T.C. AKDENİZ ÜNİVERSİTESİ



# SPİN-1 BLUME-EMERY-GRIFFITHS MODELİNİN RIEMANN GEOMETRİSİ ÇERÇEVESİNDE İNCELENMESİ

Nigar ALATA

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

FİZİK ANABİLİM DALI

DOKTORA TEZİ

HAZİRAN 2022 ANTALYA T.C. AKDENİZ ÜNİVERSİTESİ



# SPİN-1 BLUME-EMERY-GRIFFITHS MODELİNİN RIEMANN GEOMETRİSİ ÇERÇEVESİNDE İNCELENMESİ

Nigar ALATA

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

FİZİK ANABİLİM DALI

DOKTORA TEZİ

HAZİRAN 2022 ANTALYA

# T.C. AKDENİZ ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

## SPİN-1 BLUME-EMERY-GRIFFITHS MODELİNİN RIEMANN GEOMETRİSİ ÇERÇEVESİNDE İNCELENMESİ

Nigar ALATA

FİZİK ANABİLİM DALI

**DOKTORA TEZİ** 

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

Prof. Dr. Rıza ERDEM (Danışman) Prof. Dr. Mustafa KESKİN Prof. Dr. Abdullah KAPLAN Doç. Dr. Simten BAYRAKÇI DOĞAN Doç. Dr. Yusuf KÜÇÜKAKÇA

He Kestin

### SPİN-1 BLUME-EMERY-GRIFFITHS MODELİNİN RIEMANN GEOMETRİSİ ÇERÇEVESİNDE İNCELENMESİ

**Nigar ALATA** 

Doktora Tezi, Fizik Anabilim Dalı Danışman: Prof. Dr. Rıza ERDEM

Haziran 2022; 69 sayfa

Denge istatistik teori ve Riemann metrik geometrisi birleştirilmek suretiyle elde edilen bir metotla izotropik ve anizotropik spin-1 Blume-Emery-Griffiths (BEG) modelleri için termodinamik eğrilik ya da Ricci skalerinin (R) özellikleri araştırıldı. İki boyutlu dipolar ve kuadrupolar düzen parametreli faz uzayında bir Ruppeiner metriği tanımlandı. R için bir ifade türetilerek, R'nin farklı çiftlenim oran sabitleri ( $\alpha$ , r) için indirgenmiş sıcaklığa ( $\theta$ ) ve indirgenmiş kristal alana (d) göre değişimleri özellikle birinci- ve ikinciderece faz geçişleri ve kritik/üçlü-kritik/çoklu-kritik noktalar yakınlarındaki davranışları nümerik olarak incelendi. R, ikinci-derece faz geçişine ve üçlü kritik noktaya yaklaşılırken + $\infty$ 'a ıraksamaktadır. Bu sonuçlar en düşük yaklaşımlı ortalama alan Ising modeli ve çoklu-kuyu potansiyelli kuantum örgü modeli sonuçları ile uyumludur. Son olarak, kritik/çoklu-kritik topolojiyi içeren geometrik faz diyagramları izotropik ve anizotropik spin-1 BEG modelleri için sırasıyla ( $\theta$ ,  $\alpha$ ) ve (d,  $\theta$ ) düzlemlerinde sunulmuştur.

**ANAHTAR KELİMELER:** Blume-Emery-Griffiths modeli, Geometrik faz diyagramları, Ricci skaleri, Riemann geometrisi, Ruppeiner metriği, Termodinamik eğrilik.

JÜRİ: Prof. Dr. Rıza ERDEM

Prof. Dr. Mustafa KESKİN Prof. Dr. Abdullah KAPLAN Doç. Dr. Simten BAYRAKÇI DOĞAN Doç. Dr. Yusuf KÜÇÜKAKÇA

#### ABSTRACT

## INVESTIGATION OF SPIN-1 BLUME-EMERY-GRIFFITHS MODEL IN THE FRAMEWORK OF RIEMANNIAN GEOMETRY

Nigar ALATA

PhD Thesis in PHYSICS Supervisor: Prof. Dr. Rıza ERDEM June 2022; 69 pages

A method combining statistical equilibrium theory and Riemannian metric geometry is used to investigate the properties of thermodynamic curvature or Ricci scalar (R) for the isotropic and anisotropic spin-1 Blume-Emery-Griffiths (BEG) models. A Ruppeiner metric is introduced on the two-dimensional phase space of dipolar and quadrupolar order parameters. An expression is derived for R and its variation as a function of reduced temperature ( $\theta$ ) and reduced cyrstal field (d) for various coupling ratio ( $\alpha, r$ ) particularly its behaviors near the first-order and second-order phase transitions and critical/tricritical/multicritical points is examined numerically. R tends towards plus infinity while approaching the second-order phase transition and tricritical point. These results fit well with those in the mean-field Ising model in the lowest order approximation and quantum lattice model with multi-well potentials. Finally, geometric phase diagrams, including critical/multicritical topology, are presented in the ( $\theta, \alpha$ ) and ( $d, \theta$ ) planes for isotropic and anisotropic spin-1 BEG models, respectively.

**KEYWORDS:** Blume-Emery-Griffiths model, Geometric phase diagrams, Ricci scalar, Riemanniann geometry, Ruppeiner metric, Thermodynamic curvature.

COMMITTEE: Prof. Dr. Rıza ERDEM

Prof. Dr. Mustafa KESKİN Prof. Dr. Abdullah KAPLAN Assoc. Prof. Dr. Simten BAYRAKÇI DOĞAN Assoc. Prof. Dr. Yusuf KÜÇÜKAKÇA

#### ÖNSÖZ

Öncelikle doktora tez çalışmam boyunca tecrübesiyle ve birikimleriyle beni yönlendiren ve desteklerini esirgemeyen değerli danışman hocam Sayın Prof. Dr. Rıza ERDEM'e teşekkürü bir borç bilirim. Çalışmalarım sırasında bilgi ve yardımlarıyla bana büyük destek sağlayan değerli hocam Prof. Dr. Gül GÜLPINAR'a ve doktora eğitimimin her aşamasında desteğini yanımda hissettiğim değerli hocam Doç. Dr. Ramazan ŞAHİN'e teşekkür ederim.

Ayrıca bugüne kadar dualarını hiçbir zaman eksik etmeyen aileme ve bana her konuda destek veren, doktora öğrenimim süresince sabır ve anlayışını benden esirgemeyen sevgili eşim Osman ALATA'ya teşekkür ederim.

Çalışmalarım boyunca benden sabırlarını esirgemeyen, beni anlayışla karşılayan oğlum Ali Kerem ALATA ve kızım Elif Duru ALATA'ya ithafen...

# İÇİNDEKİLER

ÖZETi
ABSTRACTii
ÖNSÖZiii
AKADEMİK BEYANv
SİMGELER VE KISALTMALARvi
ŞEKİLLER DİZİNİviii
ÇİZELGELER DİZİNİx
1. GİRİŞ1
2. KAYNAK TARAMASI
2.1. Spin-1 Blume-Emery-Griffiths Modeli ve Özellikleri Üzerine Yapılan Çalışmalar
2.2. Riemann Geometrisinin Termodinamikteki Uygulama Alanları Üzerine Yapılan Çalışmalar11
3. MATERYAL VE METOT14
3.1. Modelin Tanımı, Denge Özellikleri ve Faz Geçişleri14
3.2. Riemann Geometrisi25
3.2.1. Riemann geometrisinin doğuşu ve gelişimi25
3.2.2. Riemann geometrisinin termodinamiğe uyarlanması ve termodinamik eğrilik kavramının ortaya çıkışı
4. BULGULAR VE TARTIŞMA
4.1. Spin-1 BEG Sistemleri İçin Termodinamik Parametre Uzayı Seçimi ve Metrik Yazılması
4.2. İzotropik BEG Modeli İçin Ricci Skalerinin Türetilmesi ve Geometrik Faz Diyagramı
4.3. BEG Modeli İçin Ricci Skalerinin Türetilmesi ve Çoklu Kritik Faz Diyagramlarının Geometrik Görünümü46
5. SONUÇLAR
6. KAYNAKLAR
ÖZGEÇMİŞ

### AKADEMİK BEYAN

Doktora Tezi olarak sunduğum "Spin-1 Blume-Emery-Griffiths Modelinin Riemann Geometrisi Çerçevesinde İncelenmesi" adlı bu çalışmanın, akademik kurallar ve etik değerlere uygun olarak bulunduğunu belirtir, bu tez çalışmasında bana ait olmayan tüm bilgilerin kaynağını gösterdiğimi beyan ederim.

16/06/2022 Nigar ALATA

#### SİMGELER VE KISALTMALAR

#### Simgeler:

- $\mathcal{H}$  : Hamiltonyen
- $\mathcal{N}$  : Örgü noktası sayısı veya spin sayısı
- $S_i$  : Spin değişkeni
- *J* : Bilineer etkileşme sabiti
- *K* : Bikuadratik etkileşme sabiti
- *L* : Dipolar-kuadrupolar etkileşme sabiti
- *H* : Dış manyetik alan
- *h* : İndirgenmiş manyetik alan
- *D* : Kristal alan sabiti
- *d* : İndirgenmiş kristal alan
- *T* : Mutlak sıcaklık
- $\theta$  : İndirgenmiş sıcaklık
- U : İç enerji
- *e* : Spin başına iç enerji
- S : Entropi
- $\sigma$  : Spin başına entropi
- *m* : Dipolar düzen parametresi
- *q* : Kuadrupolar düzen parametresi
- $k_B$  : Boltzman sabiti
- $\mathcal{G}$  : Gibbs enerji fonksiyoneli
- $\mathcal{M}$  : Manifold
- $G_{ij}$  : Kovaryant metrik tensör bileşenleri
- $G^{ij}$ : Kontravaryant metrik tensör bileşenleri
- $\Gamma^i_{jk}$  : Christoffel sembolleri
- $R^i_{ikl}$  : Riemann tensörü
- $R_{ij}$  : Ricci tensörü
- *R* : Ricci skaleri veya termodinamik eğrilik
- $\mathcal{D}$  : Örgü boyutu

### Kısaltmalar:

BEG	: Blume-Emery-Griffiths
IBEG	: İzotropik Blume-Emery-Griffiths
BC	: Blume-Capel
RG	: Renormalizasyon Grup
MC	: Monte Carlo
EFT	: Etkin Alan Teorisi
MFA	: Ortalama Alan Yaklaşımı
CVM	: Kümesel Değişim Metodu
LACVM	: Kümesel Değişim Metodunun En Düşük Yaklaşımı
PAVCM	: Kümesel Değişim Metodunun Çift Yaklaşımı
TMM	: Transfer Matris Metodu
LCA	: Lineer Zincir Yaklaşımı
PPM	: Yol Olasılık Metodu
ORT	: Tersinmez Termodinamiğin Onsager Teorisi
GD	: Glauber Dinamiği
С	: Dış Kritik Nokta
$\mathbf{C}'$	: İç Kritik Nokta
ТСР	: Üçlü Kritik Nokta
ТР	: Üçlü Nokta
CEP	: Kritik Son Nokta
Ζ	: Sıfır-Sıcaklık Kritik Noktası
F	: Ferromanyetik Faz
Р	: Paramanyetik Faz
Q	: Kuadrupolar Faz

GFD : Geometrik Faz Diyagramı

# ŞEKİLLER DİZİNİ

<b>Şekil 3.1.</b> IBEG modeli için dış manyetik alan varlığında $(h \neq 0)$ ve yokluğunda $(h=0)$ farklı $\alpha$ değerleri kullanılarak elde edilen düzen parametrelerinin $(m, q)$ indirgenmiş sıcaklık $\theta$ 'ya göre değişimi. Düşey noktalı çizgiler faz geçiş sıcaklıklarını gösterir	17
Şekil 3.2. IBEG modeli için dış manyetik alan yokluğunda ( $h = 0$ ) $\alpha = 0.25$ kullanılarak elde edilen <i>m</i> ve <i>q</i> 'nun $\theta$ 'ya göre değişimi. Düşey noktalı çizgi birinci- derece faz geçiş sıcaklığını gösterir	18
Şekil 3.3. IBEG sisteminin ( $\theta$ , $\alpha$ ) düzlemindeki faz diyagramı. Noktalı ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçişine karşılık gelmektedir. Siyah nokta üçlü kritik nokta TCP'yi göstermektedir	19
Şekil 3.4. BEG modelinde $h = 0$ ve $r = 3$ için $m$ ve $q$ 'nun farklı sıcaklıklarda $d$ 'ye göre değişimi. Düşey noktalı çizgiler faz geçişlerinin meydana geldiği $d$ değerlerini gösterir. (a) $\theta = 0.790$ , (b) $\theta = 0.777$	21
Şekil 3.5. BEG modelinde $h = 0$ ve $r = 3$ için (a), (b), (c) $m$ ve $q$ 'nun ve (d), (e), (f) serbest enerji $g$ 'nin farklı sıcaklık değerlerinde kristal alana $d$ 'ye göre değişimi. Düşey noktalı çizgiler faz geçişlerinin meydana geldiği $d$ değerlerini gösterir	22
Şekil 3.6. BEG modelinde $h = 0$ ve $r = 3$ iken farklı $\theta$ değerleri için $q$ düzen parametresinin kristal alan d'ye göre değişiminde Maxwell yapısı gösterimi. Kırmızı noktalı çizgiler (a) $\theta = 0.721$ ve (b) $\theta = 0.730$ değerleri için birinci-derece faz geçiş noktalarına (sırasıyla $d = 2.0, d = 2.007$ ); (c) $\theta = 0.750$ değeri için de birinci-derece faz geçişinin sonlandığı C dış kritik noktasına ( $d = 2.02$ ) karşılık gelmektedir. (a) ve (b) şekillerinde kırmızı noktalı çizginin sağ tarafındaki ve sol tarafındaki eğri alanları eşittir. Siyah noktalı çizgiler Maxwell sinüselinin maksimum ve minimum noktalarını gösterir. (c) şeklinde C dış kritik noktasında sinüsel görünüm kaybolmaktadır.	23
Şekil 3.7. BEG modelinin (a) $r = 3$ , (b) $r = -0.15$ , (c) $r = -0.5$ ve (d) $r = -1$ değerleri kullanılarak çizilen ( $d$ , $\theta$ ) düzlemindeki faz diyagramları. Noktalı ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci-derece ve ikinci-derece faz geçişine karşılık gelmektedir (Hoston ve Berker 1991a,b; Pawlak vd 2019)	24
<b>Şekil 4.1.</b> IBEG modelinde dış manyetik alan yokluğunda $(h = 0)$ ( <b>a</b> ) $\alpha \ge 2/3$ , ( <b>b</b> ) $1/3 \le \alpha < 2/3$ , ( <b>c</b> ) $\alpha < 1/3$ için Ricci skaleri <i>R</i> 'nin indirgenmiş sıcaklık $\theta$ 'ya göre değişimi. Düşey noktalı çizgiler faz geçiş sıcaklıklarına karşılık gelir. Yatay noktalı çizgiler $R = 0$ 'a karşılık gelir. ( <b>d</b> ) Sistemin ( $\theta$ , $\alpha$ ) düzlemindeki geometrik faz diyagramı. Mavi düz çizgi ikinci-derece faz geçiş çizgisini, mavi noktalı çizgiler birinci-derece faz geçiş çizgisini, kırmızı düz çizgi $R = 0$ çizgisini ve yeşil kesikli çizgi $R_M$ 'nin yerleşimini gösterir.	43

**Sekil 4.2.** IBEG modelinde (a) R'nin  $\theta$ 'ya göre  $h \neq 0$  olduğu durumda değişimi, (b) h = 0.05 için  $\alpha \ge 2/3$  seçilerek elde edilen  $R \cdot \theta$  eğrileri, (c)  $\alpha \ge 1/3$  için R = 0 (kesikli çizgiler),  $R_M$  (noktalı çizgiler) ve  $R_P$  (sürekli çizgiler) eğrilerinin ( $\theta$ , h) düzlemindeki yerleşimi, (d) h = 0.05 için ( $\theta$ ,  $\alpha$ ) düzlemindeki R = 0 (kırmızı düz **Şekil 4.3.** BEG modelinde (a)-(c) r = 3 iken farklı *d* değerleri için *R*'nin  $\theta$ 'ya göre değişimi ve (d)-(f) farklı  $\theta$  değerleri için R'nin d'ye göre değişimi. Düşey noktalı çizgiler faz geçiş noktalarına, R'nin işaret değiştirdiği sıcaklık değerlerine ve P2 Sekil 4.4. BEG modelinde (a)-(b) r = -0.5 iken farklı d değerleri için R'nin  $\theta$ 'ya göre değişimi ve (c)-(d) farklı  $\theta$  değerleri için R'nin d'ye göre değişimi. Düşey noktalı çizgiler faz geçiş noktalarına ve R'nin işaret değiştirdiği sıcaklık değerine Sekil 4.5. BEG modelinin (a) r = 3, (b) r = -0.15, (c) r = -0.5 ve (d) r = -1 değerleri için  $(d, \theta)$  düzleminde geometrik faz diyagramları. Mavi noktalı ve mavi sürekli çizgiler sırasıyla birinci-derece faz geçişi ve ikinci-derece faz geçişine karşılık gelir. Kırmızı sürekli çizgiler R = 0, yeşil kesikli çizgiler R'nin minimum ve yeşil sürekli 

# ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge	3.1.	Dört	farklı	<i>n</i> -boyutlu	termodinamik	koordinat	sisteminde	
termodir	namik	potansi	yel ve n	netrik tanımla	rı (Ruppeiner	1995)		33
<b>Çizelge 3.2.</b> Dört farklı iki-boyutlu termodinamik koordinat sisteminde potansiyel (serbest enerjiler) ve metrik bileşenleri (Ruppeiner 2012)								
Çizelge termodir	<b>4.1.</b> namik	Spin-1 potansi	BEG yel tanı	sistemlerinde, mı ve metrik y	iki-boyutlu /azılması	6 farklı ko	ordinat için	36
<b>Çizelge</b> Ruppein	<b>4.2.</b> er me	Spin-1 triği ve 1	BEG termodi	sistemlerinde. namik eğrilik	iki-boyutlu Türevler den	6 farklı ko ge durumları	ordinat için nda alınır	37

#### 1. GİRİŞ

Bilindiği üzere fiziksel kooperatif olayların termodinamik davranışlarının incelenmesi teknoloji ve temel bilimler açısından büyük önem taşımaktadır. Bu incelemeler deneysel olarak yapılmakla birlikte ilgili araştırmaları ilerletmeye yönelik birçok önemli ve etkili model geliştirilmiştir. Bu kapsamda ortaya çıkan modellerden olan spin sistemleri manyetizma probleminin vazgeçilmez konuları arasında bulunmaktadır. Spin sistemleri denilince akla ilk olarak fiziğin değişik alanlarında başarıyla kullanılan Ising modelleri ve onların çeşitli varyasyonları gelir. Özellikle istatistik fizik ve yoğun madde fiziği bu modellerin en fazla çalışıldığı alanlardır ve birçok değişik sistemin incelenmesinde oldukça etkilidir. İlgili modellerin ilki ve en basit olanı spin-1/2 Ising modeli iki durumlu (spin-yukarı ve spin-aşağı) ve tek düzen parametreli (mıknatıslanma veya dipol moment) bir sistem olup, ilk defa 1920'lerde Lenz'in doktora öğrencisi Ising tarafından ferromanyetizma problemi üzerinde çalışırken tanımlandı (Ising 1925). 1925'ten 1980'lere kadar yapılan çalışmalarda model kesin ya da yaklaşık çözüm metotları ve etkili simülasyon teknikleri kullanılarak analiz edildi ve birçok fiziksel olay bu model ile incelendi (Onsager 1944; Wannier 1945; Meijer ve Stamm 1978; Meijer vd 1986).

Diğer taraftan, çok daha karmaşık fiziksel olayların termodinamik özellikleri iki durumlu ve tek düzen parametreli spin-1/2 Ising modeli ile incelenemez. Bu durumda, ikiden fazla spin durumu ve birden fazla düzen parametresi ile tanımlanan spin modellerine ihtiyaç duyulur. Bu özellikteki modellere en iyi örnek spin-1 Ising sistemleridir. Söz konusu sistemler, ilk olarak Blume (1966) ve Capel (1966) tarafından birbirinden bağımsız olarak ortaya atıldı, daha sonra da Blume, Emery ve Griffiths tarafından sıvı  $He^3 - He^4$ karışımlarındaki faz ayrışmalarını açıklamak üzere geliştirildi (Blume vd 1971). Kısaca spin-1 Blume-Emery-Griffiths (BEG) modeli olarak da bilinen bu model bir spin-örgü sistemi olup, faz geçişlerinin sıklıkla gözlendiği manyetik alaşımlar (Bernasconi ve Rys 1971), akışkanlar (Lajzerowicz ve Sivardière 1975; Sivardière ve Lajzerowicz 1975a,b), yarıkararlı kristal alaşımlar (Newman ve Dow 1983) ve mikroemisyonlar (Schick ve Shih 1986) modelin ilk uygulandığı sistemler arasındadır. Diğer taraftan, faz diyagramlarındaki yeniden girilme olayları (Chakraborty 1988; Osório vd 1989; Fittipaldi ve Kaneyoshi 1989; Netz 1992; Buzano ve Pelizzola 1993) ve çoklu kritik faz diyagramları (Berker ve Wortis 1976; Bonfim ve Barreto 1985; Tanaka ve Kawabe 1985; Wang vd 1987; Hoston ve Berker 1991a,b; Buzano ve Pelizzola 1992; Netz ve Berker 1993; Falikov ve Berker 1996; Bakchich ve Bouziani 1997) BEG modelinin çözümlenmesi ile aydınlatıldı. Yapılan birçok çözümde de kararlı, yarı kararlı ve kararsız durumlar da elde edilerek denge faz diyagramları ile yarı kararlı faz diyagramları ortaya çıkarıldı (Keskin ve Özgan 1990; Keskin 1993; Keskin ve Arslan 1995; Temirci vd 1996; Keskin vd 1999; Keskin ve Ekiz 2000). İlerleyen yıllarda da BEG modelinin birçok yeni ve değişik varyasyonu ortaya atılarak, parçacıklar arası karşılıklı etkileşmelerin söz konusu olduğu birçok sahada fizik-çiler ve diğer bilim insanları için spin-1 Ising sistemleri bir modelleme aracı haline geldi (Bollé ve Verbeiren 2003; Benyoussef vd 2003; Boughazi vd 2014; Yalçın vd 2014; Ertaş ve Kantar 2015a,b; Velychko ve Stasyuk 2019; Erdem vd 2021).

Model ile ilgili kısaca bilgi verecek olursak; Spin-1 BEG modeli üç durumlu (spinyukarı, yönelimsiz, spin-aşağı) ve iki düzen parametreli (dipol moment ve kuadrupol moment) bir sistemdir. Bu sistemin Hamiltonyeni literatürde en genel hali ile şu şekilde verilmektedir:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - K \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 S_j^2 + D \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} S_i^2 - L \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j^2 - H \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} S_i.$$
(1.1)

Burada  $\mathcal{N}$  spin sayısını temsil eder ve etkileşimler spinlerin en yakın komşu çiftleri  $(\langle ij \rangle)$  arasındadır ve her bir örgü noktasına yerleşmiş olan spinler  $S_i = +1, 0, -1$  değerlerini almaktadır. Denklemdeki ilk terim *i* ve *j* örgü noktalarını işgal eden spinler arasındaki bilineer etkileşmeyi (*J*), ikinci terim bikuadratik etkileşmeyi (*K*), üçüncü terim kristal alan ya da tek iyon anizotropiyi (*D*), dördüncü terim dipolar-kuadrupolar etkileşmeyi (*L*), son terim ise dış manyetik alanı (*H*) ifade etmektedir. Dipol-dipol (ya da bilineer) etkileşmeli ve tek-iyon anizotropili (veya kristal alan) olan sistem genelde Blume-Capel (BC) modeli olarak adlandırılır. BC Hamiltonyenine kuadrupol-kuadrupol (yani bikuadratik) etkileşme eklenirse elde edilen yeni versiyon anizotropik Blume-Emery-Griffiths modeline dönüşür ve kısaca BEG modeli şeklinde bilinir (Blume vd 1971). Sadece bilineer ve bikuadratik etkileşme söz konusu olduğunda ise izotropik Blume-Emery-Griffiths (IBEG) modeli olarak isimlendirilir (Tucker 1988). Eşitlik (1.1)'e  $H_3 \sum_{< ij>} S_i S_j (S_i + S_j)$  şeklinde üçüncü dereceden manyetik pertürbasyon (*H*<sub>3</sub>) terimi de ilave edilebilir. Aynı Hamiltoneyende birinci, üçüncü ve beşinci terimler sırasıyla

 $\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij}S_iS_j$ ,  $\sum_{i=1} \Delta_i S_i^2$ ,  $\sum_{i=1} H_iS_i$  ile değiştirilebilir. Böyle bir durumda BEG modeli, sırasıyla rastgele bağ, rastgele kristal alan ve rastgele manyetik alan etkileşimli BEG modeli şeklinde değişik isimlerle anılır (Borelli ve Carneiro 1996).

Modelin tüm çeşitlerinin denge ve denge dışı (yani dinamik) davranışları istatistik mekanikte geliştirilen birçok teori, yaklaşım veya simülasyon tekniği ile incelenip sergiledikleri denge ve dinamik faz geçişleri detaylı olarak araştırıldı (Bununla ilgili literatür özeti gelecek bölümde verildi). Ancak, bu faz geçişlerinin "eğrilik skaleri" veya "Ricci skaleri" vasıtasıyla kapsamlı analizi yapılmadı. "Termodinamik eğrilik" adı da verilen bu matematiksel nicelik Euclid-dışı geometrilerden Riemann geometrisi çerçevesinde türetilmekte ve faz geçişlerinin geometrik açıdan incelenmesinde merkezi bir rolü bulunmaktadır (Janke vd 2002; Janke vd 2003; Janke vd 2004; Ruppeiner 2012; Mirza ve Talaei 2013; May vd 2013). Bilindiği gibi, Ricci skalerinin hesaplanmasında karşılaşılan matematiksel zorluklar nedeniyle, Ising sistemlerine ait parametre uzaylarının Riemann metriği ve bu metrik ile bulunan eğrilik skalerinin kritik nokta yakınlarındaki davranışları daha önce yapılan az sayıdaki çalışmada incelenebildi. Bu incelemeler başlangıçta daha basit bir spin sistemi olmasından dolayı bazı tek-boyutlu İsing zincirleri ve en düşük veya çift yaklaşımlı ortalama alan spin-1/2 Ising sistemi ile sınırlı kaldı (Janyszek ve Mrugała 1989; Ruppeiner 1995; Dey vd 2013; Ruppeiner ve Bellucci 2015; Erdem 2018a,b; 2019). Yakın zamanda da tek-boyutlu spin-1 örgü modelinin Riemann geometrisine dayalı incelenmesi transfer matris metodu ile elde edilen serbest enerji ifadesi kullanılarak yapıldı (Sanwari ve Sahay 2022a). Aynı inceleme, eş zamanlı olarak başka bir makalede ortalama alan BEG modeline genişletilerek iki-boyutlu (sıcaklık, manyetik alan) ve (sıcaklık, kristal alan) uzaylarının eğrilik skaleri üzerinde duruldu (Sanwari ve Sahay 2022b).

Bu tezde ise, spin-1 BEG ve IBEG sistemlerinde ortalama alan yaklaşımı altında daha önce gözlenen faz geçişleri ve ortaya çıkarılan faz diyagramları yukarıdaki iki çalışmadan farklı olarak iki-boyutlu düzen paramatresi uzayının termodinamik eğriliği yani Ricci skaleri (R) vasıtasıyla geometrik açıdan incelendi. Bunun için önce termodinamiğin Ruppeiner (1995) formalizmine uygun iki-boyutlu (mıknatıslanma, kuadrupol moment) termodinamik parametre uzayı (yani manifold,  $\mathcal{M}$ ) tanımlandı ve bu uzay için Gibbs enerji fonksiyoneli vasıtasıyla Riemann metriği belirlendi. Metrik tensör bileşenleri ve ikinci türevleri yardımıyla da sırasıyla Christoffel Sembolleri, Eğrilik Tensörü (veya Riemann tensörü) ve Ricci Tensörü hesaplandı. Son olarak, Ricci tensörü kullanılarak Riemann Eğrilik Skaleri veya *R* Ricci skaleri elde edildi. *R*'nin elde edilmesinden sonra, izotropik/anizotropik BEG modellerinde bu önemli matematiksel niceliğin sıcaklıkla ve kristal alanla ilişkisi, yani düzenli ve düzensiz faz bölgelerindeki değişimleri ile kritik ve çoklu kritik noktalar yakınlarındaki davranışı kapsamlıca araştırıldı. Ayrıca, kritik sıcaklık civarında sergilediği tekil davranışlar kritik üstel değeri hesaplanarak analiz edildi. Sonuçlar literatürde benzer sistemler için bulunan sonuçlarla karşılaştırılarak kritik üstel değerinin evrensel sınıfta yer alıp almadığı belirlendi.

Bu tez çalışmasının 2. Bölümünde, kaynak taraması yapılarak tezde kullanılan izotropik ve anizotropik BEG modeli ile ilgili günümüze kadar yapılmış olan önemli çalışmalar ve bu çalışmalarda kullanılan yöntemler, ayrıca tezde modele uygulanan "Riemann geometrisi" hakkında ayrıntılı literatür bilgisi verildi. 3. Bölümde; adı geçen modeller, bunların termodinamik özellikleri ve Riemann geometrisi kısaca tanıtıldı. 4. Bölümde tezde elde edilen bulgulara ve bunların benzer çalışmalarla karşılaştırılmasına yer verildi. Tezin son kısmında ise ortaya çıkan sonuçlar özetlenerek gelecekte konu ile ilgili yapılabilecek başka çalışmalar hakkındaki düşünceler sıralandı.

#### 2. KAYNAK TARAMASI

Bu bölümde, Blume-Emery-Griffiths modeli olarak da bilinen spin-1 Ising sistemleri üzerine yapılmış olan başarılı çalışmalar ve Riemann geometrisinin uygulama alanları hakkında yayınlanmış bazı kaynaklar derlenerek ayrıntıları ile sunuldu.

### 2.1. Spin-1 Blume-Emery-Griffiths Modeli ve Özellikleri Üzerine Yapılan Çalışmalar

Modelin en çok bilinen ve çalışılan versiyonlarından olan izotropik ve anizotropik BEG modellerinin denge ve denge dışı özellikleri istatistik mekanikte geliştirilen birçok yöntem ile incelendi. En çok yararlanılan teknikler arasında renormalizasyon grup (RG) teorisi, Monte Carlo (MC) simülasyon tekniği, etkin alan teorisi (EFT), ortalama alan yaklaşımı (MFA), kümesel değişim metodu (CVM), transfer matris metodu (TMM), lineer zincir yaklaşımı (LCA), denge dışı istatistik mekaniğin Kikuchi yol olasılık metodu (PPM), tersinmez termodinamiğin Onsager teorisi (ORT), Glauber dinamiği (GD) vb yer almaktadır. Bu metodlardan son üç tanesi fiziksel sistemlerin dinamiğini çalışmak için başvurulan teorilerdir (Onsager 1931; Kikuchi 1960; Glauber 1963). Diğerleri ise spin sistemlerinin termodinamik faz geçişlerini belirlemede literatürde öne çıkmış yaklaşım biçimleridir (Wannier 1945; Kadanoff 1966; Wilson 1971; Stanley 1971; Kikuchi 1974; Kaneyoshi vd 1981; Plascak ve Silva 1982). Bu metodların spin-1 BEG sistemlerine uygulanmasıyla gerçekleştirilen çalışmalar yukarıdaki sıra takip edilerek şöyle özetlenebilir:

Spin sistemi araştırmalarında kullanılan ve en etkin yöntemlerden biri olan renormalizasyon grup teorisi ile yapılan ilk çalışmalarda, kare örgü üzerinde bir spin-1 BEG modelinin faz diyagramları elde edilerek, bu faz diyagramlarının ortalama alan yaklaşımı ile bulunanlara benzer olduğu görüldü (Berker ve Wortis 1976). Üçgen örgüde de spin-1 BEG modelinin faz diyagramları RG ile elde edilip, farklı çalışmalarda elde edilenler ile karşılaştırıldı (Adler vd 1978). Diğer taraftan, modelin kritik davranışları Bonfim ve Barreto tarafından ortalama alan RG yaklaşımı ile incelendi ve çeşitli örgüler için faz diyagramları elde edilerek diğer metotlardan bulunan sonuçlar ile karşılaştırıldı (Bonfim ve Barreto 1985). Ayrıca, modelin ortalama-alan ve RG hesapları spin değişkeninin ayrık formundan sürekli formuna dönüşümü altında tekrarlandı (Carneiro vd 1987). 1993 yılında, spin-1 BEG modelinde ferromanyetik faz içerisinde bir kritik son nokta meydana geldiği, düzensiz-düzenli-düzensiz yeniden girilebilir durumların olduğu ve ferromanyetik faz ile antikuadrupolar faz arasında sıkıştırılmış bir ferrimanyetik faz oluştuğu belirlendi (Netz ve Berker 1993). Son yıllarda ise, Antenucci ve grubu, Berker ve Wortis'in 1976 yılında yapmış oldukları çalışmayı genişleterek, gerçek-uzay RG yöntemi ile iki kademeli bir topoloji çalışarak Ising ve BEG modellerinin kritik davranışlarını iki ve üç boyutta incelediler. Sonuç olarak, antiferromanyetik fazın belirlenmesinin yanında her iki model için de kritik noktaların yerleşimi ve kritik üstellerin tahminini geliştirdiler (Antenucci vd 2014).

