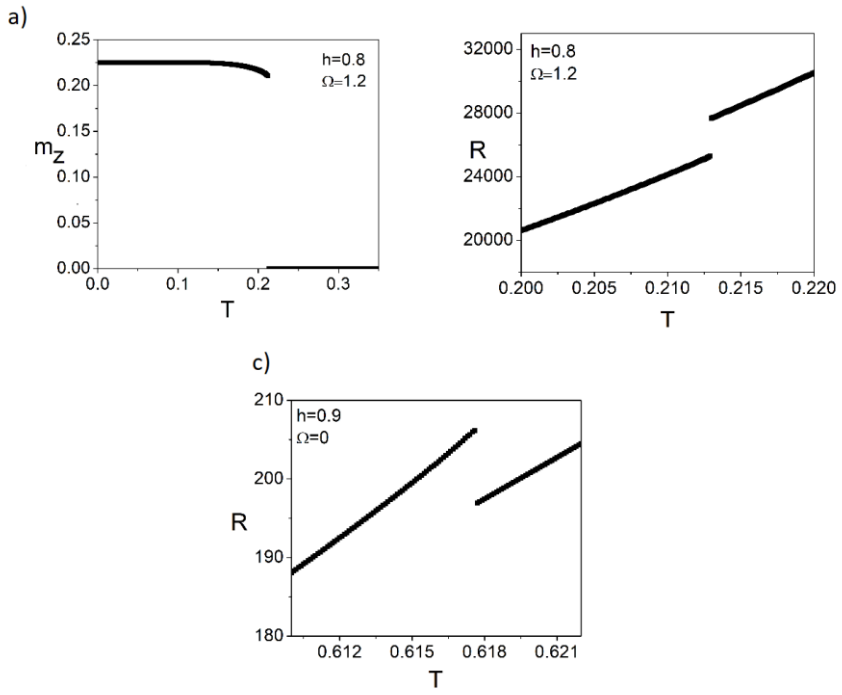
Şekil 3.19 Ricci skalerinin h=0.4 iken ve enine alan etkisi altında sıcaklıkla değişimi.



Şekil 3.20 Rastgele EAI modeline ait a) enine alan etkisinin dış manyetik alan etkisinin olmadığı durumda sıcaklıkla değişimini gösteren faz diyagramı b) enine alan etkisinin dış manyetik alan etkisi altında sıcaklıkla değişimini gösteren faz diyagramı.

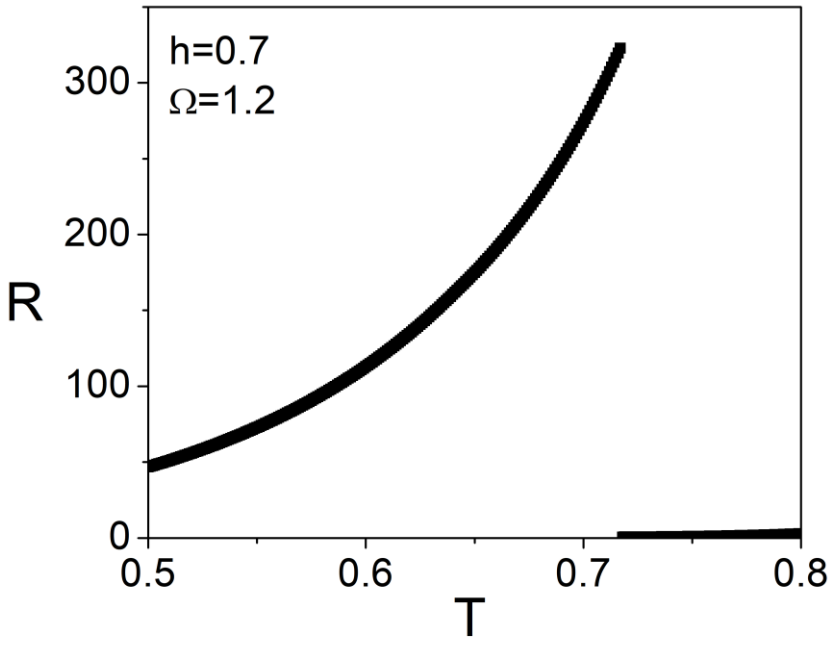


Şekil 3.21 a) Ricci skalerinin h=0 ve T=0.992 için enine alan ile değişimi b) Ricci skalerinin h=0.1 ve T=0.992 için enine alan ile değişimi c) Ricci skalerinin h=0.15 ve T=0.992 için enine alan ile değişimi.



Şekil 3.22 a) Boyuna mıknatıslanmanın h=0.8 ve Ω=0.3 iken birinci dereceden faz geçişi. b) Ricci skalerinin birinci dereceden faz geçişi kritik nokta yakınındaki davranışı c) Ricci skalerinin h=0.9 ve Ω=0 birinci dereceden faz geçişi kritik nokta yakınındaki davranışı.

Boyuna dış alandaki düzensizlikten dolayı rastgele EAI modelihem sürekli hem de süreksiz faz geçişleri sergilemektedir. Ortalama alan analizimiz modelin h=0.9 ve Ω=0.3 değeri için birinci dereceden süreksiz bir faz geçişi ortaya koymuştur. Şekil 3.22 (a)'da sistemin birincil düzen parametresi m_z'nin sıcaklıkla değişimi görülmektedir. 3.22 (b)'de ise Ricci skalerinin birinci dereceden geçiş yakınındaki sıcaklıkla değişimi verilmiştir. Son olarak şekil 3.22 (c)'de bu kez Ω=0 özel hali için rastgele alan Ising modelinin Ricci skalerinin birinci dereceden geçiş yakınındaki davranışı görülmektedir. Literatürdeki diğer ortalama alan spin modelleri gibi rastgele EAI modeli içinde Ricci skaleri birinci dereceden geçiş yakınında sonlu atlama sergilemektedir.



Şekil 3.23 Ricci skalerinin üçlü kritik nokta yakınıdaki sıcaklıkla değişimi.

Şekil 3.23 üçlü kritik faz diyagramında görüldüğü üzere Tünelleme teriminin 1.2 değeri için sistem üçlü kritik davranış sergiler. Burada hem tünelleme teriminden ileri gelen Ω hem de alan düzensizliğini temsil eden h parametreleri oldukça yüksek değerler almaktadır. Bu durum düzensiz fazda farklı bir davranış gözlemlememize neden olmuştur. Diğer ele aldığımız sürekli geçiş yakınındaki iki taraflı ıraksama davranışından farklı olarak Ricci skaleri bu üçlü kritik noktada düzensiz fazda Ricci çok küçük değerler almaktadır. Bu duruma benzer bir davranış aşağıda detaylı olarak bahsedilecek XY modelinin termo geometrik incelemesinde de görülmüştür.

3.11 Metamanyetik Ising Model

Metamanyetik bir sistemde aynı katmandaki spinler arasında ferromanyetik, komşu tabakalar arasındaki spinler arasında ise antiferromanyetik etkileşimler vardır. Metamıknatıs dış alanın sıfır değerinde, Ising antiferromıknatısı gibi davranır. En iyi bilinen Ising metamıknatısları $FeCl_2$ ve $FeBr_2$'dir. Metamanyetik Ising modellerinin

sıcaklık, dış boyuna alandaki faz diyagramı hem teorik hem de deneysel olarakdaha önce incelenmiştir (Selke, 1996; Wolf, 2000). Teorik olarak, ortalama alan teorisinde, metamanyetik Ising modelinin $R = z_1J_1/z_2J_2$ oranına bağlı olarak (T,h) düzleminde iki tür faz diyagramı bilinmektedir. Burada z_1 aynı tabakadaki z_2 ise komşu tabaklardan ileri en yakın komşu sayısını verir benzer şekilde J_2 tabakalar arası antiferromanyetik, J_1 ise aynı tabakadaki spinler arasındaki ferromanyetik etkilişi belirtmektedir. Her iki durumda da, antiferromanyetik ve paramanyetik fazlar arasındaki geçiş, düşük sıcaklıkta ve geniş boyuna alanlarda birinci dereceden, yüksek sıcaklıkta ise ikinci derecedendir. Kincaid ve Cohen, metamıknatısiçin basit bir ortalama alan modeli çalışmasında $FeBr_2$ ve diğer benzer sistemlerde yeni kritik davranış türlerinin gözlemlenebileceğini ortaya koymuştur (Kincaid ve Cohen. 1974). Pleimling ve Selke, mıknatıslanma ve sırasıyla S= 1/ 2 ve S= 1 durumları için ortalama alan teorisi ve Monte Carlo simülasyonları kullanılarak özgül ısı anormaliklerini incelediler (Pleimling ve Selke, 1997). Özellikle, anomali davranışının komşu tabaka içi etkileşimlere, spin değerine ve Ising benzeri anizotropiye bağlılığını araştırdılar. Wang ve Kimel, S=1 antiferromanyetik Blume-Capel modelinde, ortalama alan yaklaşımında ve Monte Carlo simülasyonlarını kullanarak, daha düşük mertebeden diğer kritik noktalarla birlikte dördüncü dereceden bir kritik noktanın geçerli olduğunubasit kübik örgü için göstermişlerdir (Wang ve Kimel, 1991).

Son zamanlarda, Žukovič ve Bobak ve Žukovič ve Idogaki, sırasıyla korelasyonlu etkin alan teorisi ve Monte Carlo simülasyonu kullanarak seyreltilmiş bir Ising metamıknatısının harici bir boyuna alandaki faz diyagramlarını ve üçlü kritik davranışını incelediler (Zukovic ve Idogaki, 2000; Zukovic ve Bobak, 1997). Moreira ve arkadaşları, ortalama alan Curie-Weiss yaklaşımı içinde sıkıştırılabilir metamanyetik Ising modelini incelediler ve basınç altındaki üçlü kritik noktanın davranışı için üç farklı olasılığın ortaya çıktığını buldular (Moreira vd.. 2010). Galam ve arkadaşları, tekdüze ve rastgele alanın varlığında metamanyetik Ising modelin faz diyagramını inceledi ve ortalama alan teorisini kullanarak, faz diyagramlarının nitel özelliklerinin önemli ölçüde rastgele alanların dağılımına bağlı olduğunu gösterdiler (Galam vd., 1998). Ovchinnikov ve arkadaşları antiferromanyetik Ising zincirini karma spin enine ve boyuna manyetik alanda klasik yaklaşım ve yoğunluk matrisi ile

renormalizasyon grup teorisi yöntemini kullanarak incelediler ve taban durumu için faz diyagramını oluşturdular (Ovchinnikov vd,. 2003). Bu incelemeler, geçiş sıcaklığının belirli bir enine alanda sıfıra düştüğünü göstermektedir.