Model, Monte Carlo simülasyon tekniği ile de incelenmiş olup yapılan ilk makalelerin birinde Tanaka ve Kawabe tarafından 1985 yılında pozitif bikuadratik etkileşmeli spin-1 BEG modelindeki faz geçişleri kare örgüde çalışıldı ve faz diyagramları çeşitli enerji değerleri için sunularak, MFA ve diğer teorilerden elde edilen sonuçlar ile kıyaslandı (Tanaka ve Kawabe 1985). Sonraki yıllarda iki ve üç boyutlu anizotropik spin-1 BEG modelinin faz diyagramları elde edilerek düşük sıcaklıklarda aşamalı bir kuadrupol faz ortaya çıkarıldı. Bu fazın faz geçiş çizgisi ile ferromanyetik fazın faz geçiş çizgisinin düşük sıcaklıklarda birbirine oldukça fazla yaklaştığı sonucuna varıldı (Wang vd 1987; Wang ve Wentworth 1987). Kasono ve Ono ise, etkileşim parametrelerine dayalı birkaç tane yeniden girilebilir faz geçişi ve birinci-derece ardışık geçiş buldular ve basit kübik örgülerde faz diyagramlarını elde ederek yeniden girilebilir durumların varlığını MC ile doğruladılar (Kasono ve Ono 1992). Bal peteği örgüde de anizotropik spin-1 BEG modeli MC simülasyon tekniği ile çalışıldı ve ferromanyetik, aşamalı kuadrupolar ve düzensiz fazların ikinci-derece faz geçiş çizgileri ile birbirinden ayrıldığı bazı etkileşim parametreleri için faz diyagramları elde edildi (Booth vd 1993). Konu ile ilgili MCrenormalizasyon-grup tekniği ile de çalışmalar yapılmış, itici bikuadratik etkileşme için kübik örgüde spin-1 BEG modelinde ferromanyetik, antikuadrupolar ve dar bir bölgede yeni bir ferrimanyetik faz içeren faz diyagramları sunulmuştur. Üç fazda da sıcaklık düşürüldüğünde yeniden girilebilir durum sergilenmiş olup, ferromanyetik fazda çift yeniden girilebilir durum gözlendi (Netz 1992). 2012 yılında, düşük sıcaklıklarda MC simülasyon yöntemi ile antiferromanyetik en yakın komşu etkileşmeli BEG modelinin taban durum özellikleri üçgen örgüde araştırılarak, seçilmiş parametre değerlerinde çoklu manyetik yapıların varlığı kanıtlandı ve manyetizasyon eğrilerinin alana bağlılığı verildi (Žukovič 2012). Basit kübik örgüde spin-1 BEG modelinin faz diyagramlarına bikuadratik değişim çiftlenim anizotropinin etkisi MFA ve MC simülasyonu yöntemi ile eşzamanlı araştırılarak bikuadratik çiftlenim anizotropisinin ferromanyetik fazın kararlılığını desteklediği bulundu ve ferrimanyetik fazda sıcaklığın bir fonksiyonu olarak manyetizasyon ve kuadrupolar momentin davranışı hesaplandı (Dani vd 2014). Son yıllarda yapılan bir çalışmada ise, kare örgüde üç-durumlu spin-1 BEG modelinin kritik davranışları ve üç boyutlu faz diyagramları öncekilerden farklı olarak iki algoritmaya dayanan MC simülasyon tekniği ile araştırıldı ve ferromanyetik (F), paramanyetik (P) ve kuadrupolar (Q) faz olmak üzere üç farklı faz tekrar belirlendi (Laque vd 2019).

Etkin alan teorisi de literatürde en çok başvurulan etkili yöntemlerden birisi olup sunulan ilk çalışmalardan birinde anizotropik BEG modeli için indirgenmiş bikuadratik ve tek-iyon anizotropinin farklı değerleri kullanılarak faz diyagramları elde edildi (Fittipaldi ve Siqueira 1986). Sonraki yıllarda kare ve kübik örgü için araştırmalar yapıldı (Chakraborty 1988). Tucker, Fittipaldi ve Siqueira (1986) ve Chakraborty (1988) tarafindan, Honmura-Kaneyoshi tekniklerinin uzantısına dayalı EFT (Honmura ve Kaneyoshi 1979) ile elde edilen izotropik BEG modelinin kritik sıcaklığı için bulunan sonuçları eleştirdi. Bu çalışmaların yalnızca kendi aralarında değil diğer teorilerden elde edilen sonuçlar ile de farklılık gösterdiğini söyledi ve bunun nedenini araştırarak etkin alan denklemlerinin doğru bir şekilde ele alınmasıyla çift yaklaşıma dayalı kümesel değişim metodu (PACVM)'nda ve diğer metotlarda da yakın sonuçların elde edildiğini bildirdi (Tucker 1988). Tucker, başka araştırmalarında ise, spin-1 BEG modelinin üçlü kritik nokta davranışını petek örgü, kare örgü ve kübik örgülerde tespit etti (Tucker 1989a,b; 1991). Diğer yaklaşımlardaki gibi EFT ile de modelin faz diyagramları ve faz geçiş sıcaklığı elde edilerek birinci-derece ve ikinci-derece faz geçişleri ile yeniden girilebilir durumlar bulundu (Fittipaldi ve Kaneyoshi 1989). Bunların dışında, EFT ile modelin rastgele kristal alan ve rastgele bağ seyreltik türleri de farklı makalelerde sunuldu (Tucker 1992; Ez-Zahraouy vd 2004; Dong ve Yan 2006; 2007; 2008). Son yıllarda yapılmış olan bir başka çalışmada, Kagomé örgüde de BEG modelinin üçlü kritik davranışları araştırılarak çoklu kritik noktalar, kritik sınırlar ve manyetizasyon EFT ve MFA ile elde edildi (Santos ve Barreto 2016).

Yaklaşık yöntemlerden biri olan ve bu tez çalışmasında da kullanılan ortalama alan yaklaşımı, literatürde Ising modellerinin araştırılmasında en çok kullanılan yöntemler arasındadır ve moleküler alan yaklaşımı olarak da bilinmektedir. MFA ile yapılan ilk çalışmalarda  $He^3 - He^4$  karışımlarının termodinamik davranışı incelenmiş olup,  $He^3 - He^4$  deneylerindeki bazı termodinamik özelliklerdeki farklılıkların MFA teorisinden kaynaklanmış olabileceği ve MFA teorisine dayanmayan termodinamik davranışı araştırma yöntemlerinin faz geçişleri veya kritik noktaların bazı detayları hakkında yanlış bilgi verdiğinden bahsedildi (Blume vd 1971). Daha sonraki yıllarda, MFA'ya dayalı spin-1 BEG modeli ile basit bir akışkanın yoğunlaşması ve faz ayrışması, ikili akışkanların yoğunlaşması ve faz ayrışması ile ikili ve üçlü akışkanlarda üçlü kritik noktaların incelenmesi üzerine çalışmalar yapıldı (Lajzerowicz ve Sivardière 1975; Sivardière ve Lajzerowicz 1975a,b). Modelle ilgili olarak yapılan istatistik mekaniksel çalışmalarda da MFA ile faz geçişleri elde edilerek sistemin termodinamik davranışı sunuldu (Tanaka ve Mannari 1976). Ayrıca, spin değerleri  $S_i = +1, 0, -1$  olan ve sırasıyla su, yüzey aktif madde ve yağa karşılık gelen bir mikroemülsiyon spin-1 modeli ile formüle edilerek sistemin faz diyagramı bulundu ve yağ ve su arasındaki yüzey gerilimi yüzey aktif madde konsantrasyonunun bir fonksiyonu olarak elde edildi (Schick ve Shih 1986). Hoston ve Berker ise, 1991 yılında yaptıkları iki çalışmada, negatif bikuadratik çiftlenimler için, yalnızca en yakın komşu çift etkileşmeli spin-1 BEG modelini çalışarak yeni bir çoklu kritik topoloji ve iki yeni düzenli faz içeren 6 faz diyagramı elde ettiler. Bu basit spin sisteminin faz diyagramlarının ise 9 farklı topoloji ve üç düzenli faz içerdiği belirlendi (Hoston ve Berker 1991a,b). 1999 yılında enine kristal alan etkileşmeli, transfer ve boyuna manyetik alanlı, bilineer, bikuadratik ve kristal alan etkileşmeli BEG modelinde düzen parametrelerinin kararlı, yarı kararlı ve kararsız çözümleri bulundu. Boyuna dış manyetik alanın yokluğunda faz geçişleri ve faz diyagramları 5 farklı düzlemde çiftlenim değerleri ile sistem parametrelerinin birkaç değeri için elde edildi (Albayrak ve Keskin 1999). 2014 yılında MFA ve MC simülasyonu yöntemi ile bikuadratik değişim çiftlenim anizotropinin faz diyagramlarına etkisi araştırıldı ve bikuadratik anizotropinin ferrimanyetik ve antikuadrupolar fazları desteklediği bulundu. Çalışmalar sonucunda her iki yaklaşımda bulunan sonuçların birbiri ile uyumlu olduğu görüldü (Dani vd 2014).

Bir diğer yaklaşık yöntem olan kümesel değişim metodu ile de model üzerinde çe-

şitli çalışmalar yapıldı. Bunlardan birinde Keskin ve grubu kümesel değişim metodunun en düşük yaklaşımında (LACVM) (ortalama alan yaklaşımının diğer bir çeşidi olarak da bilinir) bilineer ve bikuadratik çift etkileşmeli Hamiltonyene sahip spin-1 Ising modelini sıfır alanda çalışıp kritik sıcaklıklar ve birinci-derece faz geçişinde, Hessian determinantını kullanarak çiftlenim parametresinin farklı değerleri için denge sıcaklıklarının limitlerini elde ettiler (Keskin vd 1989). Sıcaklık değerleri artarken ve azalırken serbest enerji değerleri kullanılarak birinci-derece faz geçiş sıcaklıkları bulundu ve düzen parametrelerinin kararlı durumlarının yanında, yarı kararlı ve kararsız durumları da tahmin edildi. Kümesel değişim metodunun en düşük ve çift yaklaşımları altında aynı modelin birçok çeşidi Keskin ve çalışma grubu tarafından yaygın şekilde çalışılarak sistemde meydana gelen kararlı, kararsız ve yarı kararlı çözümler ortaya çıkarıldı (Keskin ve Özgan 1990; Keskin 1993; Keskin ve Arslan 1995; Keskin ve Erdem 1997; Temirci vd 1996; Keskin vd. 1999; Keskin ve Ekiz 2000; Keskin ve Solak 2000; Ekiz ve Keskin 2002; Erdinç ve Keskin 2002; Erdinç vd 2006). Bu çalışmalarla eş zamanlı olarak model, bal peteği örgüde (Rosengren ve Lapinskas 1993), üçgen örgüde (Grigelionis ve Rosengren 1994), basit kübik ve yüzey merkezli kübik örgüde (Lapinskas ve Rosengren 1994) CVM ile araştırılarak düzen parametrelerinin sıcaklıkla/manyetik alanla değişimi ve faz diyagramları bulundu. Ayrıca, faz diyagramları kare örgüde kümesel değişim metodunun kare yaklaşımında da elde edildi ve sonlu sıcaklıkta negatif etkileşim değerleri için oldukça zengin faz diyagramları ile ferrimanyetik, zayıf ferromanyetik ve birkaç çoklu kritik nokta belirlendi (Buzano vd 1996). Daha sonraki yıllarda çift katmanlı manyetik spin-1 sistemi için de faz diyagramları PACVM ile bulundu (Tucker vd 1998).

Bu metodlar dışında, spin-1 BEG modelleri farklı yöntemler ile de çalışıldı. Bilineer ve biquadratik etkileşmeli spin-1 BEG sisteminin çift korelasyonunun ve ısı kapasitesinin faz geçişleri ile bağlantısı, anizotropi sabitinin faz geçişlerine etkisi iki parametreli genelleştirilmiş sabit çiftlenim yaklaşımı ile araştırıldı (Takahashi ve Tanaka 1979). Düzlemsel anizotropik BEG modelinin kritik özellikleri transfer matriks metodu ile çalışıldı ve faz diyagramları elde edilerek TMM'nin kritik noktalar ile kritik son noktaları tahmin etmek için oldukça etkili bir yöntem olduğu ortaya çıkarıldı (Koza vd 1990). Akheyan ve Ananikian, bilineer ve bikuadratik etkileşmeli ve tek iyon kristal alanlı spin-1 Ising modelini özyineleme fonksiyonları ile Bethe yaklaşımında çözdü. Kritik özellikleri araş-

tırmanın genel prosedürü tartışılıp hem K > 0 hem de K < 0 için faz diyagramlarının tamamı oluşturuldu. Çift yeniden girilebilir durum, kademeli kuadrupolar ve ferrimanyetik faz ile çok sayıda farklı kritik ve çoklu kritik noktalar elde edildi. Sonuçları diğer yaklaşımların sonuçları ile kıyaslandı ve Bethe örgüsü yaklaşımının doğruluğu tartışıldı. Bethe örgüsü çözümünün MFA'dan daha doğru olduğu söylendi (Akheyan ve Ananikian 1996). Basit kübik örgüde dipol-dipol, kuadrupol-kuadrupol çiftlenim ve kristal-alan etkileşmeli BEG modelinin düzen parametreleri ile faz diyagramlarının sıcaklığa bağlılığı LCA kullanılarak da çalışıldı. Çalışma sonucunda sistemin ikinci-derece ve birinci-derece faz geçişi sergilediği bulundu. Ayrıca düzen parametrelerinin kararlı çözümlerinin yanında ikinci-derece faz geçişi için kuadrupol düzen parametresinin kararsız çözümü ile birinci-derece faz geçişi için kuadrupol düzen parametresinin yarı kararlı çözümü ve kuadrupol düzen parametresi ile manyetizasyonun kararsız çözümleri elde edildi (Albayrak ve Keskin 2000). İki-parçacıklı küme yaklaşımı kullanılarak basit kübik örgüde bilineer, bikuadratik ve tek iyon anizotropili spin-1 Ising modelinin yeniden girilebilir ve çift yeniden girilebilir davranışı çalışıldı ve faz diyagramları elde edilerek dipolar ve kuadrupolar momentlerin sıcaklığa bağlılığı araştırıldı (Baran ve Levistskii 2002).

Yukarıdaki bilgilerden de anlaşılacağı gibi spin-1 Ising modelinin denge özellikleri yaygın olarak çalışılmıştır. Ancak kooperatif olayların dinamik modelleri daha spekülatif bir yapıya sahip olduğu için aynı modelin denge dışı davranışları yani dinamik özellikleri daha az bilinmektedir. Bu çalışmalardan bazıları şu şekildedir:

Bilineer, bikuadratik en yakın komşu çift etkileşmeli ve tek iyon potansiyelli spin-1 BEG modelinin dinamik özellikleri, yani sistemin zamana göre davranışı veya denge durumlarına doğru evrilmesi genellikle denge-dışı istatistik teori ve tersinmez termodinamik olmak üzere iki farklı yöntem ile incelendi. İstatistik teorilerden CVM'nin zaman domenine genelleştirilmiş hali olan Kikuchi yol olasılık metodu (Kikuchi 1960) ile lineer olmayan hareket denklemleri Keskin ve çalışma arkadaşları tarafından türetilerek çözümler akış diyagramları veya düzen parametrelerinin durulma (dinlenme) eğrileri şeklinde verildi (Keskin vd 1989; Keskin ve Erdem 1997; Keskin ve Solak 2000; Keskin ve Erdinç 2004). Yakın zamanda, aynı dinamik denklemler lineer formda yazılarak iki durulma zamanı ile karakterize edildi (Erdem ve Özüm 2019). Aynı çalışma ışığında modelin kararlı durum kinetiği araştırıldı ve sistemin salınımlı manyetik alana verdiği dinamik tepki irdelendi (Özüm ve Erdem 2020). Durulma zamanlarının ve kararlı durum kinetiğinin araştırıldığı diğer çalışmalar, son 20 yılda bir fenomenolojik yaklaşım olarak bilinen denge-dışı termodinimiğin Onsager teorisi ile yapıldı. Önce, düzen parametreleri akılar olarak düşünülüp bu akılara yol açan kuvvetler ile akılar arasındaki lineer bağlantıdan kinetik denklemler türetildi. Bu denklemlerin çözümü, PPM'de olduğu gibi başlangıçta durulma zamanları şeklinde verilerek bu zamanların analizleri yapıldı (Erdem ve Keskin 2001; Keskin ve Erdem 2002; Erdem vd 2003). Daha sonra, kararlı durum kinetiğinden yararlanılarak spin sistemindeki ses yayılması (Keskin ve Erdem 2003) ve dinamik dipolar ve kuadrupolar alınganlık çalışmaları (Erdem 2008; Pawlak vd 2019) gerçekleştirildi. Modelin kararlı durum kinetiği, Glauber-tipi stokastik dinamik yöntemlerle de araştırıldı. MFA ve EFT ile kinetik BEG modelinin durağan durumları analiz edildikten sonra zamana bağlı salınımlı manyetik alan varlığında itici bikuadratik etkileşme altında meydana gelen dinamik faz diyagramları görüntülenerek yorumlandı (Temizer vd 2008; Ertaş ve Keskin 2015).

### 2.2. Riemann Geometrisinin Termodinamikteki Uygulama Alanları Üzerine Yapılan Çalışmalar

Riemann geometrisi matematikte bir Euclid dışı geometri olarak bilinir. Termodinamiğin Riemann geometrisi kullanılarak yeniden formülize edilmesi 1970'li yıllarda başladı. İlk olarak Weinhold (1975) termodinamikteki alışılmış kısmi türev ifadeleri yerine vektör -ve matris- cebiri kullanılması fikrini ortaya atarak ilerleyen yıllarda termodinamiğin bu yeni görünümünün uygulamalarına öncülük etti. Sonra, Ruppeiner (1979) ısısal dalgalanmaları dahil ederek termodinamik sistemlerin Riemann manifoldları ile temsil edilebileceğini ortaya koydu. Dolayısıyla bu manifoldların eğriliği saf akışkanlarda parçaçıklar arası etkileşmelerin bir ölçüsü olarak özel bir ilgi odağı oldu. İlk eğrilik hesapları, hesaplama kolaylıkları nedeniyle tek bileşenli ideal gazlar ve paramanyetizma problemi için gerçekleştirildi (Mijatović vd 1987). Bu iki fiziksel sistemin eğrilik skaleri beklenildiği gibi sıfır olarak bulundu. Termodinamik durum uzaylarınının bir düz uzay olduğu, dolayısıyla parçacıklararası/spinlerarası etkileşmelerin olmadığı sonucu kanıtlanmış oldu. Sonraki yıllarda çok bileşenli ideal gazların termodinamik eğriliği de hesaplandı (Ruppeiner ve Davis 1990).

1990'lı yıllarda ideal fiziksel sistemler dışında, faz geçişleri ve kritik olaylar da Riemann geometrisine dayalı termodinamik ile formüle edilmeye başlandı (Ruppeiner 1991; Ruppeiner 1995; Ruppeiner 1998). Önce, R eğriliği ile korelasyon hacmi arasında bir bağlantı kuruldu ( $R \propto \xi^3$ ). Kurulan bu bağlantıdan, saf akışkanlarda korelasyon uzunluğu  $\xi$  kritik nokta civarında sonsuza ıraksadığı için R eğriliğinin de bu nokta civarında sonuza ıraksaması gerektiği sonucuna ulaşıldı. Bu bulgu, R'nin moleküller arası etkileşmelerinin bir ölçüsü olabileceği hipotezine kuvvet verdi. Yakın zamanlarda da etkileşmeli fiziksel sistemlerdeki moleküller arası çekici ve itici kuvvetlerle termodinamik eğrilik Rdoğrudan ilişkilendirildi (Ruppeiner 2012; May vd 2013; 2015). Yani akışkanlarda, özellikle Lennard Jones sıvılarında, sistemin herhangi bir fazdaki (katı, sıvı, gaz) özgün fiziği hakkındaki bilgi, R niceliğinin alacağı değerlerin işareti ile dışarı yansıtılır. Dolayısıyla termodinamik faz diyagramlarını, çekici (R < 0) ve itici (R > 0) etkileşme bölgeleri olarak R = 0 çizgisi ile ikiye ayırmak mümkündür. R = 0 çizgisine sıfır eğrilik çizgisi de denir. Bu şekilde ortaya çıkan faz diyagram topolojisine "Geometrik Faz Diyagramı (GFD)" adı verilir (Brody ve Hook 2009). Çeşitli akışkanların faz özelliklerinin R eğriliğine ait kontur çizgileri şeklinde sunulduğu grafiksel sonuçlar da bulunmaktadır. Bunlara *R*-diyagramları denilir (Ruppeiner vd 2015; May vd 2015).

Akışkan sistemler ve bunlar için geliştirilen modeller dışında manyetik sistemler ve spin modellerinin Riemann tipi metrik incelemesi daha önce başlamasına rağmen ilerletilmesi akışkanlardaki kadar hızlı olmadı. Bu konudaki ilk kapsamlı makale 1989 yılında Janyszek ve Mrugała tarafından yayınlandı. Önce, kısa menzil etkileşmeli tekboyutlu Ising modeli ve ortalama alan spin-1/2 Ising sistemi incelendi. İkinci modelde, metrik tensörün dejenere olduğu görüldü. Dejenerasyon, manyetik Hamiltonyene örgü enerjisi ilave edilerek yok edildi ve her iki modelde kritik nokta civarında parametre uzayının eğriliğinin sonsuza ıraksadığı görüldü (Janyszek ve Mrugała 1989). Eğriliğin, spinlerarası etkileşmelerden kaynaklanan dalgalanmaların bir parçası olduğu yorumuna yer verildi. Uzunca bir süre duraklayan manyetik modellerin geometrik çerçevede incelenmesi çalışmaları akışkanlardaki araştırmalardan sonra 2000'li yıllarda yeniden başladı ve hız kazandı. Bu bağlamda; Ising modeli ve küresel spin modeli gibi temel spin sistemlerinin iki-boyutlu parametre uzayı için türetilen eğrilik skaleri R'nin kritik nokta yakınlarındaki ölçekleme analizleri yapılarak kritik üstel değerleri ( $\lambda_R$ ) ve bunların diğer termodinamik niceliklerinki ile bağlantıları araştırıldı (Janke vd 2002; Janke vd 2003; Janke vd 2004).  $\lambda_R$ 'nin sadece özgül 151 kritik üsteli  $\lambda_\alpha$  ile ilişkili olduğu ( $\lambda_R = \lambda_\alpha - 2$ ) bulundu. Daha sonraki yıllarda, iki-boyutlu termodinamik durum uzayının geometrik özelliklerinin incelenmesi faklı örgülerdeki değişik spin sistemlerine genişletildi (Heidari ve Ghorbani 2012; Mirza ve Talaei 2013; Ruppeiner ve Bellucci 2015). Son birkaç yılda da, çift yaklaşımlı ferromanyetik ve antiferromanyetik Ising modelleri için kısa ve uzun menzil düzen parametrelerinin iki-boyutlu manifold seçilmesiyle türetilen metrikler ve bu metriklerle bulunan termodinamik eğriliklerin manyetik faz geçişleri yakınlarındaki davranışları kritik üstellerle analiz edildi (Erdem 2018a,b; 2019). Yine, bu analizlerden motive olarak BEG modeli bağlamında ferroelektrik kristallerdeki faz geçişlerinin ve spin-ötesi geçiş molekülü içeren malzemelerdeki spin durumu değişimlerinin Riemann geometrik yorumu yapıldı (Erdem 2020; 2022). Son olarak, 2022 yılında çok yakın bir zamanda anizotropik BEG modelinin sıcaklık-manyetik alan ve sıcaklık-kristal alan parametre yüzeylerinin eğ-rilik skaleri tanımlamaları grafiksel olarak verildi (Sanwari ve Sahay 2022b).

#### **3. MATERYAL VE METOT**

#### 3.1. Modelin Tanımı, Denge Özellikleri ve Faz Geçişleri

Sunulan tezde, materyal olarak spin-1 Blume-Emery-Griffiths modelinin en çok çalışılan çeşitlerinden izotropik ve anizotropik BEG modelleri üzerinde durulduğundan bu bölümde her iki spin sisteminin tanımı yapılarak denge özellikleri ve sergilenen faz geçişleri kısaca anlatılacaktır.

Spin sayısı  $\mathcal{N}$  olan bir spin-1 BEG sistemi için en yakın komşu spin etkileşmeli Hamiltonyen ifadesi dış manyetik alan varlığında şöyle yazılır (Blume vd 1971; Berker ve Wortis 1976; Erdem vd 2003):

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

D = 0 olması durumunda (3.1) eşitliği IBEG Hamiltonyen'ine dönüşür (Tanaka ve Mannari 1976; Bonfim ve Barreto 1985; Carneiro vd 1987; Chakraborty 1988; Tucker 1988; Keskin vd 1989; Keskin ve Özgan 1990; Erdem ve Keskin 2001; Erdinç ve Keskin 2002; Keskin ve Erdem 2003; Erdem 2008). Her iki spin sisteminin denge durumundaki özellikleri genellikle öz-uyumlu olarak Helmholtz serbest enerjisi hesabı ile belirlenir. Öz-uyumlu denklem sisteminin elde edilmesi için kullanılan termodinamik potansiyellerden birisi de Gibbs enerji fonksiyonelidir (G). Gelecek bölümde görüleceği gibi, termodinamik parametre uzayı seçimi ve metrik yazılmasında kullanılabilecek en uygun potansiyel G olmasından dolayı bu bölüme Gibbs enerji fonksiyonelinin tanımı ile başlıyoruz. U, T, S, M ve Q sırasıyla iç enerji, mutlak sıcaklık, entropi, dipolar düzen parametresi (manyetizasyon) ve kuadrupolar düzen parametresi (kuadrupol moment) olmak üzere dış manyetik alan ve kristal alan varlığında Gibbs enerji fonksiyonelinin genel ifadesi şöyledir:

$$\mathcal{G} = U - TS - HM + DQ. \tag{3.2}$$

Burada  $S = \mathcal{N}\sigma$ ,  $M = \mathcal{N}m$  ve  $Q = \mathcal{N}q$  olup

$$m \equiv < S_i >, \tag{3.3}$$

$$q \equiv < S_i^2 > -2/3, \tag{3.4}$$

şeklinde tanımlanır. Eşitlik (3.3) ile (3.4)'teki < ... > gösterimi "termal beklenen değer" anlamındadır. Gibbs enerji fonksiyoneli aynı zamanda spin başına entropi  $\sigma$ 'nın m ve qdeğişkenlerine göre bir Legendre dönüşümüdür. Bragg-Williams formalizmindeki Ortalama Alan Yaklaşımı altında Gibbs enerji fonksiyonelinin ifadesini yeniden düzenlersek aşağıdaki eşitlik elde edilir:

$$g(m,q) = \frac{1}{K} \frac{\mathcal{G}}{\mathcal{N}} = -\alpha m^2 - q^2 + \theta \sum_{i=1}^3 p_i \ln p_i - hm + dq.$$
(3.5)

Bu ifadede  $\alpha = J/K$  çiftlenim oran sabiti,  $\theta = k_B T/K$  indirgenmiş sıcaklık ( $k_B$ Boltzman sabiti), h = H/K indirgenmiş manyetik alan, d = D/K indirgenmiş kristal alan, ve  $p_i$ ' ler ise verilen dipolar ve kuadrupolar düzen parametreleri ile uyumlu spin durumlarının olasılıklarıdır. Bunlar düzen parametreleri cinsinden

$$p_1 = \frac{1}{3} + \frac{1}{2}(m+q), \tag{3.6}$$

$$p_2 = \frac{1}{3} - q, \tag{3.7}$$

$$p_3 = \frac{1}{3} - \frac{1}{2}(m-q), \tag{3.8}$$

şeklinde yazılabilir (Erdem ve Keskin 2001). Dipolar ve kuadrupolar düzen parametrelerinin denge değerleri için öz-uyumlu denklem sistemi

$$\left(\frac{\partial g}{\partial m}\right)_q = 0,\tag{3.9}$$

ve

$$\left(\frac{\partial g}{\partial q}\right)_m = 0, \tag{3.10}$$

ifadeleri kullanılarak türetilebilir. Bu amaçla ilk olarak Tanaka ve Mannari (1976) tarafından izotropik spin sistemi (d = 0) yani izotropik BEG modeli için aşağıdaki öz-uyumlu denklem takımı elde edilmiştir:

$$m = \frac{2e^b \sinh(a)}{1 + 2e^b \cosh(a)},\tag{3.11}$$

$$q = \frac{2}{3} \left( \frac{e^b \cosh(a) - 1}{1 + 2e^b \cosh(a)} \right).$$
(3.12)

ifade edilebilir:

Burada *a* ve *b*'nin gösterimi basitçe  $a = (2\alpha m + h)/\theta$  ve  $b = 2q/\theta$  şeklindedir. Örnek olarak seçilen birkaç  $\alpha$  değeri için Eşitlik (3.11) ve (3.12)'nin nümerik çözümünden *m* ve *q*'nun sıcaklığa göre değişimi Şekil 3.1'de gösterildi.  $\alpha > 2/3$  için elde edilen bazı grafiksel sonuçlara göre dış manyetik alan olmadığı durumda (h = 0), düzen parametreleri *m* ve *q* doymuş değerlerinden ( $m \approx 1$  ve  $q \approx 1/3$ ) başlayarak  $\theta$ 'nın artışı ile sürekli şekilde azalır ve kritik sıcaklıkta ( $\theta_C = 4\alpha/3$ ) sıfıra yaklaşır. Bu olay, ferromanyetik fazdan (m > q > 0) paramanyetik faza (m = q = 0) sürekli (ikinci-derece) faz geçişi olarak adlandırılır (Şekil 3.1 (a), (d)). Bu durumda,  $\varepsilon = \theta_C - \theta$  kritik sıcaklıktan uzaklığın bir öl-

çüsü olmak üzere m ve q parametreleri F fazında kritik sıcaklık  $\theta_C$  yakınlarında şu şekilde

$$m \cong 2\left(\frac{1}{2\alpha}\frac{3\alpha - 1}{3\alpha - 2}\right)^{1/2}\varepsilon^{1/2},\tag{3.13}$$

$$q \cong \frac{1}{2} \left( \frac{3}{3\alpha - 2} \right) \varepsilon. \tag{3.14}$$

Yani, (3.13) ve (3.14) eşitliklerine göre  $\alpha > 2/3$  şartını sağlayan her  $\alpha$  oran sabiti için  $m \propto \varepsilon^{\lambda_m}$  ve  $q \propto \varepsilon^{\lambda_q}$  ölçekleme kuralları geçerlidir. Burada  $\lambda_m = 1/2$  ve  $\lambda_q = 1.0$  sırasıyla m ve q için kritik nokta üstel değerleri olarak adlandırılır. Bu sonuçlar bir sonraki bölümde eğrilik skalerinin kritik nokta yakınlarındaki davranışını belirlemede yardımcı olacaktır.