Hem boyuna hem de enine manyetik alanlarda iki alt örgülü bir metamanyetik Ising modeline ait Hamiltonyen aşağıdaki gibi verilir:

$$H = -J_1\left(\sum_{<ij>} S_i^z S_j^z + \sum_{<kl>} S_k^z S_l^z\right) - J_2 \sum_{<ik>} S_i^z S_k^z \\ - H_z\left(\sum_i S_i^z + \sum_k S_k^z\right) - H_x\left(\sum_i S_i^x + \sum_k S_k^x\right). \tag{3.113}$$

Burada $S_i^{\alpha}(\alpha = x, z)$ bir spin değişkeninin bileşenini belirtir ve $S_i^z = \mp 1$'dir. Sistemde, tek düzlemler ve çift düzlemler sırasıyla A alt örgüsünü ve B alt örgüsünü oluşturur. <i, j> A alt örgüsüne aittir ve <k,l> A alt örgüsüne aittir, düzlemdeki en yakın komşu çiftleri ve <i,k>, A ve B alt örgüleri arasındaki komşu düzlemlerdeki en yakın komşu çiftlerini gösterir. $H_z$ve H_x, düzleme dik boyuna ve enine paralel enine manyetik alanı belirtir. Hesaplamada, $J_1 > 0$ ve $J_2 < 0$'yi varsayıyoruz, böylece düzlemlerin her biri ferromanyetik, ancak komşu düzlemlerle antiferromanyetik etkileşim içerisindedir.

Tek düze ve rastgele alanlarda iki alt örgülü bir Ising metamıknatısı için, sistemin geçiş sıcaklığını ve üçlü kritik noktasını belirleyen koşulları elde edebiliriz. İlk olarak, Bogoliubov'un Gibbs serbest enerjisi için varyasyon ilkesinden ortalama alan denklemlerini türetelim.

$$G(H) \leq \Phi \equiv G_0(H_0) + < H - H_0 >_0, \tag{3.114}$$

burada G(H), Hamiltonyen tarafından tanımlanan sistemin serbest enerjisidir, $G_0(H_0)$, varyasyonel parametrelere bağlı olan bir deneme Hamiltonyeni H_0'ın serbest enerjisidir ve $< H - H_0 >_0$, H_0 tarafından tanımlanan topluluk üzerindebir termal ortalamayı belirtir. Etkileşimsiz deneme Hamiltoniyeni:

$$H_0 = -(\gamma_A + H_z)\sum_{i\epsilon A} S_i^z - H_x \sum_{\epsilon A} S_i^x - (\gamma_B + H_z)\sum_{i\epsilon B} S_i^z - H_x \sum_{k\epsilon B} S_k^x, \qquad (3.115)$$

şeklindedir. Burada γ_A ve γ_B iki değişken parametredir. Rotasyon dönüşümünü kullanarak

$$\begin{aligned} G(H) \leq \Phi \equiv -\frac{N}{2\beta}\Big\{ & ln\left[2cosh\left(\beta\sqrt{(\gamma_A + H_z)^2 + H_x^2}\right)\right] \\ & + ln\left[2cosh\left(\beta\sqrt{(\gamma_B + H_z)^2 + H_x^2}\right)\right]\Big\} \\ & + \frac{N}{2}\Big[\left(\gamma_A - \frac{1}{2}z_1 J_1 m_A - \frac{1}{2}z_2 J_2 m_B\right)m_A \\ & + \left(\gamma_B - \frac{1}{2}z_1 J_1 m_B - \frac{1}{2}z_2 J_2 m_A\right)m_B\Big], \end{aligned} \qquad (3.116)$$

olarak elde ederiz (Kaneyoshi vd. 1993). Burada $\beta = 1/k_B T$ ve N, sistemin toplam site sayısıdır. Boyuna ve enine alt örgü mıknatıslanmaları m_A,m_B ve m_A^x ve m_B^x düzen parametreleri şöyle tanımlanır:

$$m_A \equiv < S_i^z >_0 = \frac{\gamma_A + H_z}{\sqrt{(\gamma_A + H_z)^2 + H_x^2}} tanh\left(\beta\sqrt{(\gamma_A + H_z)^2 + H_x^2}\right), \qquad (3.117)$$

$$m_B \equiv < S_i^z >_0 = \frac{\gamma_B + H_z}{\sqrt{(\gamma_B + H_z)^2 + H_x^2}} tanh\left(\beta\sqrt{(\gamma_B + H_z)^2 + H_x^2}\right), \qquad (3.118)$$

$$m_A^x \equiv < S_i^x >_0 = \frac{H_z}{\sqrt{(\gamma_A + H_z)^2 + H_x^2}} tanh\left(\beta\sqrt{(\gamma_A + H_z)^2 + H_x^2}\right), \qquad (3.119)$$

$$m_B^x \equiv < S_i^x >_0 = \frac{H_z}{\sqrt{(\gamma_B + H_z)^2 + H_x^2}} tanh\left(\beta\sqrt{(\gamma_B + H_z)^2 + H_x^2}\right). \quad (3.120)$$

Şimdi, eşitsizliğin sağ tarafını γ_A ve γ_B'ye göre minimize ederek, varyasyonel parametreleri aşağıdaki gibi yazabiliriz:

$$\gamma_A = z_1 J_1 m_A + z_2 J_2 m_B, \quad (3.121)$$

$$\gamma_B = z_1 J_1 m_B + z_2 J_2 m_A, \quad (3.122)$$

z_1 ve z_2, sırasıyla düzlemdeki ve komşu düzlemlerdeki en yakın komşuların koordinasyon sayılarıdır. Faz diyagramının bazı özelliklerini analitik olarak belirlemek için, boyuna toplam mıknatıslanma, sekmeli mıknatıslanma ve enine toplam mıknatıslanmayı tanıtıyoruz

$$m_t = \frac{1}{2}(m_A + m_B), \quad (3.123)$$

$$m_s = \frac{1}{2}(m_A - m_B), \quad (3.124)$$

$$m_x = \frac{1}{2}(m_A^x + m_B^x). \quad (3.125)$$

Boyutsuz indirgenmiş değişkenler ise:

$$t = \frac{1}{\beta(z_1 J_1 - z_2 J_2)}, \quad h = \frac{H_z}{(z_1 J_1 - z_2 J_2)}, \quad \Omega = \frac{H_x}{(z_1 J_1 - z_2 J_2)},$$
$$\alpha = \frac{z_1 J_1 + z_2 J_2}{z_1 J_1 - z_2 J_2} = \frac{R+1}{R-1}. \quad (3.126)$$

Burada $R = z_1 J_1 / z_2 J_2$. Mıknatıslanmalara ait denklemler ise aşağıdaki gibi elde edilir.

$$m_t = \frac{1}{2}\left[\begin{array}{l} \dfrac{h+\alpha m_t + m_s}{\sqrt{(h+\alpha m_t + m_s)^2 + \Omega^2}} tanh \dfrac{\sqrt{(h+\alpha m_t + m_s)^2 + \Omega^2}}{T} \\ + \dfrac{h+\alpha m_t - m_s}{\sqrt{(h+\alpha m_t - m_s)^2 + \Omega^2}} tanh \dfrac{\sqrt{(h+\alpha m_t - m_s)^2 + \Omega^2}}{T} \end{array}\right], \quad (3.127)$$

$$m_s = \frac{1}{2}\left[\begin{array}{l} \dfrac{h+\alpha m_t + m_s}{\sqrt{(h+\alpha m_t + m_s)^2 + \Omega^2}} tanh \dfrac{\sqrt{(h+\alpha m_t + m_s)^2 + \Omega^2}}{T} \\ - \dfrac{h+\alpha m_t - m_s}{\sqrt{(h+\alpha m_t - m_s)^2 + \Omega^2}} tanh \dfrac{\sqrt{(h+\alpha m_t - m_s)^2 + \Omega^2}}{T} \end{array}\right], \quad (3.128)$$

$$m_x = \frac{1}{2}\left[\begin{array}{l} \dfrac{\Omega}{\sqrt{(h+\alpha m_t + m_s)^2 + \Omega^2}} tanh \dfrac{\sqrt{(h+\alpha m_t + m_s)^2 + \Omega^2}}{T} \\ + \dfrac{\Omega}{\sqrt{(h+\alpha m_t - m_s)^2 + \Omega^2}} tanh \dfrac{\sqrt{(h+\alpha m_t - m_s)^2 + \Omega^2}}{T} \end{array}\right]. \quad (3.129)$$

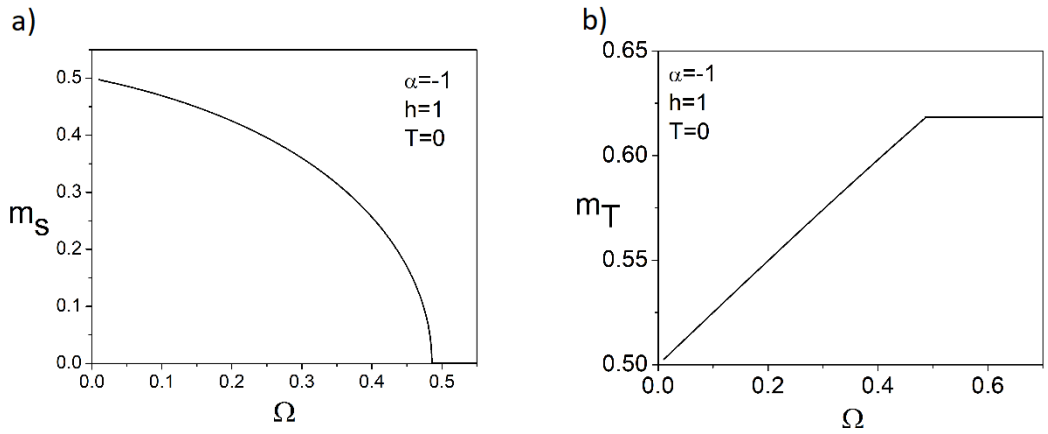
Daha sonra, spin başına ortalama alan serbest enerjisi, eşitsizliğin alt sınırı (3.116) ile tanımlanır ve şu şekilde yazılabilir:

$$f = -\left(-\frac{T}{2}\left\{ ln\left[2cosh \frac{\sqrt{(h+\alpha m_t + m_s)^2 + \Omega^2}}{T} \right] + ln\left[2cosh \frac{\sqrt{(h+\alpha m_t - m_s)^2 + \Omega^2}}{T} \right] \right\} + \frac{\alpha}{2} m_t^2 + \frac{1}{2} m_s^2 \right) \quad (3.130)$$