Şekil 3.1 (b) ve (e)'de gösterildiği gibi, sistem  $\alpha = 2/3$  değerinde bir üçlü kritik noktaya (TCP) sahiptir. Bilindiği gibi, TCP noktası ikinci-derece faz geçişinin son bulduğu ve birinci-derece faz geçişinin başladığı noktadır. Diğer taraftan, her iki düzen parametresi  $1/3 \leq \alpha < 2/3$  olduğunda süreksiz (birinci-derece) faz geçişi sergileyerek kritik noktada aniden sıfıra atlar (Şekil 3.1 (c), (f)). Bir dış manyetik alan varlığında  $(h \neq 0)$  ise, ortaya çıkan tüm faz geçişleri kaybolur ve daima m > q > 0 olduğu gözlenir (Şekil 3.1). Ayrıca,  $\alpha < 1/3$  iken, kuadrupolar (m = 0, q < 0) ve paramanyetik fazlar arasında birinci-derece faz geçişi gözlemlenir (Şekil 3.2). Buraya kadar verilen faz geçişi özellikleri ( $\theta, \alpha$ ) düzlemi üzerinde belirtilen faz diyagramında da açıkça görülebilir (Şekil 3.3). Şekillerde gösterilen tüm bu eğriler spin sisteminin kararlı durum çözümleridir. Yarı kararlı ve kararsız durum çözümleri birçok çalışmada detaylı olarak sunulduğu için (Tanaka ve Mannari 1976; Keskin vd 1989; Keskin ve Özgan 1990; Keskin 1993; Keskin ve Erdem 1997) burada sadece kararlı çözümler grafiksel olarak gösterildi.



**Şekil 3.1.** IBEG modeli için dış manyetik alan varlığında  $(h \neq 0)$  ve yokluğunda (h = 0) farklı  $\alpha$  değerleri kullanılarak elde edilen düzen parametrelerinin (m, q) indirgenmiş sıcaklık  $\theta$ 'ya göre değişimi. Düşey noktalı çizgiler faz geçiş sıcaklıklarını gösterir



Şekil 3.2. IBEG modeli için dış manyetik alan yokluğunda (h = 0)  $\alpha = 0.25$  kullanılarak elde edilen m ve q'nun  $\theta$ 'ya göre değişimi. Düşey noktalı çizgi birinci-derece faz geçiş sıcaklığını gösterir

Diğer taraftan, spin-1 BEG modeli ( $d \neq 0$ ) için spin başına serbest enerji ifadesi  $m = \langle S_i \rangle$  ve  $q = \langle S_i^2 \rangle$  tanımları kullanılarak şu şekilde düzenlenebilir (Erdem vd 2003; Pawlak vd 2019):

$$g(m,q) = \frac{1}{\gamma J} \frac{\mathcal{G}}{\mathcal{N}} = -\frac{1}{2}m^2 - \frac{1}{2}rq^2 + \theta \sum_{i=1}^3 p_i \ln p_i - hm + dq.$$
(3.15)

Burada  $r = K/\gamma J$  ( $\gamma$  örgü koordinasyon sayısı veya en yakın komşu spin sayısı),  $\theta = k_B T/\gamma J$ ,  $d = D/\gamma J$  şeklinde indirgenmiş niceliklerdir. Eşitlik (3.15)'teki r > 0ve r < 0 durumları sırasıyla çekici ve itici bikuadratik etkileşmelere karşılık gelir. Spin durum olasılıkları ise

$$p_1 = \frac{1}{2}(m+q), \tag{3.16}$$

$$p_2 = 1 - q, (3.17)$$

$$p_3 = -\frac{1}{2}(m-q), \tag{3.18}$$

şeklindedir. İzotropik modelde olduğu gibi denge şartları (Eşitlik (3.9) ve (3.10)) kullanı-



Şekil 3.3. IBEG sisteminin ( $\theta$ ,  $\alpha$ ) düzlemindeki faz diyagramı. Noktalı ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci- ve ikinci-derece faz geçişine karşılık gelmektedir. Siyah nokta üçlü kritik nokta TCP'yi göstermektedir

larak anizotropik BEG modeli için öz-uyumlu denklemler

$$m = \frac{2\sinh(m/\theta)}{\exp[(d - rq)/\theta] + 2\cosh(m/\theta)},$$
(3.19)

$$q = \frac{2\cosh(m/\theta)}{\exp[(d - rq)/\theta] + 2\cosh(m/\theta)},$$
(3.20)

olarak türetilir. Bu denklemlerden görüldüğü gibi, sistemin termodinamik davranışı ve meydana gelen faz geçişleri indirgenmiş niceliklere  $(r, d, \theta)$  bağlıdır. Eşitlik (3.19) ve (3.20)'nin belirli r değerleri seçilerek köklerin hesaplanması ile sistemde meydana gelen düzenli ve düzensiz faz bölgeleri ve aralarındaki faz denge eğrileri bulunabilir.

Bu tezde, öncelikle Hoston ve Berker'in 1991 yılında yayınlanan iki çalışması (Hoston ve Berker 1991a,b) esas alınarak r = 3 çekici bikuadratik etkileşmesi için (3.19) ve (3.20) eşitlikleri çözüldü. Şekil 3.1'den farklı olarak burada düzen parametrelerinin (m,q) sıcaklık yerine d'ye göre değişimi görüntülendi (Şekil 3.4). Şekilde, kuadrupol moment q'nun aldığı değerlere göre iki farklı paramanyetik faz (P1, P2) göze çarpar. Buna göre,  $\theta = 0.790$  seçildiğinde m ve q kendi doyum değerlerinden başlayarak d'nin artmasıyla azalmakta ve d = 1.870 değerine ulaşıldığında F ve P2 fazları arasında ikinciderece faz geçişi meydana gelmektedir (Şekil 3.4 (a)). Şekil 3.4 (b)'de ise, üçlü kritik noktada ( $\theta = \theta_{TCP} = 0.777$ ) m ve q'nun kristal alana göre değişimini gösterdik. Her iki şekilden de görüldüğü gibi, P1 fazındaki kuadrupol düzen parameteresinin büyüklüğü P2 fazındakinden küçüktür.

Şekil 3.5 (a)-(c) birinci derece-faz geçiş çizgisi üzerinde farklı noktalarda m ve q'nun ve Şekil 3.5 (d)-(f) spin başına Gibbs serbest enerjisi g'nin kristal alan d'ye göre değişimini göstermektedir. Şekil 3.5 (a)'da görüldüğü gibi,  $\theta = 0.750$  iken m'nin atlayarak sıfır olduğu noktayı  $d_1$ , q'nun atlamadan değişikliğe uğradığı diğer noktayı ise  $d_2$  olarak tanımlarsak  $d_1 = 1.955$  noktası F fazından P2 fazına birinci-derece geçiş ve  $d_2 = d_C = 2.02$  noktası ise dış kritik nokta C'yi göstermektedir. Şekil 3.5 (b), Şekil 3.5 (a)'ya benzemekte, fakat  $\theta = 0.730$  iken  $d_2 = 2.007$  noktası (q'nun ikinci atlama noktası) C ile üçlü nokta arasında yer almaktadır ve iki paramanyetik faz arasında (P2 fazından P1 fazına) süreksiz faz geçişi olmaktadır. m'nin atladığı nokta  $d_1 = 1.985$  ise F fazından P2 fazına süreksiz geçişin olduğu noktadır. Şekil 3.5 (c)'den ( $\theta = 0.721$ ) görüldüğü gibi m ve q'nun atlama noktaları aynı olup  $d_{TP} = 2.0$ 'de her iki düzen parametresindeki atlama belirgin şekilde görülebilir. Bu da faz diyagramında üçlü noktayı (TP) (üç fazın dengede olduğu nokta) ifade eder. Şekil 3.5 (d)-(f)'de sabit sıcaklıkta m ve q'nun farklı başlangıç değerleri için elde edilen spin başına Gibbs serbest enerjisinin faz geçiş noktalarında kesişmelerinden bulunan grafiksel sonuçlar yer almaktadır. Şekle göre, ortaya çıkan çizgilerde m'nin atladığı ilk noktada ve q'nun atladığı ikinci noktada kesişimler veya kırılmalar meydana gelmektedir. Yani, Şekil 3.5 (d)'de sol taraftaki kesişim noktası  $d_1=1.955$ 'de, sağ taraftaki kırılım noktası  $d_2=d_C=2.02$ 'de; Şekil 3.4 (e)'de ilk kesişim noktası  $d_1 = 1.985$ 'de, ikinci kesişim noktası  $d_2 = 2.007$ 'de; Şekil 3.5 (f)'de ise tek kesişim noktası  $d = d_{TP} = 2.0$ 'de oluşmaktadır. Kısacası, sabit sıcaklıkta Gibbs serbest enerjisini minimize eden kararlı ya da kararsız tüm noktaları görebilmek için aynı sıcaklıkta sisteme ait spin başına Gibbs enerjisinin indirgenmiş kristal alana göre değişimine bakıldı. Tüm kararlı veya kararsız noktaların kesişim noktası da bize o kristal alan değerindeki gerçek faz geçiş noktasını verdi.

Şekil 3.6'da ise, bir önceki şekilde spin başına Gibbs serbest enerjisi g ile tespit edilen birinci-derece faz geçişleri "Maxwell yapılandırma" yöntemi ile yeniden incelendi. Bu yöntemde yalnızca q düzen parametresinin Maxwell yapısı elde edildi. Çünkü faz geçişi yakınında m düzen parametrisi sıfır olmaktadır, yani m birincil düzen parametresidir.



Şekil 3.4. BEG modelinde h = 0 ve r = 3 için m ve q'nun farklı sıcaklıklarda d'ye göre değişimi. Düşey noktalı çizgiler faz geçişlerinin meydana geldiği d değerlerini gösterir. (a)  $\theta = 0.790$ , (b)  $\theta = 0.777$ 

q ise faz geçişi yakınında sıfıra ulaşmadığı için ikincil düzen parametresidir. Maxwell yapısı yalnızca ikincil düzen parametresinde geçerlidir. Bu yüzden q'nun farklı başlangıç değerleri için sıcaklık sabit tutularak kristal alan değeri değiştirildi ve farklı sıcaklık değerlerinde Maxwell yapısı grafikleri elde edildi. Şekil 3.6 (a) ve (b)'den görüleceği gibi düşey kırmızı noktalı çizginin her iki tarafındaki eğri alanları eşittir ve buna "Maxwell eşit alan kuralı" adı verilir. Böylece q düzen parametresindeki sinüsellerde faz geçiş noktaları oldukça belirgin bir şekilde ortaya çıkar (kırmızı noktalı çizgiler). Şekillerdeki kırmızı noktalı çizgiler  $\theta = 0.721$ ,  $\theta = 0.730$  değerleri için sırasıyla  $d_{TP} = 2.0$ , d = 2.007 kritik noktaları gösterir.  $\theta = 0.750$  iken C noktasında ( $d_C = 2.02$ ) sinüsel kaybolur. Bu nokta birinci-derece faz geçişinin son bulduğu noktadır.

Son olarak, r = 3 çekici bikuadratik etkileşmesi için Şekil 3.4'te çizilen m ve q eğrilerinin benzerleri ve Şekil 3.5 ile Şekil 3.6'daki grafiksel yöntemlerle yapılan hesaplamalar r = -0.5, -0.15, -1.0 itici etkileşimler kullanılarak tekrarlandı. Tüm sonuçlar ortalama-alan faz diyagramları şeklinde,  $(d, \theta)$  düzleminde Şekil 3.7'de gösterildi. Yani, sistemde ortaya çıkan faz geçişlerini ve kritik/üçlü kritik/çoklu kritik noktaları görmek için önceki çalışmalarda sunulan faz diyagramlarından (Hoston ve Berker 1991a,b; Pawlak vd 2019) dört farklı faz diyagramı topolojisi çekici ve itici bikuadratik etkileşmeleri



Şekil 3.5. BEG modelinde h = 0 ve r = 3 için (a), (b), (c) m ve q'nun ve (d), (e), (f) serbest enerji g'nin farklı sıcaklık değerlerinde kristal alana d'ye göre değişimi. Düşey noktalı çizgiler faz geçişlerinin meydana geldiği d değerlerini gösterir



Şekil 3.6. BEG modelinde h = 0 ve r = 3 iken farklı  $\theta$  değerleri için q düzen parametresinin kristal alan d'ye göre değişiminde Maxwell yapısı gösterimi. Kırmızı noktalı çizgiler (a)  $\theta = 0.721$  ve (b)  $\theta = 0.730$  değerleri için birinci-derece faz geçiş noktalarına (sırasıyla d = 2.0, d = 2.007); (c)  $\theta = 0.750$  değeri için de birinci-derece faz geçişinin sonlandığı C dış kritik noktasına (d = 2.02) karşılık gelmektedir. (a) ve (b) şekillerinde kırmızı noktalı çizginin sağ tarafındaki ve sol tarafındaki eğri alanları eşittir. Siyah noktalı çizgiler Maxwell sinüselinin maksimum ve minimum noktalarını gösterir. (c) şeklinde C dış kritik noktasında sinüsel görünüm kaybolmaktadır

temsilen sırasıyla Şekil 3.7 (a)-(d)'de tekrar çizildi. r = 3 olduğu çekici etkileşme durumunda (Şekil 3.7 (a)), faz diyagramında bir düzenli faz (F) ve iki düzensiz faz yani


Şekil 3.7. BEG modelinin (a) r = 3, (b) r = -0.15, (c) r = -0.5 ve (d) r = -1 değerleri kullanılarak çizilen  $(d, \theta)$  düzlemindeki faz diyagramları. Noktalı ve sürekli çizgiler sırasıyla birinci-derece ve ikinci-derece faz geçişine karşılık gelmektedir (Hoston ve Berker 1991a,b; Pawlak vd 2019)

paramanyetik faz (P1, P2) gözlenir. Ayrıca bu faz diyagramında F-P2 birinci-derece ve ikinci-derece faz geçişleri  $(d, \theta)$ =(1.898, 0.777) noktasında yani TCP'de buluşurken, P1-P2 birinci-derece faz geçişi çizgisi  $(d, \theta)$ =(2.02, 0.750) noktasında, yani C'de son bulur. Bu C noktasına "dış kritik nokta" denilir. Sistem  $(d, \theta)$ =(2.0, 0.721)'de üçlü noktaya sahiptir. Diğer taraftan, r = -0.5, -0.15, -1.0 itici etkileşme topolojilerinde sadece düzenli ve düzensiz fazlar (F, P) olmak üzere iki faz bölgesi yer alır. r = -0.15'de sürekli ve süreksiz faz geçiş çizgileri Şekil 3.7 (a)'da olduğu gibi TCP'de birleşmektedir (Şekil 3.7 (b)). r = 3'ten farklı olarak TCP noktası yakınlarındaki d değerlerinde ( $d \simeq d_{TCP}$ ) sıcaklık artışı ile F-P-F-P ardışık faz geçişleri meydana gelir. Bu olaya "çift yeniden girilme topolojisi" denilir. Şekil 3.7 (c)'deki r = -0.5 topolojisine göre, önceki iki şekilde olmayan iki farklı özellik gözlenir: (1) F-P ikinci-derece faz geçiş eğrisi birinci-derece faz geçiş çizgisi üzerindeki ( $d, \theta$ )=(0.262, 0.1198) noktasında son bulur. Bu noktaya kritik son nokta (CEP) denilmektedir. (2) birinci-derece faz geçiş çizgisi, Şekil 3.7 (a)'dakinden farklı olarak F faz bölgesi içinde bir noktada sonlanır. Bu noktaya (C') "iç kritik nokta" denir ve r = 3'teki "dış kritik nokta" yapısına benzer. Son olarak r = -1 seçildiğinde, C' ve CEP noktaları sıkışarak  $\theta = 0$  değerinde üst üste çakışır. Bu özel nokta "sıfır sıcaklık kritik noktası" olarak adlandırılır ve "Z" harfi ile temsil edilir. Z noktasında "tek yeniden girilme kritik çizgisi" son bulur (Şekil 3.7 (d)). Burada özetlediğimiz bilgiler daha kapsamlı ve ayrıntılı şekilde Hoston ve Berker (1991a,b) ve Pawlak vd (2019) tarafından başka r değerlerini kapsayacak şekilde açıklanmıştır.

Yukarıda her iki spin sistemi için sunulan denge özellikleri ile ilgili tüm bilgiler, bu özelliklerinin geometrik analizi için, özellikle Ricci skalerinin indirgenmiş sıcaklığa ve indirgenmiş kristal alana karşı değişiminin araştırılmasında oldukça önemli bir yere sahiptir. Başka bir ifadeyle, bir sonraki bölümde m ve q parametrelerinin  $\theta$  ve d'ye bağlı değişimlerinin Ricci skaleri R'ye yansıtılması ile Şekil 3.3 ve Şekil 3.7'deki faz diyagramlarının geometrik görünümlerinin ortaya çıkarılması sağlanacaktır.