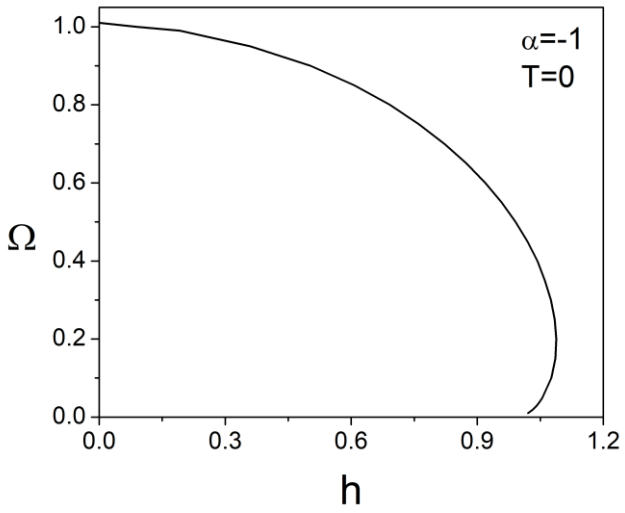
$$m_t = \frac{1}{2}\left[\frac{h+\alpha m_t + m_s}{\sqrt{(h+\alpha m_t + m_s)^2 + \Omega^2}} + \frac{h+\alpha m_t - m_s}{\sqrt{(h+\alpha m_t - m_s)^2 + \Omega^2}} \right], \quad (3.131)$$

$$m_s = \frac{1}{2}\left[\frac{h + \alpha m_t + m_s}{\sqrt{(h + \alpha m_t + m_s)^2 + \Omega^2}} - \frac{h + \alpha m_t - m_s}{\sqrt{(h + \alpha m_t - m_s)^2 + \Omega^2}}\right], \qquad (3.132)$$

Metamanyetik Isingmodelinin faz geçişini tanımlamak için kullanılan düzen parametresi m_s'dir. $m_s \neq 0$ için iki alt örgünün mıknatıslanmaları farklı olup sistem metamanyetik fazda bulunur. $m_s = 0$ ise paramanyetik faz söz konusudur.

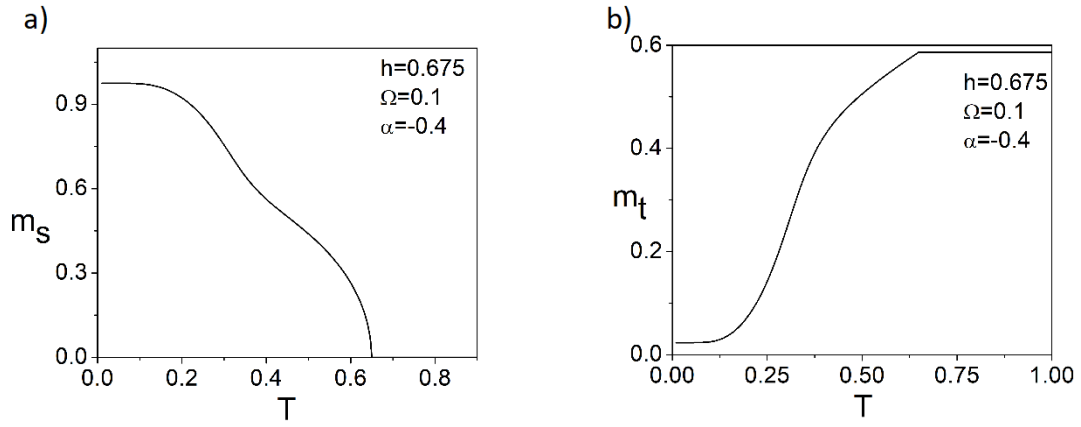


Şekil 3.24 Metamanyetik Ising modeline ait a) sekmeli b) toplam mıknatıslanmanın T=0, h=1, α=-1 için enine alanla değişimi.

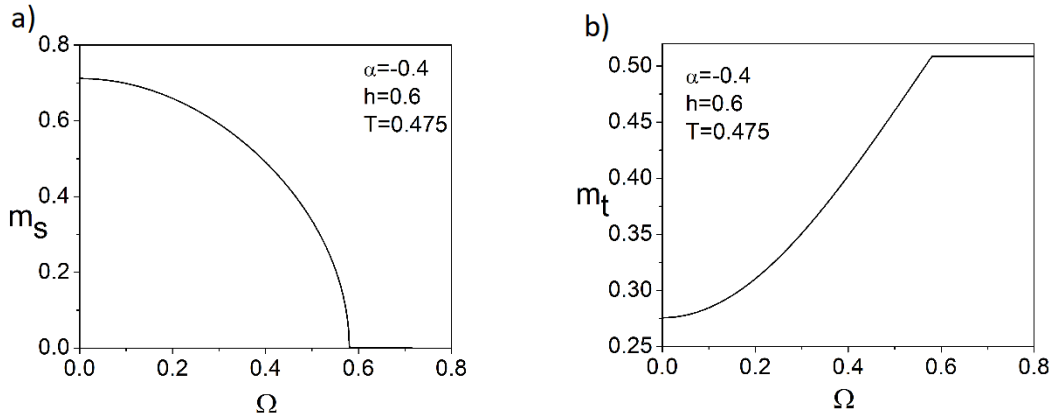


Şekil 3.25 Metamanyetik Ising modeline ait enine alanın sıfır sıcaklıkta boyuna alan ile değişimini gösteren faz diyagramı

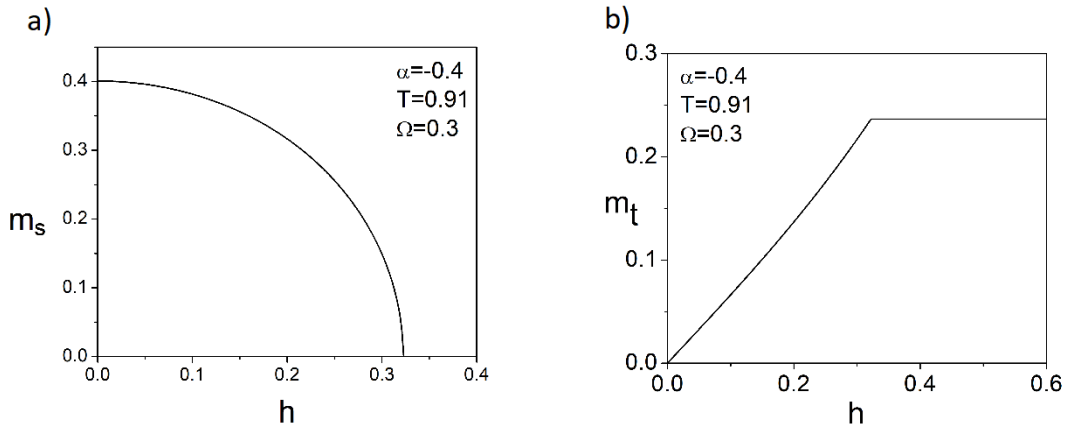
Sonlu sıcaklık özelliklerine geçmeden önce enine alan metamanyetik Ising modelinin temel seviyesinin (T=0) manyetik özelliklerini tartışmak yerinde olacaktır. Denklem (3.97) ile verilen temel seviye analizi gerçekleştirildiğinde sıfır sıcaklık birincil düzen parametresi m_s ve m_t'ye ait hal denklemleri, denklem (3.131-3.132) halini alır. Şekil 3.24 (a) ve (b)'de h=1 T=0 iken sekmeli ve toplam mıknatıslanmaların tünelleme terimi ile değişimleri görülmektedir. Kuantum karakterindeki bu faz geçişi ikinci derecedendir. T=0 için Ω-h uzayı taranarak temel seviye (Ω-h) faz diyagramı elde edildi ve şekil 3.25'de verildi. İlginç olan bir nokta temel seviye faz diyagramının yeniden geçiş özelliği sergilemesidir.



Şekil 3.26 Metamanyetik Ising modeline ait a) sekmeli b) toplam mıknatıslanmanın h=0.675, Ω=0.1 ve α=-0.4 için sıcaklıkla değişimi.



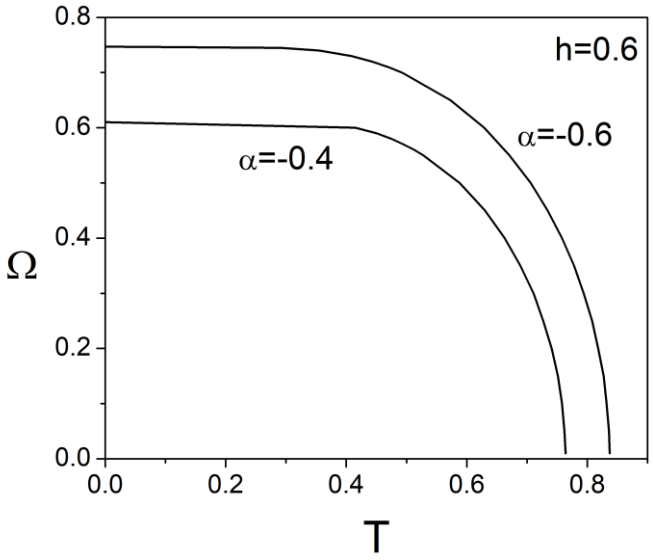
Şekil 3.27 Metamanyetik Ising modeline ait a) sekmeli b) toplam mıknatıslanmanın h=0.6, T=0.475 ve α=-0.4 için enine alan ile değişimi.



Şekil 3.28 Metamanyetik Ising modeline ait a) sekmeli b) toplam mıknatıslanmanın Ω=0.3, T=0.91 ve α=-0.4 için boyuna alan ile değişimi.

Enine alan metamanyetik Ising modelinin düzen parametreleri olan toplam mıknatıslanmanın (m_t) ve sekmeli mıknatıslanmanın (m_s) kritik noktaları ve sıcaklık, dış manyetik alan ve enine alan ile değişimi ile sergilediği faz geçişlerini gösteren faz diyagramlarını elde etmek için (h,T, Ω) parametre uzayını tarayarak mıknatıslanma sıcaklık eğrilerini elde ettik. Şekil 3.26 sekmeli mıknatıslanmanın dış manyetik alan ve enine alan varlığı altında sıcaklıkla değişimini göstermektedir. Şekil 3.26 (a)'da görüldüğü üzeri m_s sıcaklıkla sürekli olarak azalmakta ve kritik noktada sıfıra gitmektedir. Aynı durum m_t için geçerli değildir: Şekil 3.26 (b)'de sıcaklık davranışı verilen m_t düzenli fazda artan sıcaklıkla tırmanış sergilemekte ve $T>T_c$ için belli bir değerde doyuma ulaşmaktadır.

Şekil 3.27 (a)-(b)'de h=0.6, T=0.475 indirgenmiş alan ve sıcaklık değerli için sekmeli mıknatıslanmanın enine alan ile değişimi verilmiştir. Beklendiği üzere $\Omega \rightarrow \Omega_c$ iken ve $m_s \rightarrow 0$ iken m_t sonlu değer almaktadır. Son olarak Şekil 3.28 (a)-(b)'de m_s ve m_t'nin sabit enine ve sabit sıcaklık değerleri için boyuna alan h ile değişimi verilmiştir. Düzenli fazda m_s sıfırdan farklıdır ve $h = h_c$'de $m_s \rightarrow 0$ olmaktadır. m_t ise kritik noktada tekillik sergilemez.



Şekil 3.29 Enine alanın sabit dış manyetik alan etkisi altında sıcaklık ile değişimi

Tabakalar arası antiferromanyetik, tabaka içi ferromanyetik etkileşme içeren EAI modelinin $\alpha = \frac{z_1 J_1 + z_2 J_2}{z_1 J_1 - z_2 J_2}$ iki farklı ve boyuna alanın h=0.6 değeri için (Ω,T) faz diyagramı şekil 3.29'da verilmiştir.

3.11.1 *Metamanyetik Enine Alan Ising Modelinin Riemann Geometrisi*

Diğer önemli bir husus ise modelin denge özelliklerinin ortalama alan yaklaşımı ile incelenmesidir. Enine alan metamanyetik Ising modeli bir kuantum spin modelidir ancak OAY altında elde edilen serbest enerji sadece kuantum spin operatörlerinin beklenen değerlerine bağlıdır. $< S^z >_A$ ve $< S^z >_B$ denklem (3.130)'da verilen serbest enerji z doğrultusundaki alt örgülerdeki spin operatörlerinin beklenen değerlerinin farkı ve toplamı ile orantılı olan $m_s$ve m_T'nin fonksiyonudur. Bu nedenle metrik hesabı klasik sistemlerdeki gibi gerçekleştirilebilir (Janyszek ve Mrugala, 1989; Nakamura, 2022). Bu iki boyutlu manifold için metrik aşağıdaki gbi tanımlanabilir. Son olarak, bölüm 3.7.2'de detaylı olarak ele alınan formalizm uyarınca metamanyetik Ising modelinin termodinamik hal uzayı m_s ve m_t olarak seçilebilir. Bu durumda metrik bileşenleri:

$$g_{11} = -\beta \frac{\partial^2 f}{\partial m_s^2},$$

$$g_{12} = g_{21} = -\beta \frac{\partial^2 f}{\partial m_s \partial m_t},$$

$$g_{22} = -\beta \frac{\partial^2 f}{\partial m_t^2}, \tag{3.133}$$

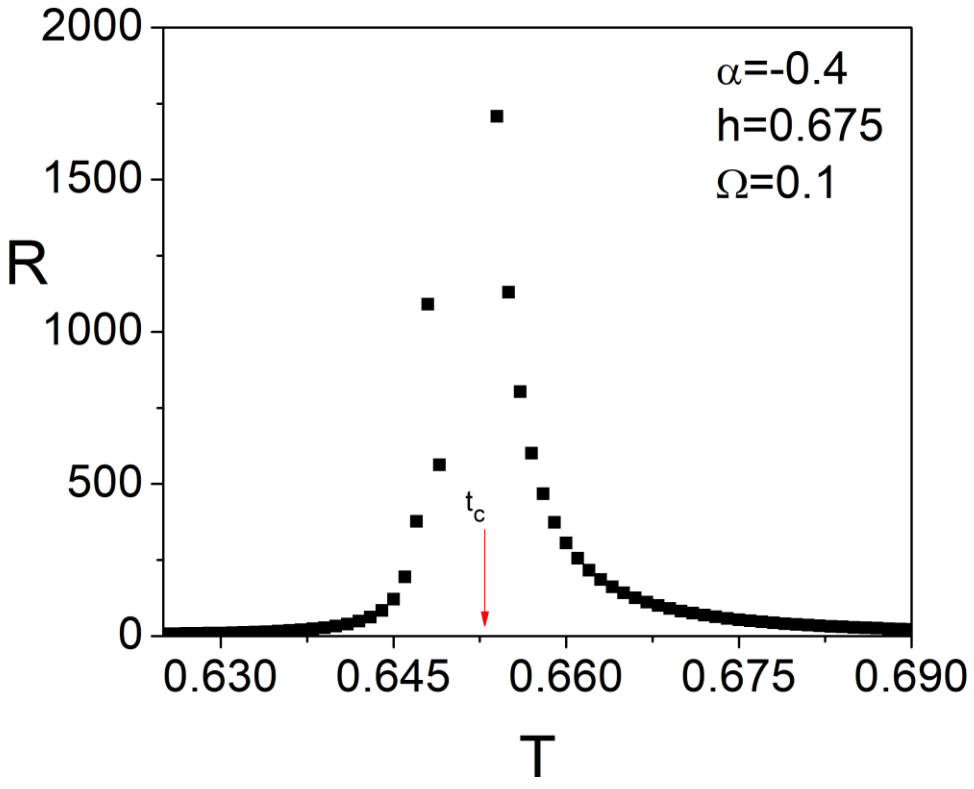
şeklindedir. En yakın ve bir sonraki en yakın etkileşmeli EAI modelinin Ricci skaleri aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$R = -\frac{1}{\sqrt{|g|}}\left[\frac{\partial}{\partial m_s}\left(\frac{g_{12}}{g_{11}\sqrt{|g|}}\frac{\partial g_{11}}{\partial m_t} - \frac{1}{\sqrt{|g|}}\frac{\partial g_{22}}{\partial m_s}\right) + \frac{\partial}{\partial m_t}\left(\frac{2}{\sqrt{|g|}}\frac{\partial g_{12}}{\partial m_t} - \frac{1}{\sqrt{|g|}}\frac{\partial g_{11}}{\partial m_t} - \frac{g_{12}}{g_{11}\sqrt{|g|}}\frac{\partial g_{11}}{\partial m_s}\right)\right]. \tag{3.134}$$

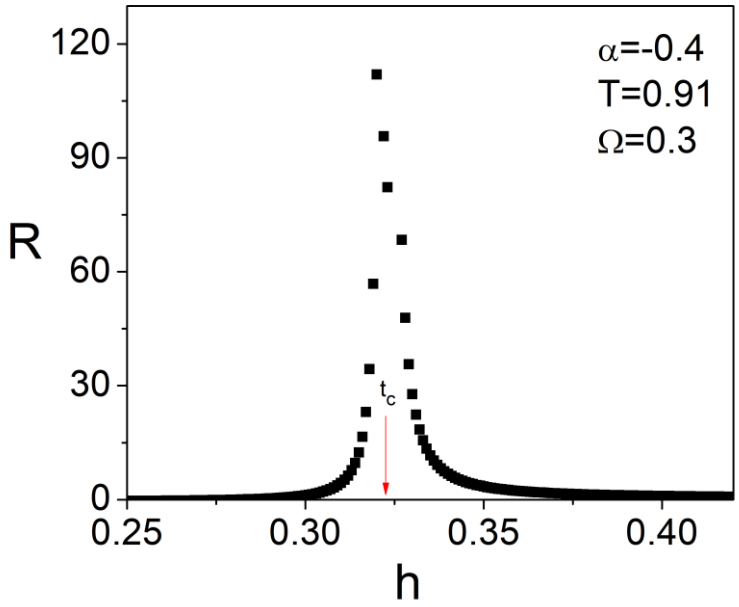
$$g = \det(g_{ij}) = g_{11}g_{22} - g_{12}^2. \tag{3.135}$$

Metrik tensör bileşenlerini veren ifadeler Denklem (3.130)'deki serbest enerji kullanılarak hesaplanmıştır. Ancak elde edilen ifadelerin karmaşıklığı nedeniyle analitik formunu vermektense OAY denge mıknatıslanmalarının sayısal çözümlerini yerine koyarak elde ettiğimiz Ricci skaleri grafiklerini sunmayı tercih ettik. İlk olarak şekil 3.30'da h=0.675, Ω=0.1 ve α=-0.4 için Ricci skalerinin sıcaklıkla değişimi verilmiştir. EAI modeline benzer şekilde sonlu sıcaklık bölgesinde klasik ancak kuantum dalgalanmaların var olduğu metamanyetik sistemin termodinamik eğriliği kritik nokta yakınında ıraksama tekilliği sergilemektedir. Ricci skalerinin boyuna alanla değişimini elde etmek için Ω=0.3, T=0.91 olarak aldık.

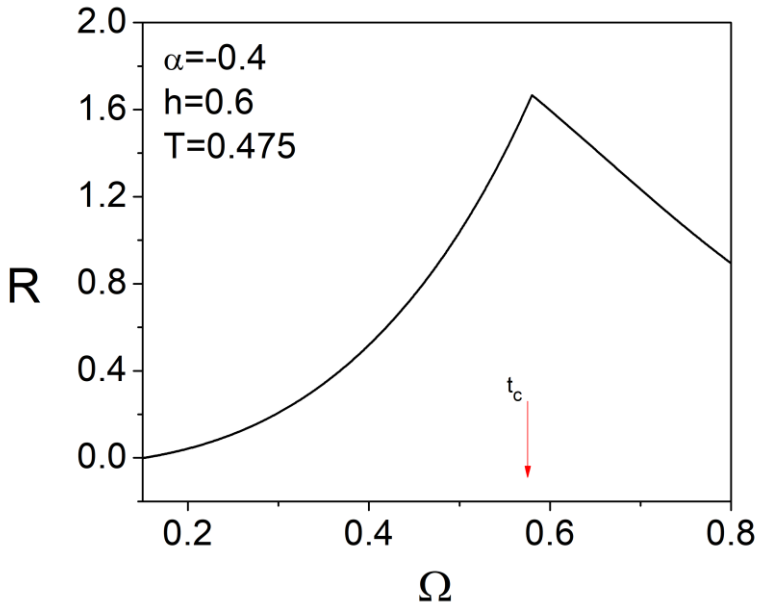
Şekil 3.31'da görüldüğü üzere Ricci skaleri dış alan kritik değerine eriştiğinde ıraksama davranışı sergiler. Bu durum klasik dalgalanmaların baskın olduğunun bir işaretidir. Bir sonraki adımda boyuna alan ve sıcaklık sabit iken enine alanın termodinamik eğrilik üzerine etkisini inceledik. Şekil 3.32'de verilen grafikte görüldüğü gibi farklı bir manifoldda incelediğimiz enine alan Ising modeline paralel bir sonuç elde ettik. Düzen parametrelerinin hal uzayındaki Ricci skalerinde $\Omega \to \Omega_c$ iken kasp davranışı sergilemektedir.



Şekil 3.30 Ricci skalerinin h=0.675, $\Omega = 0.1$ ve $\alpha = -0.4$ için sıcaklık ile değişimi.



Şekil 3.31 Ricci skalerinin T=0.91, $\Omega = 0.3$ ve $\alpha = -0.4$ için boyuna alan ile değişimi.



Şekil 3.32 Ricci skalerinin h=0.675, T=0.475 ve $\alpha = -0.4$ için enine alan ile değişimi.