#### 3.2. Riemann Geometrisi

#### 3.2.1. Riemann geometrisinin doğuşu ve gelişimi

Açı, çizgi, yüzey, katı ölçümleri ve aralarındaki ilişkilerle ilginen matematik dalına "geometri" adı verilir. İlk geometri çalışmaları, M.Ö. 300. yüzyıla kadar uzanır ve "Euclid geometrisi" ismiyle bilinir. Euclid-dışı geometriler ise M.S. 19. yüzyılda ortaya çıkmaya başlamıştır. Bunlardan bir tanesi "Riemann geometrisi" dir. Riemann geometrisinin kapsamı, diğer Euclid-dışı geometrilerde (yüzey, hiperbolik, klasik diferansiyel, Gauss) olduğu gibi üç-boyutlu bir Euclid uzayına gömülmüş eğriler ve yüzeylerin diferansiyel ve integral hesaplamaları üzerinedir. Kurucusu, Gauss'un doktora öğrencisi Gerg Friedrich Riemann'dır (1826-1866). Riemann, 1855 yılında vermiş olduğu bir derste Gauss'un fikirleri ışığında "manifold" kavramını ilk defa kullanmış, manifoldlarda tanımlanan farklı metrik ilişkilerinin nasıl olacağını izah etmiştir. Son olarak Riemann, Gauss'un "yüzey eğriliği" kavramını daha yüksek boyutlu manifoldlara genişletmiştir. İlerleyen yıllarda, Riemann geometrisinin kavramları Einstein tarafından Genel Görelilik teorisinin oluşturulmasında kullanılmıştır. Bu geometri, türevlenebilir manifoldlardaki eğri yüzeylerin geometrisi ile ilgilenen özel bir geometri türüdür. Dolayısıyla fizikte pek çok uygulaması vardır.

Bu önemli geometri türünün daha iyi anlaşılması için ilk önce yüzey teorisi üzerinde kısaca durmak gerekir. "Yüzey" kelimesi, geometrinin temel kavramlarından birisidir. Temel geometride düzlemler, yüzeyler ve özel olarak pozitif eğrilikli küre yüzeyi gibi eğri yüzeyler düşünülür. Eğri yüzeyler, nokta veya çizgi kümeleri olarak özel bir yol ile tanımlanır. Genel yüzey kavramı ise bir bölgeyi çevresinden ayıran bir hat olarak düşünülür.

1827 yılında Gauss, yüzey geometrisindeki en önemli kavramı ortaya koydu. Bu kavram, "Eğri yüzeylerinin genel incelenmesi" başlıklı çalışmasında aşağıdaki gibi bir metrik ile yazılmıştır:

$$ds^{2} = G_{11}(u, v)du^{2} + 2G_{12}(u, v)dudv + G_{22}(u, v)dv^{2}.$$
(3.21)

Bu metrik, yüzeyde yerleşmiş ve birbirine sonsuz yakın A ve B gibi iki nokta arasındaki yay uzunluğunun karesinin yüzey koordinatları (u, v) cinsinden bulunmasına yardımcı olur. Dolayısıyla A ve B noktaları arasındaki uzaklık

$$\mathcal{L} = \int_{A}^{B} ds, \qquad (3.22)$$

ile bulunur. Yüzey üzerindeki bir A noktasının uzaydaki konumu (x(u, v), y(u, v), z(u, v))olarak belirtilir. Bu yüzden x, y, z'nin diferansiyel formları

$$dx = \frac{\partial x}{\partial u} du + \frac{\partial x}{\partial v} dv,$$
  

$$dy = \frac{\partial y}{\partial u} du + \frac{\partial y}{\partial v} dv,$$
  

$$dz = \frac{\partial z}{\partial u} du + \frac{\partial z}{\partial v} dv,$$
  
(3.23)

şeklinde yazılır. Bu eşitlikler  $ds^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2$  ile verilen üç-boyutlu Euclid metri-

ğinde yazılırsa metrik

$$ds^{2} = \left(\frac{\partial x}{\partial u}du + \frac{\partial x}{\partial v}dv\right)^{2} + \left(\frac{\partial y}{\partial u}du + \frac{\partial y}{\partial v}dv\right)^{2} + \left(\frac{\partial z}{\partial u}du + \frac{\partial z}{\partial v}dv\right)^{2}, \quad (3.24)$$

halini alır. Parantezler düzenlenerek basitleştirilirse metrik bileşenleri (3.21)'den

$$G_{11} = \left(\frac{\partial x}{\partial u}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial u}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial u}\right)^2,$$
  

$$G_{12} = G_{21} = \frac{\partial x}{\partial u}\frac{\partial x}{\partial v} + \frac{\partial y}{\partial u}\frac{\partial y}{\partial v} + \frac{\partial z}{\partial u}\frac{\partial z}{\partial v},$$
  

$$G_{22} = \left(\frac{\partial x}{\partial v}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial v}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial v}\right)^2,$$
  
(3.25)

olarak ortaya çıkar. İki boyutta bir yüzeyin eğriliği ise köşegen (yani  $G_{12} = 0$  olan) metrikler için

$$R(u,v) = -\frac{1}{\sqrt{G}} \left[ \frac{\partial}{\partial u} \left( \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial G_{22}}{\partial u} \right) + \frac{\partial}{\partial v} \left( \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial G_{11}}{\partial v} \right) \right], \qquad (3.26)$$

bağıntısından kolayca hesaplanabilir. Fakat metrik köşegen değilse ( $G_{12} \neq 0$ ) yüzey eğriliği için

$$R(u,v) = \frac{1}{\sqrt{G}} \left[ \frac{\partial}{\partial u} \left( \frac{G_{12}}{G_{11}\sqrt{G}} \frac{\partial G_{11}}{\partial v} - \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial G_{22}}{\partial u} \right) + \frac{\partial}{\partial v} \left( \frac{2}{\sqrt{G}} \frac{\partial G_{12}}{\partial u} - \frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial G_{11}}{\partial v} - \frac{G_{12}}{G_{11}\sqrt{G}} \frac{\partial G_{11}}{\partial u} \right) \right],$$
(3.27)

formülü kullanılır. Bu iki bağıntıda metriğin determinantı

$$G = \det G_{ij} = G_{11}G_{22} - G_{12}^2, \tag{3.28}$$

şeklindedir. Düzlemde, z=sabit olmak üzere, uzayda yüzey koordinatlarını şu şekilde seçebiliriz: (u, v)=(x, y). Daha sonra (3.24) bağıntısındaki kısmi türevler

$$\frac{\partial x}{\partial u} = \frac{\partial y}{\partial v} = 1, \qquad \frac{\partial x}{\partial v} = \frac{\partial y}{\partial u} = \frac{\partial z}{\partial u} = \frac{\partial z}{\partial v} = 0, \qquad (3.29)$$

olduğundan  $G_{11} = G_{22} = 1$ ,  $G_{12} = G_{21} = 0$  bulunur. Yani metrik katsayıları *xy*-düzlemi için sabittir. Sonuç olarak  $ds^2 = dx^2 + dy^2$  düzlem metriğinden, düzlemde iki nokta arasındaki uzaklığı bulabilmek için kullanılacak formül (3.22) bağıntısından

$$\mathcal{L} = \int_{A}^{B} \left[ \left( \frac{dx}{d\tau} \right)^{2} + \left( \frac{dy}{d\tau} \right)^{2} \right]^{1/2} d\tau, \qquad (3.30)$$

olarak bulunur. Burada  $x = x(\tau)$  ve  $y = y(\tau)$  olup;  $\tau$ , bir eğri parametresidir.

Yarıçapı *a* olan bir küreyi örnek verelim. Enlem açısı  $\psi$ , boylam açısı  $\varphi$  olan herhangi bir A noktasındaki yüzey koordinatları  $(u, v)=(\psi, \varphi)$  olarak seçilirse, A noktasının kartezyen koordinatları şu şekilde yazılır:

$$\begin{aligned} x(\psi,\varphi) &= a \sin \psi \cos \varphi, \\ y(\psi,\varphi) &= a \sin \psi \sin \varphi, \\ z(\psi,\varphi) &= a \cos \psi. \end{aligned}$$
(3.31)

Burada  $-\pi/2 \le \psi < \pi/2$  ve  $0 \le \varphi < 2\pi$ 'dir. Böylece; x, y, z'lerin kısmi türevleri

$$\frac{\partial x}{\partial \psi} = a \cos \psi \cos \varphi, \qquad \frac{\partial x}{\partial \varphi} = -a \sin \varphi \sin \psi, 
\frac{\partial y}{\partial \psi} = a \cos \psi \sin \varphi, \qquad \frac{\partial y}{\partial \varphi} = a \cos \varphi \sin \psi, 
\frac{\partial z}{\partial \psi} = -a \sin \psi, \qquad \frac{\partial z}{\partial \varphi} = 0,$$
(3.32)

şeklinde yazılır. Bu eşitlikleri (3.23)'te yerine yazıp düzenlersek ve  $\sin^2 \varphi + \cos^2 \varphi = 1$ özdeşliğini kullanırsak metrik katsayıları (3.25) bağıntısından  $G_{11} = a^2, G_{12} = G_{21} = 0,$  $G_{22} = a^2 \sin^2 \psi$  olarak bulunur. Sonuç olarak, bir küre üzerindeki metrik

$$ds^2 = a^2 d\psi^2 + a^2 \sin^2 \psi d\varphi^2, \qquad (3.33)$$

şeklini alır. (3.26)'ya göre küre yüzeyinin eğriliği  $R = 2/a^2$  olup yüzey koordinatlarından bağımsızdır. Bu sonuca göre, küre yüzeyinin eğriliği yüzeyin her noktasında aynı pozitif değere sahiptir. Küre yarıçapı  $a \to \infty$  iken  $R \to 0$  olup, düz geometri sözkonusudur.  $a \to 0$  durumunda ise eğrilik skaleri  $R \to \infty$ 'a ıraksayarak bir tekillik özelliği sergilenir.

Riemann, Gauss'un iki boyutlu metrik eşitliğini (3.21), *n*-boyutlu manifoldlara genişleterek *n*-boyutlu manifold kavramını tanımlamıştır. Buna göre, *n*-boyutlu bir uzayda herhangi bir A noktasının koordinatları  $(x^1, x^2, ..., x^n)$  şeklinde ise bu noktanın çok yakınlarında bulunan diğer bir B noktasının koordinatları da  $(x^1 + dx^1, x^2 + dx^2, ..., x^n + dx^n)$ olacaktır. İki nokta arasındaki uzaklığın karesini ifade eden metrik eşitliği

$$ds^2 = G_{ij}dx^i dx^j, aga{3.34}$$

şeklindedir. Burada  $G_{ij}$ ,  $(x^1, x^2, ..., x^n)$  değişkenlerinin bir fonksiyonu olup "metrik tensör" adını alır. A ve B noktaları çakışmadığı sürece,  $dx^i$  bileşenleri kuadratik olduğundan  $ds^2$  daima pozitif değerler alacaktır. (3.34) metriğine "Riemann metriği", bu metrik ile inşa edilen uzaya da "Riemann uzayı" ya da "Riemann manifoldu" denir. *n*-boyutlu Euclid uzayı Riemann uzayının özel bir durumudur. Yani,  $G_{11} = 1, G_{22} = 1, ..., G_{nn} = 1$ , olduğunda  $ds^2 = \sum_{i=j=1}^n dx^i dx^j$  yazılır.

Riemann, Gauss'un fikirlerini genelleştirmeye devam ederek kendi adıyla anılan uzayın kendine özgün geometrisini tanımlamayı sürdürür. Bu bağlamda, "Gauss eğriliği" kavramında olduğu gibi, "Riemann eğriliği" veya "Eğrilik skaleri" kavramının Riemann uzayının Euclid uzayından ne kadar farklılaştığının bir ölçüsü olduğu şeklinde bir düşünce geliştirir. Euclid uzayında, Riemann eğrilik niceliğinin her noktada sıfır olduğunu düşünür. İki boyuttaki yüzeylerdeki gibi temel geometrik değişmez eğrilik niceliğidir (R). Ancak, R daha yüksek boyutlarda (n > 2) daha karmaşık hale gelir. Çünkü manifold birçok doğrultuda eğri bir uzaydır. Dolayısıyla R noktadan noktaya değişir. Yüzey geometrisinde olduğu gibi, Riemann geometrisinin gelişiminde eğrilik skaleri temel kaynaktır.

İki ya da daha fazla boyutlu uzayların eğrilik skaleri türetilirken genel bir formülasyon kullanılır. Bu formülasyona göre, öncelikle  $G_{ij}$  metrik tensör bileşenlerinden yararlanarak

$$\Gamma_{jk}^{i} = \frac{1}{2} G^{il} (\partial_k G_{lj} + \partial_j G_{lk} - \partial_l G_{jk}), \qquad (3.35)$$

ile 2. tür Christoffel sembolleri (bağlantı katsayıları) elde edilir (Ruppeiner ve Davis 1990). Burada  $G^{ij}$  kontravaryant metrik tensör bileşeni olup,  $G_{ij}$  kovaryant metrik tensörünün tersidir ( $G_{ik}G^{kj} = \delta_i^j$ ). İkinci adımda, Christoffel sembollerinden ve aşağıdaki eşitlikten yararlanarak dördüncü ranktan Riemann tensörü bulunur:

$$R^{i}_{jkl} = \partial_k \Gamma^{i}_{jl} - \partial_l \Gamma^{i}_{jk} + \Gamma^{i}_{mk} \Gamma^{m}_{jl} - \Gamma^{i}_{ml} \Gamma^{m}_{jk} \,. \tag{3.36}$$

Daha sonra (3.36) ile verilen  $R_{jkl}^i$  Riemann tensörü yardımı ile ikinci ranktan Ricci tensörü tespit edilir:

$$R_{ij} = R_{inj}^n. aga{3.37}$$

Son bir kontraksiyon işlemi yapılarak da Ricci skaleri türetilir:

$$R = G^{ij}R_{ij} = R^i_i. (3.38)$$

Burada, üst indis ve alt indis aynı olduğu için bu indisler üzerinden toplam alınmaktadır (Einstein toplam kuralı). R = 0 durumu düz bir geometriye karşılık gelir. R > 0 veya R < 0 olduğu zaman düz olmayan bir metrik ve bir eğri uzay ile karşılaşırız. (3.35)-(3.38)'de kısaca bahsettiğimiz formülasyonun, matematiksel açıdan ilk ve basit uygulaması olarak yine küre yüzeyinin eğriliğinin bulunması gösterilecektir. Bu bağlamda, küresel koordinatlarda *a* bir noktanın orijine olan uzaklığını,  $\psi$  enlem açısını ve  $\varphi$ boylam açısını göstermek üzere  $(x^1, x^2, x^3)=(a, \psi, \varphi)$  uzayında, üç-boyutlu metrik şöyledir:

$$ds^{2} = da^{2} + a^{2}d\psi^{2} + a^{2}\sin^{2}\psi d\varphi^{2}.$$
(3.39)

Küre yüzeyi için *a* sabit alınır. Dolayısıyla üç boyutlu uzay iki boyutlu  $(u, v)=(\psi, \varphi)$  yüzeyine, metrik de Eşitlik (3.33)'te verilen şekle dönüşür. Küre yüzeyi için kovaryant ve kontravaryant metrik tensör bileşenleri sırasıyla  $x^1 = \psi$  ve  $x^2 = \varphi$  olmak üzere,

$$G_{ij} = \begin{bmatrix} a^2 & 0\\ 0 & a^2 \sin^2 \psi \end{bmatrix}, \qquad (3.40)$$

ve

$$G^{ij} = \begin{bmatrix} \frac{1}{a^2} & 0\\ 0 & \frac{1}{a^2 \sin^2 \psi} \end{bmatrix},$$
 (3.41)

şeklindedir. Sıfır olmayan bağlantı katsayıları Eşitlik (3.35) yardımıyla aşağıdaki gibi hesaplanır:

$$\Gamma_{22}^{1} = -\sin\psi\cos\psi, \qquad \Gamma_{12}^{2} = \Gamma_{21}^{2} = \cot\psi.$$
(3.42)

(3.36) ve (3.37) kullanılarak sıfırdan farklı Riemann ve Ricci tensör bileşenleri sırasıyla

$$R_{121}^2 = \frac{1}{a^2}G_{11} = 1, \qquad R_{212}^1 = \frac{1}{a^2}G_{22} = \sin^2\psi.$$
 (3.43)

$$R_{11} = 1, \qquad R_{22} = \sin^2 \psi. \tag{3.44}$$

olarak belirlenir. Son bir kontraksiyon işlemi ile küre yüzeyinin eğriliği bulunur:

$$R = \frac{2}{a^2}.\tag{3.45}$$

Bu sonuç (3.26) ile bulunanla aynıdır.

# 3.2.2. Riemann geometrisinin termodinamiğe uyarlanması ve termodinamik eğrilik kavramının ortaya çıkışı

Günümüzde, Riemann geometrisinin termodinamikte kullanılması uzun ve başarılı bir yöntem haline gelmiştir. Böylece "Termodinamik Geometri" olarak bilinen bir araştırma sahası ortaya çıkmıştır. Öncelikle, saf geometrideki "uzay" kavramı yerine termodinamik geometride "durum uzayı" veya "parametre uzayı" kavramı kendini gösterir. Dolayısıyla parametre uzayının eğriliği "termodinamik eğrilik" adını alır. Bu niceliğe "Riemann eğrilik skaleri" veya kısaca "Ricci skaleri" de denilmektedir. Aşağıda, Ricci skalerine değinmeden önce termodinamik durum uzayları ve metrik yazılması üzerinde kısaca durulacaktır.

 $\mathcal{N}$  parçacıktan oluşan ve kimyasal potansiyeli  $\mu$  olan aynı türden veya farklı  $\mu$  değerlerine sahip değişik parçacık türlerinden meydana gelen fiziksel bir sistemin termodinamik durum uzayı, birbirinden bağımsız (n+1) tane yaygın türden termodinamik değişkenden oluşan bir parametere takımı  $E = (E^0, E^1, E^2, ..., E^n)$  (örneğin  $U, S, V, \mathcal{N}, M,$ Q, ...) veya birbirinden bağımsız (n + 1) tane yoğun türden termodinamik değişkenden oluşan bir başka parametre takımı  $I = (I^0, I^1, I^2, ..., I^n)$  (örneğin  $T, P, \mu, H, D, ...$ ) ile temsil edilir. Böyle bir uzaya (n + 1)-boyutlu Riemann manifoldu da denir. Bu uzayda sonsuz küçük yay uzunluğu veya birbirine çok yakın iki nokta arasındaki uzaklık, bir metrik tensör kullanılarak aşağıdaki gibi belirlenir:

$$ds_E^2 = G_{ij} dE^i dE^j, aga{3.46}$$

$$ds_I^2 = \tilde{G}_{kl} dI^k dI^l. \tag{3.47}$$

Burada i, j, ... = 1, 2, ..., n alınmaktadır. Kovaryant metrik tensör bileşenlerinin ( $G_{ij}, \tilde{G}_{kl}$ ) belirlenmesi için termodinamik geometride iki faklı tanım yapılmıştır. Weinhold (1975)'e göre  $G_{ij}$  metrik bileşenleri, iç enerjinin Hessian matrisi olarak görülür. Yani

$$G_{ij} = \partial_i \partial_j U, \qquad \partial_i = \partial/\partial E^i,$$
(3.48)

şeklindedir. Ruppeiner (1995)'e göre ise  $G_{ij}$ ,  $\rho = (U/N, E^1/N, ..., E^n/N)$  veya  $\rho = (U/V, E^1/V, ..., E^n/V)$  koordinatları kullanılarak aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$G_{ij} = (k_B T)^{-1} \partial_i \partial_j e, \qquad G_{ij} = -k_B^{-1} \partial_i \partial_j \sigma, \qquad \partial_i = \partial/\partial \rho^i.$$
 (3.49)

Burada e = U/N (veya e = U/V),  $\sigma = S/N$  (ya da  $\sigma = S/V$ ). Legendre dönüşümleri altında (3.47) ile ilişkili yeni Ruppeiner metrikleri de yazılabilir. Örneğin termodinamik durum uzayı  $\Phi = (1/T, I^1/T, ..., I^n/T)$  şeklinde entropi gösterimindeki termodinamik değişkenlerle temsil edilirse geçerli olan metrik şöyle olur:

$$ds_{\Phi}^{2} = (k_{B}^{-1}\partial_{k}\partial_{l}f)d\Phi^{k}d\Phi^{l}, \qquad \partial_{k} = \partial/\partial\Phi^{k}.$$
(3.50)

Burada f termodinamik potansiyeli (hacim başına ya da parçacık başına serbest enerjiyi) temsil eder ve

$$f(\Phi) = \sigma - \sum_{k=1}^{n} \Phi^k \rho^k , \qquad (3.51)$$

şeklinde verilir. Diğer taraftan,  $I = (T, I^1, I^2, ... I^n)$  koordinatları termodinamik durum uzayı olarak seçilirse (3.47)'deki metrik

$$ds_I^2 = \left( \left( -k_B T \right)^{-1} \partial_k \partial_l g \right) dI^k dI^l, \qquad \partial_k = \partial/\partial I^k, \tag{3.52}$$

olarak yazılır. (3.52)'deki g potansiyeli aşağıdaki gibidir:

$$g(I) = e - T\sigma - \sum_{k=1}^{n} I^{k} \rho^{k}.$$
(3.53)

Ruppeiner'ın dördüncü tür metrik gösterimi önceki üç termodinamik manifolddan farklı olarak  $(T, \rho^1, ..., \rho^n)$  uzayında tanımlanır:

$$ds_{\rho}^{2} = (k_{B}T)^{-1} \left( \partial_{T}\sigma dT^{2} + \sum_{i,j=1}^{n} \partial_{j}I^{i}d\rho^{i}d\rho^{j} \right), \qquad \partial_{T} = \partial/\partial T.$$
(3.54)

Yukarıdaki tüm metrik tanımlamaları *n*-boyutlu termodinamik uzaylar için Çizelge 3.1'de, iki-boyutlu termodinamik yüzeyler için de Çizelge 3.2'de özetlendi. Çizelge 3.2'deki gibi iki-boyutlu termodinamik uzaylar için eğrilik skalerinin kolayca türetilebildiği bağıntı şöyledir:

$$R = -\frac{1}{2G^2} \begin{vmatrix} \partial_i^2 \phi & \partial_i \partial_j \phi & \partial_j^2 \phi \\ \partial_i^3 \phi & \partial_i^2 \partial_j \phi & \partial_i \partial_j^2 \phi \\ \partial_i^2 \partial_j \phi & \partial_i \partial_j^2 \phi & \partial_j^3 \phi \end{vmatrix} .$$
(3.55)

İki-parametreli spin modellerinin termodinamik eğrilik hesabı genellikle (3.55)'ten yararlanılarak yapılmıştır (Janyszek ve Mrugala 1989; Janke vd 2002; Janke vd 2003; Janke vd 2004; Heidari ve Ghorbani 2012; Mirza ve Talaei 2013; Ruppeiner ve Belliucci 2015).

Koordinatlar	Potansiyel ( $\phi$ )	Metrik ( $ds^2$ )
$(\sigma,  ho^1,,  ho^n)$	e	$\frac{1}{k_BT} \frac{\partial^2 e}{\partial  ho^i \partial  ho^j} d ho^i d ho^j$
$(e,\rho^1,,\rho^n)$	σ	$-rac{1}{k_B}rac{\partial^2\sigma}{\partial ho^i\partial ho^j}d ho^id ho^j$
$(\Phi^0, \Phi^1,, \Phi^n)$	$f = \sigma - \Phi^k \rho^k$	$rac{1}{k_B} rac{\partial^2 f}{\partial \Phi^k \partial \Phi^l} d\Phi^k d\Phi^l$
$(T, I^1, \dots, I^n)$	$g = e - T\sigma - I^k \rho^k$	$-\frac{1}{k_BT} \frac{\partial^2 g}{\partial I^k \partial I^l} dI^k dI^l$
$(T, \rho^1,, \rho^n)$	$e-T\sigma$	$\frac{1}{k_BT} \left( \frac{\partial \sigma}{\partial T} dT^2 + \frac{\partial I^i}{\partial \rho^j} d\rho^i d\rho^j \right)$

**Çizelge 3.1.** Dört farklı *n*-boyutlu termodinamik koordinat sisteminde termodinamik potansiyel ve metrik tanımları (Ruppeiner 1995)

**Çizelge 3.2.** Dört farklı iki-boyutlu termodinamik koordinat sisteminde potansiyel (serbest enerjiler) ve metrik bileşenleri (Ruppeiner 2012)

Koordinatlar	Potansiyel ( $\phi$ )	$G_{11}$	$G_{12}$	$G_{22}$
$(S, \mathcal{N})$	$U(S, \mathcal{N}, V)$	$\frac{1}{k_BTV}\frac{\partial^2 U}{\partial S^2}$	$\frac{1}{k_B T V} \frac{\partial^2 U}{\partial S \partial \mathcal{N}}$	$\frac{1}{k_B T V} \frac{\partial^2 U}{\partial \mathcal{N}^2}$
$(U, \mathcal{N})$	$S(U, \mathcal{N}, V)$	$-\frac{1}{k_BV}\frac{\partial^2 S}{\partial U^2}$	$-\frac{1}{k_B V} \frac{\partial^2 S}{\partial U \partial \mathcal{N}}$	$-\frac{1}{k_B V} \frac{\partial^2 S}{\partial \mathcal{N}^2}$
(T, -P)	$\mathcal{G}(T, P, \mathcal{N}) = U - TS + PV$	$-rac{1}{k_BTV}rac{\partial^2 \mathcal{G}}{\partial T^2}$	$-\frac{1}{k_BTV}\frac{\partial^2 \mathcal{G}}{\partial T\partial P}$	$-rac{1}{k_BTV}rac{\partial^2 \mathcal{G}}{\partial P^2}$
$(T,\mu)$	$\Omega(T,\mu,V) = U - TS - \mu \mathcal{N}$	$-\frac{1}{k_BTV}\frac{\partial^2\Omega}{\partial T^2}$	$-\frac{1}{k_BTV}\frac{\partial^2\Omega}{\partial T\partial\mu}$	$-rac{1}{k_BTV}rac{\partial^2\Omega}{\partial\mu^2}$
$(T, \mathcal{N})$	$F(T, \mathcal{N}, V) = U - TS$	$-\frac{1}{k_BTV}\frac{\partial^2 F}{\partial T^2}$	0	$\frac{1}{k_B T V} \frac{\partial^2 F}{\partial \mathcal{N}^2}$

Diğer taraftan (3.26) veya (3.27) ile yapılan eğrilik hesabı ise genellikle iki parametrenin kullanıldığı akışkan sistemlerde daha yaygın olarak tercih edilen bir yöntemdir (May ve Mausbach 2012; Ruppeiner 2012; Ruppeiner vd 2012; May vd 2015; Ruppeiner vd 2015).

Yukarıda kısaca özetlenen termodinamik metodoloji ile ilgili literatürde verilen ilk ve basit iki uygulama "ideal gaz" ve "paramanyetik gaz" sistemleridir. Bu kapsamda basıncı P, hacmi V ve sıcaklığı T olan bir ideal gaz için yapılan ilk geometri çalışmasında (Mijatović vd 1987) manifold olarak iki-boyutlu  $(I^1, I^2) = (T, -P)$  uzayı seçilmiştir.  $G_{ij}$ kovaryant metrik tensörü, termodinamikteki Gibbs serbest enerjisi  $\mathcal{G} = \mathcal{G}(T, -P)$  ve aşağıdaki Maxwell eşitliği

$$\frac{\partial^2 \mathcal{G}}{\partial T \partial P} = -\left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_T = \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P,\tag{3.56}$$

yardımıyla

$$G_{ij} = -\partial_i \partial_j \mathcal{G} = \begin{bmatrix} \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_P & -\left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_T \\ \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P & -\left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T \end{bmatrix},$$
(3.57)

formunda yazılabilir. Burada  $\partial_i = \partial/\partial i = (\partial/\partial T, -\partial/\partial P)$ 'dir. Eşitlik (3.57)'den de  $G^{ij}$  kontravaryant metrik tensör

$$G^{ij} = \begin{bmatrix} \left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_V & -\left(\frac{\partial P}{\partial S}\right)_V \\ \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S & -\left(\frac{\partial P}{\partial S}\right)_T \end{bmatrix},$$
(3.58)

şeklindedir. İdeal gazın bir özel durumunda  $\mathcal{R}$  evrensel gaz sabiti,  $T_0$  ve  $P_0$  sıcaklık ve basınç için iki sabit değer olmak üzere entropi ve hacim

$$S = S_0 + \mathcal{R}\left[\frac{5}{2}\ln\left(\frac{T}{T_0}\right) - \ln\left(\frac{P}{P_0}\right)\right],\tag{3.59}$$

$$V = \mathcal{R}\frac{T}{P}, \qquad (3.60)$$

bağıntıları ile bulunur. Bu bağıntılar yardımıyla Eşitlik (3.57) ve (3.58)'deki tensör ifadeleri

$$G_{ij} = \begin{bmatrix} \frac{5\mathcal{R}}{2T} & \frac{\mathcal{R}}{P} \\ \frac{\mathcal{R}}{P} & \frac{\mathcal{R}T}{P^2} \end{bmatrix}, \qquad G^{ij} = \begin{bmatrix} \frac{2T}{3\mathcal{R}} & -\frac{2P}{3\mathcal{R}} \\ -\frac{2P}{3\mathcal{R}} & \frac{5P^2}{3\mathcal{R}T} \end{bmatrix},$$
(3.61)

olarak elde edilir. Daha sonra Eşitlik (3.61)'deki metrik tensör bileşenlerinden ve (3.35)'ten yararlanarak bağlantı katsayıları

$$\Gamma_{11}^{1} = -\frac{5}{6T}, \qquad \Gamma_{12}^{1} = \Gamma_{21}^{1} = -\frac{1}{3P}, \qquad \Gamma_{22}^{1} = -\frac{1}{3}\frac{T}{P^{2}}, 
\Gamma_{11}^{2} = \frac{5}{6}\frac{P}{T^{2}}, \qquad \Gamma_{12}^{2} = \Gamma_{21}^{2} = \frac{5}{6T}, \qquad \Gamma_{22}^{2} = \frac{4}{3P},$$
(3.62)

şeklinde ortaya çıkar. (3.62) eşitliği, (3.36)'da yerine yazılarak tüm Riemann tensör bileşenlerinin

$$R^{i}_{jkl} = 0,$$
  $(i, j, k, l = 1, 2),$  (3.63)

olduğu görülür. Benzer şekilde (3.37) eşitliğinden faydalanarak tüm Ricci tensör bileşenlerinin de sıfır olduğu anlaşılır:

$$R_{ij} = 0,$$
  $(i, j = 1, 2).$  (3.64)

Böylece, ideal gaz için Ricci eğrilik skaleri

$$R(T, -P) = 0, (3.65)$$

olarak tespit edilir. Yani ideal gaz için eğrilik skaleri sıfır olup (T, -P) uzayı beklendiği gibi düz bir termodinamik uzaydır. İkinci uygulama olan paramanyetik gaz sistemine ait matematiksel işlemler, seçilen termodinamik uzayın üç boyutlu  $(\mathcal{M} \equiv (T, -P, H))$  olmasından dolayı daha detaylı ve uzundur. Bu nedenle, yapılan işlemler buraya alınmadı. Gerekli bilgi için Mijatović vd 1987 incelenebilir.