Bir sonraki bölüme geçmeden önce izlediğimiz analiz ve elde ettiğimiz sonuçları literatürdeki mevcut çalışmalar ile karşılaştırmak yerinde olacaktır. Zanardi ve arkadaşları sıfır sıcaklıkta kuantum faz geçişi sergileyen bir modeli kuazi serbest fermiyon Hamiltonyenini kullanarak incelemişlerdir. Kuazi fermiyonik modeller Jordan-Wigner dönüşümleri ile kuantum Ising modeli ile ilişkilendirilmiştir. Yazarlar bu çalışmalarında EAI modelinin bir boyutlu halini transfer matrisi yöntemi ile incelemişlerdir. Kritik noktalar yakınında metrik bileşenlerini sıcaklıkla ölçeklenme ilişkilerini elde etmişlerdir. Ayrıntılı bir analiz ile metrik bileşenlerini sıfır sıcaklıktaki kuantum ve sonlu sıcaklıktaki termal geçişler için ayrı ayrı elde etmişlerdir. Bu çalışmada Bures metriği kullanılarak Gauss eğriliği hesaplanmış ve bir boyutlu enine alan Ising modeli için eğrilik Ω-T uzayında çizilmiştir (Zanardi vd., 2007b). Zanardi diğer bir çalışmasında hem x hem de y doğrultusunda manyetik düzenin olduğu ve enine alan içeren XY modelinin termodinamik geometrisini incelemiştir. Bu çalışmada XY modelinin termodinamik eğriliği sistemi betimleyen parametreler cinsinden elde edilmiştir. Sonuçlar Ricci skalerinin hal uzayı manifoldunun faz geçişleri yakınında büyük yapısal değişiklikler sergilediğini ortaya koymuştur. Klasik sistemlerle hem termal hem de kuantum faz geçişi sergileyen sistemlerin temel farkı tünelleme teriminin Ricci skalerinin davranışını etkilemesidir. Bizim sistemimizde bu etki kritik nokta uzağında görülen anomalilerle kendini göstermektedir (Zanardi vd., 2007a; Erdem ve Alata, 2020). Ruppeiner metriği ile yapılan diğer bir çalışmada ferroelektriklere uygulanan bir kuantum örgü sisteminin klasik karşılığı kullanılarak sistemin termodinamik geometrisi incelenmiştir. Çoklu kuyu potansiyeli içeren bu sistemin klasik eşdeğeri BEG modeli cinsinden yazılmış ve Ricci skalerinin kritik ve çoklu kritik noktaları yakınındaki davranışları detaylıca incelenmiştir (Erdem, 2020).

Henüz bilimsel dergilerde yayınlanmamış olan ancak çevrimiçi yayınlanan iki çalışmada kuantum Ising modelinin skaler eğriliği Bogoliubov-Kubo-Mori (BKM) metriği ile incelenmiştir. Nakamura bu iki çalışmasında tamamen kuantum faz geçişlerine odaklanmış ve ilk çalışmasında bir boyutlu EAI zincirlerinin tam çözümünü gerçekleştirerek zincirdeki parçacık sayısının sonlu değer (1,2,3) aldığı ve termodinamik limitteki sonsuz zincir halleri için Ricci skalerini sıcaklık davranışı elde etmiştir (Nakamura, 2022). Aynı yazar ikinci çalışmasında daha yüksek boyutlu

sistemleri farklı yaklaşımlar altında ele alarak sistemin termo geometrik özelliklerini incelemiştir. Sıfır, bir boyutlu ve ortalama alan yaklaşımı ile incelenen EAI modelleri BKM metriği ile detaylıca incelenmiştir. Bu çalışmanın tezde sunulan analizden iki temel farkı bulunmaktadır: Nakamura T=0'daki tekilliğini incelemiştir. Biz ise, sonlu sıcaklıklardaki termal geçişleri çalıştık. Bu tez çalışmasında biri düzen parametresi birisi de sıcaklık olan iki parametrenin tanımladığı alt manifoldda çalışıldı ve metrik bileşenleri serbest enerji kullanılarak elde edildi. Ortalama alan yaklaşımında olmamız analizimizi klasik olarak yürütmemize izin verdi ancak incelememizi sonlu sıcaklıklarda gerçekleşen termal faz geçişleri ile sınırladı. Ölçekleme davranışı üzerine odaklanan bu çalışmada alan düzensizliği yoktur ve bizim sonuçlarımıza paralel bir şekilde Ricci skalerinin ikinci dereceden geçişler yakınında ıraksama sergileyeceği gözlemlenmiştir (Nakamura, 2023). Bu çalışmada termal geçişler ayrıntılı olarak incelenmemiştir ve hem kullanılan metrik hem de seçilen manifoldlar farklıdır.

Özetle OAY altında ve klasik metrik ile yürüttüğümüz analiz mevut çalışmalardan ayrılmaktadır. Ancak sonuçlar paralellik göstermektedir. Bures ve BKM metriği ile yapılan ve kuantum istatistik mekaniği kullanılan bu çalışmalarda Ricci skalerinin geçiş noktalarında ıraksama davranışı gördüğü rapor edilmiştir. Benzeri davranış Ruppeiner metriğinde de gözlemlenmiştir. EAI modeli XY modelinin özel bir halidir. XY modelinde enine alanın değerine bağlı olarak bazı durumlarda ıraksama davranışının yerini süreksizliğe bıraktığı görülmüştür. Biz aynı davranışı rastgele alan içeren EAI modeli için gözlemledik. Üçlü kritik noktada süreksiz gördük. Ayrıca rastgele alanın varlığı düşük alan değerleri için ferromanyetik fazda, yüksek alan değerleri için ise düzensiz fazda gerçekleşen anomalilerin varlığını ortaya koymuştur. Bu durumun enine alan metamanyetik Ising modeli için söz konusu olmaması anomalilerin alan düzensizliği tarafından indüklendiğini düşündürmektedir. Şekil 3.20'de bu anomaliler (Ricci skalerinin çok yüksek değerler aldığı ancak faz geçişi noktasında yer almayan noktalar) faz eğrisinde sunulmuştur.

3.12 Rastgele Enine Alan Ising Modelinin Termal Kritik Manyetik Durulması

3.12.1 *Durulma Zamanının Termal Kritik Davranışı*

Bu bölümde Enine Alan Ising modelinin durulmasını sistemin termal kritik nokta yakınındaki davranışlarını inceleyeceğiz. İlk olarak analizimizin geçerlilik sınırlarını tartışmakta yarar vardır. Aşağıda verilen analiz ve elde edilen fiziksel nicelikler sadece ortalama alan yaklaşımı altındaki EAI modeli için geçerlidir. Diğer yaklaşımlar ve düşük boyutlu tam çözülebilen zincir sistemleri için dinamik kuantum karakterlidir ve durulma davranışı buradaki yaklaşım ile açıklanamaz (Blinc ve Zeks, 2006). Böylesi sistemlerin dinamik özellikleri çok daha karmaşık yöntemler gerektirir: Green fonksiyon teorisini kullanan çok parçacık modelleri ve mikroskobik teoriler. OAY altındaki rastgele EAI modelinin durulma davranışını ele almak için rastgele dış manyetik alanın denge değerinden yeterince küçük miktarda saptığı kabul edilir. Böylelikle sistem doğrusal yanıt kuramı kullanarak incelenebilir. Sisteme uygulanan dış manyetik alandaki sapma sistemin enerjisini arttırma eğilimindedir ve denge komşuluğunda yeni bir serbest enerji tanımlanır. Rastgele alan içeren sistem için yeni dağılım ($(p(h_i) = \frac{1}{2}[\delta(h_i - h_0 - \delta\mathrm{h}) + \delta(h_i + h_0 + \delta\mathrm{h})]$) halini alır. δh yeterince küçük iken serbest enerji denge değeri etrafında Taylor serisine açılabilir.

$$G(m_z, T, h, \Omega) = G^0(m_{z0}, T_0, h_0, \Omega_0) + \Delta G. \tag{3.136}$$

Burada m_{z0} mıknatıslanmasının denge değerini ve ΔG serbest enerjideki artış miktarını (serbest enerji prodüksiyonu) ifade eder.

$$\begin{aligned}\Delta G = &\frac{1}{2}\frac{\partial^2 G}{\partial m_z^2}(m_z - m_{z0})^2 + \frac{\partial^2 G}{\partial m_z \partial h}(h - h_0)(m_z - m_{z0}) \\ &+ \frac{1}{2}\frac{\partial^2 G}{\partial h^2}(h - h_0)^2 + \frac{\partial^2 G}{\partial m_z \partial \Omega}(\Omega - \Omega_0)(m_z - m_{z0}) \\ &+ \frac{1}{2}\frac{\partial^2 G}{\partial \Omega^2}(\Omega - \Omega_0)^2 + \frac{\partial G}{\partial h}(h - h_0) + \frac{\partial G}{\partial \Omega}(\Omega - \Omega_0).\end{aligned} \tag{3.137}$$

Sistemi dengeden uzaklaştıran dış manyetik alan kaldırıldığında sistem tekrar denge durumuna dönmek isteyecektir. Dengeye durulma süreci genelleştirilmiş kuvvet genelleştirilmiş akı ilişkisi ile ele alınabilir. Tersinmez termodinamik kuramına göre, ferromanyetikbir sistemin düzen parametresi'nin zamana göre türevi genelleştirilmiş akıya karşılık gelir. Genelleştirilmiş kuvvet X_m ise ve sistemdeki enerji artışı ΔG'nin $(m - m_0)$'a göre türevi hesaplanarak elde edilir. Genelleştirilmiş akı ve genelleştirilmiş kuvvet arasındaki doğrusal ilişkiyi fenomenolojik oran katsayısı olan $L_{m_z m_z}$'yi kullanarak yazabiliriz.

$$\dot{m}_z = L_{m_z m_z} X_{m_z}. \tag{3.138}$$

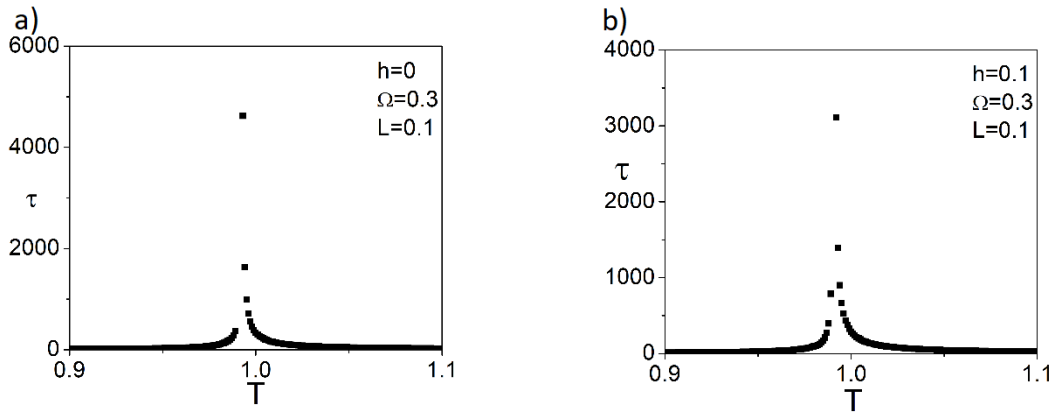
Sistemin durulma zamanını elde etmek için dış manyetik alanın denge durumundaki dış manyetik alana eşit olduğunu $h = h_0 = 0$ olduğu durum kabul edilir ve denklem

$$\dot{m}_z = A L_{mm}(m_z - m_{z0}), \tag{3.139}$$

halini alır. Denklem (3.139) uyarınca tanımlanan genellteştirilmiş akı için çözüm fonksiyonu olarak $e^{-t/\tau}$ formunda bir çözümönerilerekenine alan Ising modeline ait durulma zamanları hesaplanabilir:

$$\tau = -\frac{1}{A L_{m_z m_z}}. \tag{3.140}$$

Denklem (3.103) ile verilen serbest enerji kullanılarak ve OAY altındaki mıknatıslanmaların sayısal çözümleri gerçekleştirilerek denklem (3.138)'deki A katsayısı edildi. Daha sonra denklem (3.140)'de yerine konarak ve L=0.1 alınarak durulma zamanı şekil 3.33'deki gibi elde edildi. Şekil 3.33 (a)'daki şekil saf EAI modeli için $\Omega = 0.3$ iken manyetik durulma davranışının kritik yavaşlama sergilediğini ortaya koymaktadır. Klasik geçişler için kritik yavaşlamanın varlığı sonlu rastgele alan içinde söz konusudur. Şekil 3.33(b)'de verilen durulma zamanı kritik nokta yakınında ıraksamaktadır.



Şekil 3.33 a) Durulma zamanının dış manyetik alanın olmadığı ve enine alan etkisi altında kritik nokta yakınında sıcaklıkla değişimi b) Durulma zamanının dış manyetik alanın olduğu ve enine alan etkisi altında kritik nokta yakınında sıcaklıkla değişimi

3.12.2 *Rastgele Enine Alan Ising Modeline Ait Dinamik Alınganlıklarının Elde edilmesi ve İncelenmesi*

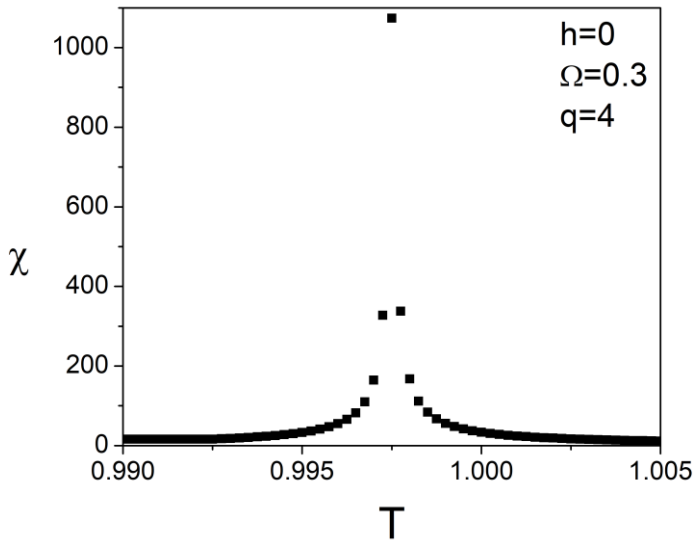
Denge dışı alınganlığın elde edilmesinden önce AC alınganlığın düşük frekans davranışına karşılık gelen denge alınganlığı elde etmek yerinde olacaktır. Rastgele EAI modeline aithal denklemi:

$$m_z = \frac{1}{4}\left\{ \begin{array}{l} \left[\frac{Jzm+h}{[(Jzm+h)^2+\Omega^2]^{\frac{1}{2}}}\right] tanh\left(\frac{\beta[(Jzm+h)^2+\Omega^2]^{\frac{1}{2}}}{2}\right) \\ +\left[\frac{Jzm-h}{[(Jzm-h)^2+\Omega^2]^{1/2}}\right] tanh\left(\frac{\beta[(Jzm-h)^2+\Omega^2]^{1/2}}{2}\right) \end{array} \right\}, \quad (3.141)$$

ifadesi ile verilir. Sisteme ait olan hal denkleminin dış manyetik alan h'ya göre türevini alarak mıknatıslanmanın manyetik alan (h) ile değişimini buluruz.

$$\chi = \lim_{h\to 0} \frac{\partial m_z}{\partial h} \quad (3.142)$$

Şekil 3.34'de modelin denge alınganlığının enine alan varlığı altında elde edilen sıcaklıkla değişimi verilmiştir. Beklendiği üzere kritik nokta yakınlarında denge alınganlığında tekillik gözlemlenmiştir.



Şekil 3.34 Boyuna dış manyetik alanın sıfır olduğu ve sabit enine alan etkisi altındaki kritik nokta yakınında denge alınganlığının sıcaklıkla değişimi

Şimdi yukarıda elde edilen durulma zamanını kullanarak dinamik alınganlık ifadelerini elde edeceğiz. Bu incelemeyi yapabilmek için sisteme ω açısal frekansına sahip sürekli bir salınımlı alan uygulandığı kabul edilir. Bu formülasyon altında kinetik denklemlerin elde edilmesi için sistemin kararlı (stasyonel) hale eriştiği kabul edilir. Bu durumda:

$$(H - H_0) = H_1 e^{i\omega t}, \tag{3.143}$$

iken

$$(m_z - m_{z0}) = m_{z1} e^{i\omega t}, \tag{3.144}$$

olur. Son olarak denklem (3.138) ile verilen kinetik denklem çözüldüğünde hal denklemi:

$$m_z(t) - m_{z\infty} = \chi(\omega) H_1 e^{i\omega t}, \tag{3.145}$$

şeklinde elde edilir. Denklem (3.145) kullanıldığında dinamik alınganlık:

$$\chi = \frac{LB\tau}{1 + i\omega\tau}. \tag{3.146}$$

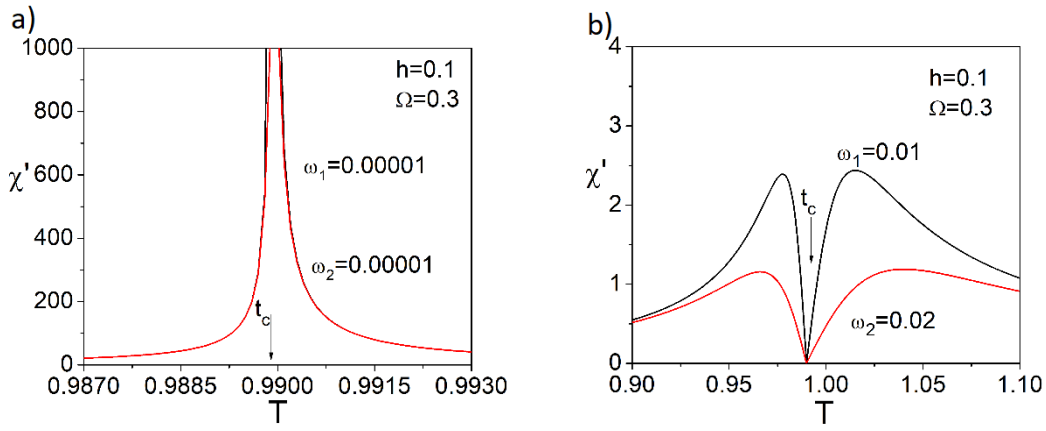
$$\chi(\omega) = \chi'(\omega) - i\chi''(\omega). \tag{3.147}$$

formunda elde edilir. Dinamik alınganlık karmaşık bir fonksiyondur. Dinamik alınganlığın reel ve imajiner kısımları:

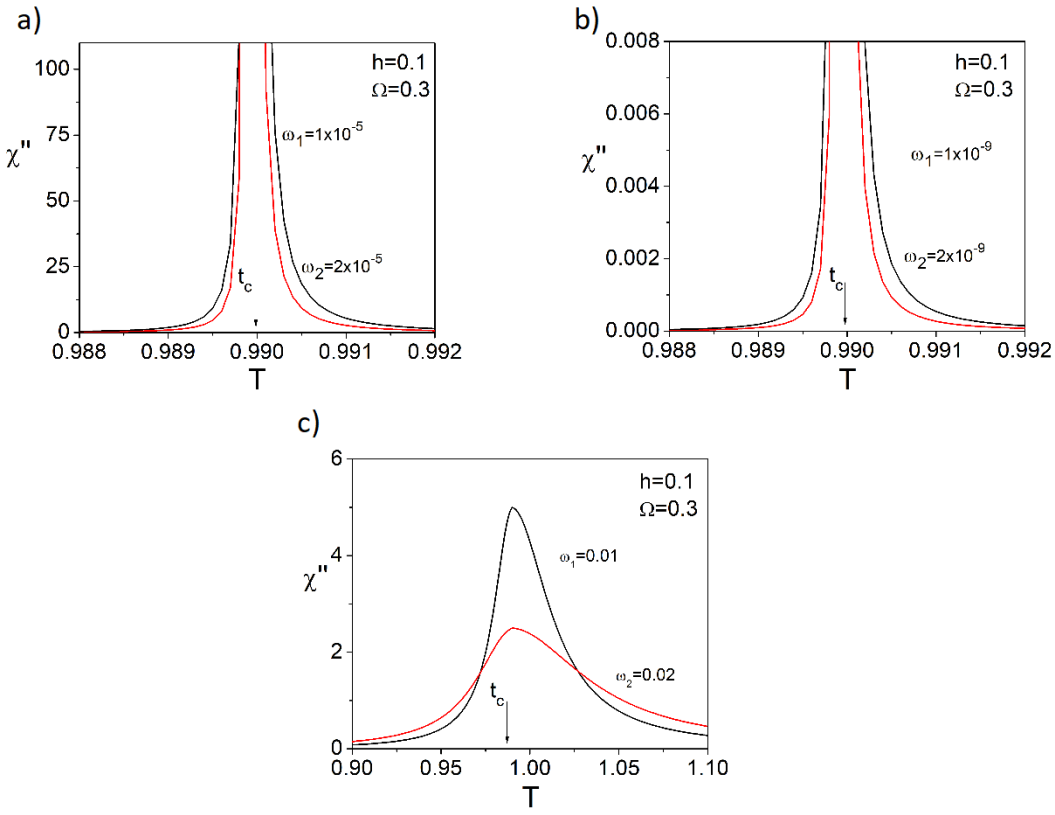
$$\chi' = \frac{LB\tau}{1 + \omega^2\tau^2}. \tag{3.148}$$

$$\chi'' = \frac{LB\tau^2\omega}{1 + \omega^2\tau^2}. \tag{3.149}$$

şeklindedir.



Şekil 3.35 Manyetik dispersiyon katsayısının a) düşük frekans, b) yüksek frekans bölgesindeki sıcaklık davranışı



Şekil 3.36 Rastgele EAI modeline ait manyetik absorpsiyon katsayısının a) düşük frekans, b) çok düşük c) yüksek frekans aralığı için sıcaklıkla değişimi

Yukarıdaki şekil 3.35 ve şekil 3.36'de rastgele EAI modelinin dinamik alınganlığının düşük frekans ($\omega\tau \ll 1$) ve yüksek frekans ($\omega\tau > 1$) rejimleri şekillerde verilmiştir. Beklendiği üzere düşük frekanslarda dinamik alınganlığın gerçel kısmı

denge dinamik alınganlığa dönüşür ve kritik nokta yakınında ıraksar sanal kısım ise aynı limitte sıfıra gider. Şekil 3.35 (a) ve Şekil 3.36 (a) ve (b) deki sonuçlar bu beklenti ile uyumludur: Manyetik dispersiyon katsayısı $T \to Tc$ iken ıraksama eğilimi göstermektedir. Manyetik absorpsiyon katsayısı da termal kritik nokta yakınında hızlıca artış sergiler ancak $\omega \to 0$ limitinde sıfıra gitme eğilimindedir. Yüksek frekans davranışı Şekil 3.35 (b)'de verilen dispersiyon katsayısı kritik noktada sıfıra gitmektedir. Son olarak manyetik absorpsiyon katsayısının yüksek frekanslarda kritik noktada tekillik sergilemeyip maksimum yaptığı ve tepe genliğinin artan frekansla azaldığı Şekil 3.36 (c)'de açıkça görülmektedir.

BÖLÜM DÖRT

ÖZET VE SONUÇ

Bu tez çalışmasında termal ve kuantum faz geçişleri sergileyen spin-S enine alan Ising modeli ve S=1/2 özel halinin iki varyasyonunun denge manyetik özellikleri ortalama alan yaklaşımı altında incelenmiştir. Bu amaçla spin-S enine alan Ising modelinin serbest enerjisini veren ifade ortalama alan yaklaşımı ve Bogliubov varyasyonel ilkesini birleştiren bir yöntemle türetildi. Aynı analiz ile rastgele boyuna alan etkisi altındaki ve metamanyetik özellik sergileyen spin-1/2 enine alan Ising modellerinin faz eğrileri elde edildi.

Bir sonraki adımda bu sistemlerin sonlu sıcaklık termodinamik geometrik özellikleri termal faz geçişlerinin varlığında detaylıca incelendi. Rastgele boyuna dış manyetik alan etkisindeki spin-1/2 enine Ising modelinin sıcaklık ve mıknatıslanmadan oluşan iki boyutlu alt manifold için termodinamik eğriliği Ruppeiner metriği ile elde edildi ve sıcaklık ve dış alan ile değişimi çalışıldı. Metamanyetik spin-1/2 enine Ising modellinin metriği tanımlanırken ise sekmeli ve toplam mıknatıslanlardan oluşan iki boyutlu termodinamik koordinat sisteminden yararlanıldı. Her iki sistem için Ricci skalerinin termal faz geçişleri komşuluğundaki sıcaklık ve alan davranışları kapsamlıca incelendi. Literatürdeki çalışmalarla uyumlu olarak Riemann geometrisini kullanarak elde ettiğimiz termodinamik eğriliklerin faz geçişi noktalarında ıraksama yaptığı görülmüştür (Keleş vd., 2023, Sunnetci vd., 2023).

Son olarak ortalama alan yaklaşımı altındaki rastgele enine alan Ising modelinin termal kritik manyetik durulması denge istatistik mekaniğini doğrusal yanıt kuramı ile birleştiren bir yaklaşımla ele alındı. İlk olarak sıcaklığın bir fonksiyonu olarak denge alınganlık ifadesi elde edilerek sıcaklığa göre değişimi incelenmiş olup, literatürdeki çalışmalara uygun ortalama alan yaklaşımı altında faz geçişi noktasında ıraksama

gerçekleşmiştir. Literaturdeki çalışmalarla uyumlu olarak düşük frekanslarda dinamik alınganlık denge dinamik alınganlığa dönüştü. Yüksek frekanslarda ise kritik noktada alınganlığın reel kısmı sonlu değerler aldı.

Sonuç olarak enine alan Ising modelleri kuantum faz geçişleri ve termal faz geçişleri sergileyen ve termodinamik geometrik özellikleri açısından zengin ve ilgi çekici bir sistemlerdir. Bu nedenle bu tez çalışmasının teorik ve deneysel yeni çalışmalara ilham verebileceğini umuyoruz.

KAYNAKLAR

Acharyya, M., Chakrabarti, B. K., & Stinchcombe, R. B. (1994). Hysteresis in Ising model in transverse field. Journal of Physics A: Mathematical and General, 27(5), 1533.

Aharony, A.,& Binder, K. (1980). Low-concentration series expansions for dilute spin glasses at zero temperature. Journal of Physics C: Solid State Physics, 13(21), 4091.

Alata N.,& Erdem R., (2021). Geometrical Aspects of the Multicritical Phase Diagrams for the Blume-Emery-Griffiths Model. The 46th Conference of the Middle European Cooperation in Statical Physics (pp.79). Riga, Latvia

Alata, N., Erdem, R., & Gülpınar, G. (2023). Geometrical aspects of the multicritical phase diagrams for the Blume–Emery–Griffiths model. *The European Physical Journal Plus*, *138*(5), 428.

Belanger, D. P.,& Young, A. P. (1991). The random field Ising model. Journal of magnetism and magnetic materials, 100(1-3), 272-291.

Benayad, N., Zerhouni, R., & Klümper, A. (1998). Mixed spin transverse Ising model with longitudinal random crystal field interactions. The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems, 5, 687-695.

Bitko, D., Rosenbaum, T. F., & Aeppli, G. (1996). Quantum critical behavior for a model magnet. Physical review letters, 77(5), 940.

Blinc, R. (1960). On the isotopic effects in the ferroelectric behaviour of crystals with short hydrogen bonds. Journal of Physics and Chemistry of Solids, 13(3-4), 204-211.

Boesen E. L. (2019), Quantum Criticality The transverse field Ising model Lisans Tezi, Kobenhavns Univesitat

Boughrara, M., Kerouad, M., & Saber, M. (2011). The Effect of the Transverse Crystal Field on the Magnetic Properties of the Spin 3/2 Blume-Emery-Griffiths Model. Chinese Journal of Physics, 49(2), 672-683.

Carvalho, D. C.,& Plascak, J. A. (2015). Spin-1 Blume–Capel model in a transverse crystal field: An improved variational approach. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 432, 240-256.

Chaluvadi, S. K., Ajejas, F., Orgiani, P., Rousseau, O., Vinai, G., Petrov, A. Y., ... & Mechin, L. (2018). Room temperature biaxial magnetic anisotropy in La0. 67Sr0. 33MnO3 thin films on SrTiO3 buffered MgO (001) substrates for spintronic applications. Applied Physics Letters, 113(5), 052403.

Costabile, E., Viana, J. R., de Sousa, J. R., & de Arruda, A. S. (2015). First-order transition and tricritical behavior of the transverse crystal field spin-1 Ising model. Solid State Communications, 212, 30-34.

D.A. do Nascimento, D. A., Pacobahyba, J. T., Neto, M. A., Salmon, O. D. R., & Plascak, J. A. (2017). Multicritical behavior of the two-dimensional transverse Ising metamagnet in a longitudinal magnetic field. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 474, 224-229.

D.A. do Nascimento, M.A. Neto, J. Ricardo de Sousa, J.T. Pacobahyba, (2012)J. Magn. Magn. Mater. 324 2429.

De Gennes, P. G. (1963). Collective motions of hydrogen bonds. Solid State Communications, 1(6), 132-137.

de Sousa, J. R.,& Branco, N. S. (2008). Variational-method study of the spin-1 Ising model with biaxial crystal-field anisotropy. Physical Review E, 77(1), 012104.

De Wit, H., Witmer, C., & Dirne, F. (1987). Induced anisotropy of amorphous CoFeSiB and CoNbZr magnetic materials. IEEE transactions on magnetics, 23(5), 2123-2127.

Dutta, A., & Bhattacharjee, J. K. (2001). Phase transitions in the quantum Ising and rotor models with a long-range interaction. *Physical Review B, 64*(18), 184106.

Dutta, A., Chakrabarti, B. K., & Stinchcombe, R. B. (1996). Phase transitions in the random field Ising model in the presence of a transverse field. Journal of Physics A: Mathematical and General, 29(17), 5285.

Dziarmaga, J. (2005). Dynamics of a quantum phase transition: Exact solution of the quantum Ising model. Physical review letters, 95(24), 245701.

Eddeqaqi, N. C., Saber, M., El-Atri, A., & Kerouad, M. (1999). Phase diagram of spin-1 Ising model in a transverse crystal field. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 272(1-2), 144-152.

Elliott, R. J., Pfeuty, P., & Wood, C. (1970). Ising model with a transverse field. Physical Review Letters, 25(7), 443.

Erdem, R. (2018, November). Riemannian geometry of Ising model in the bethe approximation. In Journal of Physics: Conference Series (Vol. 1132, No. 1, p. 012028). IOP Publishing.

Erdem, R. (2019). Thermodynamic geometry of Ising ferromagnet in an external magnetic field: A self-consistent field theory calculation. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 526, 121173.

Erdem, R. (2022). Geometrical description of the state space in spin crossover solids with high-spin low-spin degree of freedom. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 598, 127335.

Erdem, R. (2023). Mean and Gaussian curvatures of equilibrium states for a spin-1 Ising system: existence of minimal surface in the paramagnetic solutions. The European Physical Journal Plus, 138(4), 1-7.

Erdem, R., Özüm, S., & Güçlü, N. (2023). Slow and fast relaxation times of quantum lattice model with local multi-well potentials: phenomenological dynamics for Sn $ _ {2} $ P $ _ {2} $ S $ _ {6} $ ferroelectric crystals. arXiv preprint arXiv:2301.01533.

Erdem, R.,& Alata, N. (2020). Ruppeiner geometry of isotropic Blume–Emery–Griffiths model. The European Physical Journal Plus, 135(11), 1-9.

Erdem. R., (2020). Quantum lattice model with local multi-well potentials: Riemannian geometric interpretation for the phase transitions in ferroelectric crystals. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 556, 124837.

Fisher, D. S. (1992). Random transverse field Ising spin chains. Physical review letters, 69(3), 534.

Fisher, D. S. (1995). Critical behavior of random transverse-field Ising spin chains. Physical review b, 51(10), 6411.

Fisher, M. E. (1963). Perpendicular susceptibility of the Ising model. Journal of Mathematical Physics, 4(1), 124-135.

Galam, S., Yokoi, C. S., & Salinas, S. R. (1998). Metamagnets in uniform and random fields. Physical Review B, 57(14), 8370.

Gülpınar, G.,& Berker, A. N. (2009). Quenched-vacancy induced spin-glass order. Physical Review E, 79(2), 021110.

Hertz, J. A. (1976). Quantum critical phenomena. Physical Review B, 14(3), 1165.

Hu, M. L. (2010). Creation of Quantum Entanglement in Spin-One Ising Model with Longitudinal and Transverse Crystal Fields. International Journal of Modern Physics B, 24(28), 5571-5577.

Hunt, A. W., Singer, P. M., Thurber, K. R., & Imai, T. (1999). C 63 u NQR Measurement of Stripe Order Parameter in La 2− x Sr x CuO 4. Physical review letters, 82(21), 4300.

Ising, E. (1925). Beitrag zur theorie des ferro-und paramagnetismus (Doctoral dissertation, Grefe & Tiedemann).

Janke, W., Johnston, D. A., & Kenna, R. (2003). Information geometry of the spherical model. Physical Review E, 67(4), 046106.

Janyszek, H.,& Mrugal, R. (1989). Riemannian geometry and the thermodynamics of model magnetic systems. Physical Review A, 39(12), 6515.

Jiang, W., Wei, G. Z., & Zhang, Z. D. (2003). Tricritical behavior and magnetic properties for a mixed spin-1 and spin-3 2 transverse Ising model with a crystal field. Physical Review B, 68(13), 134432.

Kamieniarz G. (1976) J. Phys. C: Solid St. Phys. 9 4003-9

Kaneyoshi, T., Jaščur, M., & Fittipaldi, I. P. (1993). Transverse Ising model with arbitrary spin. Physical Review B, 48(1), 250.

Kaneyoshi, T., Sarmento, E. F., & Fittipaldi, I. P. (1988). Magnetic properties of amorphous mixed Ising spin systems in a transverse field. Physical Review B, 38(4), 2649.

Katsura, S. (1962). Statistical mechanics of the anisotropic linear Heisenberg model. Physical Review, 127(5), 1508.

Keleş F., Sunnetci E., & Gulpinar G. (28 Nisan 2023). Thermodynamic geometric interpretation for the phase transitions in the mixed spin-1 and spin-2 Ising ferromagnetic system with different anisotropies. İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü X. Yoğun Madde Fiziği İzmir Toplantısı

Kincaid, J. M.,& Cohen, E. G. D. (1974). Variation of the critical behavior in metamagnets. Physics Letters A, 50(5), 317-318.

Kogut, J. B. (1979). An introduction to lattice gauge theory and spin systems. Reviews of Modern Physics, 51(4), 659.

Kple, J., Hontinfinde, F., & Albayrak, E. (2021). Random transverse crystal-field effects on the magnetic properties of the spin-3⁄2 Blume–Capel model. Physica B: Condensed Matter, 619, 413234.

Lacková, S., Horiguchi, T., & Jaščur, M. (2003). Exact results of a mixed spin-12 and spin-S transverse Ising model with two-and four-spin interactions on the honeycomb lattice. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 326(1-2), 189-202.

Lebowitz, J. L.,& Penrose, O. (1966). Rigorous treatment of the Van Der Waals-Maxwell theory of the liquid-vapor transition. *Journal of Mathematical Physics*, *7*(1), 98-113.

Liang, Y. Q., Wei, G. Z., & Zhang, Z. D. (2008). Effect of the transverse field on the site-diluted Ising model in a longitudinal random field. Journal of magnetism and magnetic materials, 320(10), 1680-1686.

Meijer, P. H., Keskin, M., & Bodegom, E. (1986). A simple model for the dynamics towards metastable states. Journal of statistical physics, 45, 215-232.

Moreira, A. F. S., Figueiredo, W., & Henriques, V. B. (2002). Compressible metamagnetic Ising model: Mean-field Curie-Weiss approach and Landau expansion. Physical Review B, 66(22), 224425.

Nakamura, T. (2022). Scalar Curvature of the Quantum Exponential Family for the Transverse-Field Ising Model and the Quantum Phase Transition. *arXiv preprint arXiv:2212.12919*.

Nakamura, T. (2023). Monotonicity of the Scalar Curvature of the Quantum Exponential Family for Transverse-Field Ising Chains. *arXiv preprint arXiv:2303.12008*.

Oitmaa J and Coombs G J (1981) J. Phgs. C: Solid Stare Phys. 14 143-55

Onsager, L. (1944). Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition. Physical Review, 65(3-4), 117.

Ovchinnikov, A. A., Dmitriev, D. V., Krivnov, V. Y., & Cheranovskii, V. O. (2003). Antiferromagnetic Ising chain in a mixed transverse and longitudinal magnetic field. Physical review B, 68(21), 214406.

Pfeuty, P. (1970). The one-dimensional Ising model with a transverse field. ANNALS of Physics, 57(1), 79-90.

Pleimling, M.,& Selke, W. (1997). Anomalies in the antiferromagnetic phase of the metamagnet FeBr 2. Physical Review B, 56(14), 8855.

Pustogow, A., Rösslhuber, R., Tan, Y., Uykur, E., Böhme, A., Wenzel, M., ... & Dressel, M. (2021). Low-temperature dielectric anomaly arising from electronic phase separation at the Mott insulator-metal transition. npj Quantum Materials, 6(1), 9.

R. Blinc & B. Zeks. (2006). Dynamics of order-disorder-type ferroelectrics and anti-ferroelectrics. S.704

Roberto Viana, J., Rodriguez Salmon, O. D., Neto, M. A., & Carvalho, D. C. (2018). A new effective correlation mean-field theory for the ferromagnetic spin-1 Blume–Capel model in a transverse crystal field. International Journal of Modern Physics B, 32(04), 1850038.

Ruppeiner, G. (1995). Riemannian geometry in thermodynamic fluctuation theory. Reviews of Modern Physics, 67(3), 605.

Ruppeiner, G. (2012). Thermodynamic curvature from the critical point to the triple point. Physical Review E, 86(2), 021130.

Ruppeiner, G.,& Davis, C. (1990). Thermodynamic curvature of the multicomponent ideal gas. Physical Review A, 41(4), 2200.

Sá Barreto, F. C., Fittipaldi, I. P., & Zeks, B. (1981). New effective field theory for the transverse Ising model. Ferroelectrics, 39(1), 1103-1106.

SáBarreto, F. C.,& Fittipaldi, I. P. (1985). Thermodynamical properties of the transverse Ising model. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 129(2), 360-373.

Saber, M.,& Tucker, J. W. (1991). The site-diluted spin-1 transverse Ising model. Journal of magnetism and magnetic materials, 102(3), 287-296.

Sachdev, S. (1999). Quantum phase transitions. Physics world, 12(4), 33.

Sanwari, R.,& Sahay, A. (2022a). Thermodynamic geometry of spin-one lattice models. I. Spin and quadrupolar orders and critical scaling functions in one dimension. Physical Review E, 105(3), 034134.

Sanwari, R.,& Sahay, A. (2022b). Thermodynamic geometry of spin-one lattice models. II. Criticality and coexistence in the mean-field approximation. Physical Review E, 105(3), 034135.

Saxena, V. K. (1982). Tricritical line in a transverse Ising model with random local fields. Physics Letters A, 90(1-2), 71-73.

Saxena, V. K. (1983). Phase diagram of spin-S Ising model in a random magnetic field. Solid State Communications, 45(2), 93-94.

Selke, W. (1996). Anomalies in Ising metamagnets. Zeitschrift für Physik B Condensed Matter, 101(1), 145-150.

Stinchcombe, R. B. (1973). Ising model in a transverse field. i. basic theory. Journal of Physics C: Solid State Physics, 6(15), 2459.

Strečka, J.,& Jaščur, M. (2004). Effect of uniaxial and biaxial crystal-field potential on magnetic properties of a mixed spin-1 2 and spin-1 Ising model on the honeycomb lattice. Physical Review B, 70(1), 014404.

Strečka, J.,& Jaščur, M. (2015). Acta Phys. Slovaca 65, 235. 032142-10

Sunnetci E., Keleş F. & Gulpinar G. (28 Nisan 2023). Rıemannıan Geometry Of Metamagnetic Isıng Model. İzmir Yüksek Teknoloji Enstitüsü X. Yoğun Madde Fiziği İzmir Toplantısı

Suran, G., Ounadjela, K., & Machizaud, F. (1986). Evidence for structure-related induced anisotropy in amorphous CoTi soft ferromagnetic thin films. Physical review letters, 57(24), 3109.

Tucker, J. W. (1993). Amorphization of the spin-1 transverse Ising ferromagnet. Journal of magnetism and magnetic materials, 119(1-2), 161-166.

Vojta M. (2015), Thermal and Quantum Phase Transitions, TU Dresden

Wang, Y. L.,& Kimel, J. D. (1991). Multicritical behavior in the antiferromagnetic Blume–Capel model. Journal of applied physics, 69(8), 6176-6178.

Weiss, P. (1906). La variation du ferromagnétisme avec la température. Comptes Rendus, 143, 1136-1139.

Weiss, P. (1907). C. R. H. Acad. Sci. 143, 1137 (1906). J. Phys. Paris, 6, 666.

Wen, L.,& Shi-Lei, Y. (2011). Critical properties of a random transverse crystal field Ising model with bond dilution. Open Physics, 9(4), 1084-1089.

Wolf, W. P. (2000). The Ising model and real magnetic materials. Brazilian Journal of Physics, 30, 794-810.

Yang, C. Z.,& Zhong, J. L. (1989). The Site-Bond Diluted Transverse Ising Model with S= 1. physica status solidi (b), 153(1), 323-329.

Yokota, T.,& Sugiyama, Y. (1988). Reentrant phase transitions in a quantum spin system with random fields. Physical Review B, 37(10), 5657.

Zanardi, P., Giorda, P., & Cozzini, M. (2007a). Information-theoretic differential geometry of quantum phase transitions. *Physical review letters*, *99*(10), 100603.

Zanardi, P., Venuti, L. C., & Giorda, P. (2007b). Bures metric over thermal state manifolds and quantum criticality. *Physical Review A*, *76*(6), 062318.

Žukovič, M.,& Idogaki, T. (2000). Monte Carlo investigation of the tricritical point stability in a three-dimensional Ising metamagnet. Physical Review B, 61(1), 50.

Žukovič, M.,& Idogaki, T. (2000). Monte Carlo studies of critical and dynamic phenomena in diluted Ising metamagnet in a field. Journal of magnetism and magnetic materials, 208(1-2), 120-130.