#### 4. BULGULAR VE TARTIŞMA

# 4.1. Spin-1 BEG Sistemleri İçin Termodinamik Parametre Uzayı Seçimi ve Metrik Yazılması

Riemann geometrisini spin-1 BEG sistemlerine uygulamak için öncelikle bir termodinamik parametre uzayı ( $\mathcal{M}$ ) seçimi gerekir. Eşitlik (3.5) ve (3.15)'teki serbest enerji ifadelerine göre, on iki farklı manifold tanımlanabilir. Bunlardan on tanesi iki-boyutlu bir termodinamik yüzey, iki tanesi ise üç-boyutlu bir termodinamik uzaydır. İki-boyutlu (h, m), (h, q), (-d, m) ve (-d, q) yüzeyleri için Çizelge 3.1'e göre uygun bir termodinamik potansiyel tanımı olmadığından metrik yazılamamaktadır. Ancak, iki-boyutlu (h, -d), ( $\theta, h$ ), ( $\theta, -d$ ), ( $\theta, m$ ), ( $\theta, q$ ), (m, q) yüzeylerinden herhangi birinin seçilmesi durumunda ise Çizelge 3.1'deki bilgiler ışığında Çizelge 4.1'de verilen potansiyeller ve metrikler elde edilmiştir. Buna göre;  $e = e(m, q), \sigma = \sigma(m, q)$  ve serbest enerji  $\theta, h$  ve d'nin bir lineer fonksiyonu olmasından dolayı metrik hesabı çok basit hale gelmektedir (Çizelge 4.2). Yani Çizelge 4.2'deki metrik değerlerinden kolayca görülebileceği üzere, tablodaki ilk dört termodinamik yüzey için hesaplanan G determinantı sıfır olup dejenere durumlar sözkonusudur ve ilgili uzay için herhangi bir termodinamik eğrilik hesaplanamamaktadır. Dolayısıyla mevcut spin sistemlerinde meydana gelen faz geçişlerinin geometrik analizi

<b>Çizelge 4.1.</b> Spin-1 BEG sistemlerinde,	iki-boyutlu 6 farkl	ı koordinat için	ı termodinamik
potansiyel tanımı ve metrik yazılması			

Koordinatlar	Potansiyel ( $\phi$ )	Metrik ( $ds^2$ )
(h, -d)	e	$\frac{1}{\theta} \left( \frac{\partial^2 e}{\partial h^2} dh^2 + 2 \frac{\partial^2 e}{\partial h \partial d} dh dd + \frac{\partial^2 e}{\partial d^2} dd^2 \right)$
(h, -d)	σ	$-\frac{1}{k_B} \left( \frac{\partial^2 \sigma}{\partial h^2} dh^2 + 2 \frac{\partial^2 \sigma}{\partial h \partial d} dh dd + \frac{\partial^2 \sigma}{\partial d^2} dd^2 \right)$
$(\theta, h)$	$e - \theta \sigma$	$-rac{1}{ heta}\left(rac{\partial\sigma}{\partial heta}d heta^2+rac{\partial m}{\partial h}dh^2 ight)$
$(\theta, -d)$	$e - \theta \sigma$	$-\frac{1}{ heta}\left(rac{\partial\sigma}{\partial heta}d heta^2+rac{\partial q}{\partial d}dd^2 ight)$
$(\theta,m)$	$g = e - \theta \sigma - mh$	$-\frac{1}{\theta} \left( \frac{\partial^2 g}{\partial \theta^2} d\theta^2 + 2 \frac{\partial^2 g}{\partial \theta \partial m} d\theta dm + \frac{\partial^2 g}{\partial m^2} dm^2 \right)$
$(\theta,q)$	$g = e - \theta \sigma + qd$	$-\frac{1}{\theta} \left( \frac{\partial^2 g}{\partial \theta^2} d\theta^2 + 2 \frac{\partial^2 g}{\partial \theta \partial q} d\theta dq + \frac{\partial^2 g}{\partial q^2} dq^2 \right)$
(m,q)	$g = e - \theta \sigma - mh + qd$	$-\frac{1}{\theta} \left( \frac{\partial^2 g}{\partial m^2} dm^2 + 2 \frac{\partial^2 g}{\partial m \partial q} dm dq + \frac{\partial^2 g}{\partial q^2} dq^2 \right)$

bu metrikler ile mümkün olmamaktadır. Ancak,  $(\theta, h)$  ve  $(\theta, -d)$  yüzeylerinin eğrilikleri  $(\theta, h, -d)$  uzayının iki farklı kesitsel eğriliği şeklinde yorumlanıp üç-boyutlu uzayın eğriliğinden yararlanılarak yakın zamanda çalışıldı (Sanwari ve Sahay 2022b). Ayrıca, çizelgenin beşinci satırındaki ( $\theta$ , m) koordinatları seçilmesi, q düzleminde tanımlanan bir geometriye yol açar. m-geometrisi de denilen bu yapıda hesaplanması gereken eğrilik  $R_m$ ile temsil edilir. Benzer şekilde, çizelgenin altıncı satırında yer alan ( $\theta$ , q) koordinatlarının termodinamik yüzey olarak belirlenmesi ile m düzlemindeki bir geometriden (yani qgeometrisinden) söz edilir ve  $R_q$  eğriliği kullanılır. Burada  $G_{11} = 0$  olmasından dolayı  $R_m$  ve  $R_q$  kolayca bulunabilmektedir. Diğer taraftan, üç boyutlu ( $\theta$ , m, q) veya ( $\theta$ , h, -d) uzaylarından herhangi birinin kullanılması durumu ise (3.35)-(3.38) eşitliklerine göre çok uzun matematiksel işlem gerektiğinden teze dahil edilmedi. Böylece, modeldeki faz geçişlerinin basit olmayan bir geometrik analizi için Çizelge 4.2'nin son satırındaki Ruppeiner metrik tanımının kullanılması zorunlu olmuştur. Bu nedenle, (m, q) yüzeyindeki sonsuz küçük çizgi uzunluğu için metrik ifadesi (3.21) yardımıyla şöyle yazılır:

$$ds^{2} = G_{11}(m,q)dm^{2} + 2G_{12}(m,q)dmdq + G_{22}(m,q)dq^{2}.$$
(4.1)

(4.1)'deki metrik bileşenlerinin hesaplanması için en uygun potansiyel ise Çizelge 3.1

**Çizelge 4.2.** Spin-1 BEG sistemlerinde, iki-boyutlu 6 farklı koordinat için Ruppeiner metriği ve termodinamik eğrilik. Türevler denge durumlarında alınır

	$G_{11}$	$G_{12}$	$G_{22}$	G	R
(h, -d)	0	0	0	0	_
(h, -d)	0	0	0	0	_
$(\theta, h)$	0	0	$-\frac{1}{\theta}\frac{\partial m}{\partial h}$	0	_
$(\theta, -d)$	0	0	$-rac{1}{ heta}rac{\partial q}{\partial d}$	0	_
$(\theta,m)$	0	$\frac{1}{\theta} \frac{\partial \sigma}{\partial m}$	$-rac{1}{ heta}rac{\partial^2 g}{\partial m^2}$	$G_m$	$R_m$
$(\theta,q)$	0	$\frac{1}{\theta} \frac{\partial \sigma}{\partial q}$	$-rac{1}{ heta}rac{\partial^2 g}{\partial q^2}$	$G_q$	$R_q$
(m,q)	$-rac{1}{ heta}rac{\partial^2 g}{\partial m^2}$	$-rac{1}{ heta}rac{\partial^2 g}{\partial m\partial q}$	$-rac{1}{ heta}rac{\partial^2 g}{\partial q^2}$	$G_{mq}$	$R_{mq}$

ve Çizelge 4.1'e göre  $\phi(I^1, I^2) = g(m, q)$  olup g'nin açık ifadesi her iki spin sistemi için ayrı ayrı (3.5) ve (3.15)'te verilmiştir. Aşağıda, Sanwari ve Sahay (2022b) tarafından "mq" metriği olarak da adlandırılan (m, q) yüzeyine ait metrik bileşenleri ve bu bileşenler ışığında eğrilik skaleri  $(R = R_{mq} \neq 0)$  türetilerek analizi yapılacaktır.

# 4.2. İzotropik BEG Modeli İçin Ricci Skalerinin Türetilmesi ve Geometrik Faz Diyagramı

Kesim 4.1'deki bilgiler ışığında, izotropik spin-1 BEG modeli için metrik tensör bileşenleri şöyle hesaplandı:

$$G_{11} = -\frac{1}{\theta} \frac{\partial^2 g}{\partial m^2} = \frac{(18q^2 - 18m^2 + 24q + 8)\alpha - (9q + 6)\theta}{(2 + 3m + 3q)(2 - 3m + 3q)\theta},$$
(4.2)

$$G_{12} = G_{21} = -\frac{1}{\theta} \frac{\partial^2 g}{\partial m \partial q} = \frac{9m}{(2+3m+3q)(2-3m+3q)},$$
(4.3)

$$G_{22} = -\frac{1}{\theta} \frac{\partial^2 g}{\partial q^2} = \frac{(-27m^2 + 27q + 18)\theta + 54q^3 - 54qm^2 + 54q^2 + 18m^2 - 8}{(2 + 3m + 3q)(-1 + 3q)(2 - 3m + 3q)\theta}.$$
 (4.4)

Yukarıda elde edilen köşegen olmayan metrik bileşenleri (3.27) veya (3.55) ifadelerinde yerine yazılarak Ricci skaleri kolayca bulunabilir. Ancak, tezde genel formülasyon takip edilerek R için (3.35)-(3.38) bağıntılarında verilen basamaklar kullanıldı. İlerleyen zamanlarda üç ve daha büyük boyutlu ( $n \ge 3$ ) termodinamik uzayların Ricci skaleri türetilirken genel formülasyona ihtiyaç olacağından bu gibi araştırmalara öncülük etmesi amacıyla (m, q) uzayında Ricci eğriliği genel formülasyon çerçevesinde bulunmuştur. Böylece, (4.2)-(4.4) bileşenleri (3.35) tanımında kullanılarak Christoffel sembolleri elde edildi:

$$\Gamma_{11}^{1} = -\frac{27}{2} \frac{(36q^2 + 9q\theta + 12q + 15\theta - 8)\theta m}{\mathcal{A}}, \qquad (4.5)$$

$$\Gamma_{12}^{1} = \Gamma_{21}^{1} = \frac{9}{2} \frac{(54q^{3} + 54qm^{2} + 27m^{2}\theta + 54q^{2} + 27q\theta - 18m^{2} + 18\theta - 8)\theta}{\mathcal{A}}, \quad (4.6)$$

$$\Gamma_{22}^{1} = -\frac{27}{2} \frac{(108q^{3} + 27m^{2}\theta - 36q - 27\theta + 8)\theta m}{(3q - 1)\mathcal{A}}, \qquad (4.7)$$

$$\Gamma_{11}^{2} = \frac{9}{2} \frac{(3q-1)(18q^{3}\alpha + 18m^{2}\alpha - 9q\theta + 24q\alpha - 6\theta + 8\alpha)\theta}{\mathcal{A}}, \qquad (4.8)$$

$$\Gamma_{12}^2 = \Gamma_{21}^2 = -\frac{27}{2} \frac{(3q-1)(12q\alpha - 3\theta + 8\alpha)\theta m}{\mathcal{A}}, \qquad (4.9)$$

$$\Gamma_{22}^2 = -\frac{27}{2} \frac{\mathcal{B}\theta}{(3q-1)\mathcal{A}}.$$
(4.10)

### Burada $\mathcal{A}$ ve $\mathcal{B}$ 'nin gösterimi

$$\mathcal{A} = 972q^{5}\alpha - 1944q^{3}m^{2}\alpha - 486q^{2}m^{2}\theta\alpha + 972qm^{4}\alpha + 486m^{4}\theta\alpha - 486q^{4}\theta + 2268q^{4}\alpha + 486q^{3}\theta\alpha + 486q^{2}m^{2}\theta - 1944q^{2}m^{2}\alpha - 1134qm^{2}\theta\alpha - 324m^{2}\alpha - 810q^{3}\theta + 1728q^{3}\alpha - 243m^{2}\theta^{2} + 972q^{2}\theta\alpha + 162qm^{2}\theta + 243m^{2}\theta^{2} - 540m^{2}\theta\alpha - 324q^{2}\theta + 288q^{2}\alpha - 324q\theta^{2} + 648q\theta\alpha - 108m^{2}\theta + 288m^{2}\alpha + 72q\theta - 192q\alpha - 108\theta^{2} + 144\theta\alpha + 48\theta - 64\alpha,$$
(4.11)

$$\mathcal{B} = -162q^2m^2\alpha + 54m^2\alpha + 108q^3\alpha + 27qm^2\theta - 108qm^2\alpha - 54q^2\theta + 162q^2\alpha + 18m^2\theta - 54m^2\alpha - 45q\theta + 72q\alpha - 6\theta + 8\alpha,$$
(4.12)

şeklindedir. Daha sonra, yukarıdaki Christoffel sembolleri (3.36)'da yerine yazılarak sıfırdan farklı Riemann tensör bileşenleri

$$R_{121}^2 = -\frac{81}{4} \frac{\mathcal{E}}{\mathcal{F}} \theta^2 \,, \tag{4.13}$$

$$R_{112}^{1} = R_{221}^{2} = -\frac{729}{4} \frac{m\theta^{3}(18m^{2}\alpha + 18q^{2} + 36q\alpha - 12q + 6\alpha - 9\theta + 2)}{\mathcal{F}}, \quad (4.14)$$

$$R_{212}^{1} = -\frac{81}{4} \frac{\mathcal{J}}{\mathcal{F}} \theta^{2} , \qquad (4.15)$$

olarak bulundu. Ricci tensör bileşenleri ise eşitlik (3.37) yardımıyla şu şekilde elde edildi:

$$R_{11} = -\frac{81}{4} \frac{\mathcal{E}}{\mathcal{F}} \theta^2 \,, \tag{4.16}$$

$$R_{12} = R_{21} = -\frac{729}{4} \frac{18m^2\alpha + 18q^2 + 36q\alpha - 12q + 6\alpha - 9\theta + 2}{\mathcal{F}} m\theta^3, \qquad (4.17)$$

$$R_{22} = -\frac{81}{4} \frac{\mathcal{K}}{\mathcal{F}(3q-1)} m\theta^2 \,. \tag{4.18}$$

Yukarıdaki ifadelerde notasyonu basitleştirmek ve hesaplamaları kolaylaştırmak için  $\mathcal{E}$ ,  $\mathcal{F}$ ,  $\mathcal{J}$  ve  $\mathcal{K}$  sembolleri kullanıldı. Bu semboller sırasıyla şöyle tanımlanır:

$$\mathcal{E} = 324q^2m^2\alpha^2 - 324m^4\alpha^2 + 324q^4\alpha + 648q^3\alpha^2 - 324q^2m^2\alpha - 216qm^2\alpha^2 - 162qm^2\alpha\theta + 216q^3\alpha - 162q^3\theta + 972q^2\alpha^2 - 486q^2\alpha\theta + 216qm^2\alpha + 36m^2\alpha^2 + 54m^2\alpha\theta - 108q^2\alpha + 432q\alpha^2 - 486q\alpha\theta + 81q\theta^2 - 36m^2\alpha - 48q\alpha + 54q\theta + 48\alpha^2 - 108\alpha\theta + 54\theta^2 + 16\alpha - 12\theta ,$$
(4.19)

$$\mathcal{F} = (972q^{5}\alpha - 1944q^{3}m^{2}\alpha - 486q^{2}m^{2}\alpha\theta + 972qm^{2}\alpha + 486m^{4}\alpha\theta + 2268q^{4}\alpha - 486q^{4}\theta + 486q^{3}\alpha\theta - 1944q^{2}m^{2}\alpha + 486q^{2}m^{2}\theta - 1134qm^{2}\alpha\theta - 324m^{2}\alpha + 1728q^{3}\alpha - 810q^{3}\theta + 972q^{2}\alpha\theta - 243q^{2}\theta^{2} + 162qm^{2}\theta - 540m^{2}\alpha\theta + 243m^{2}\theta^{2} + 288q^{2}\alpha - 324q^{2}\theta + 648q\alpha\theta - 324q\theta^{2} + 288m^{2}\alpha - 108m^{2}\theta - 192q\alpha + 72q\theta + 144\alpha\theta - 108\theta^{2} - 64\alpha + 48\theta)(108q^{3}\alpha - 108qm^{2}\alpha - 54m^{2}\alpha\theta + 108q^{2}\alpha - 54q^{2}\theta + 54q\alpha\theta + 36m^{2}\alpha - 18q\theta + 36\alpha\theta - 27\theta^{2} - 16\alpha + 12\theta),$$
(4.20)

$$\mathcal{J} = 972q^{3}m^{2}\alpha - 972qm^{4}\alpha - 486m^{4}\alpha\theta + 972q^{5} + 1944q^{4}\alpha - 972q^{3}m^{2}\alpha - 972q^{2}m^{2}\alpha - 486q^{2}m^{2}\theta - 486qm^{2}\alpha\theta + 3242m^{4}\alpha + 324q^{4} - 2268q^{3}\alpha + 972q^{2}m^{2} + 972q^{2}\alpha\theta + 324qm^{2}\alpha + 810qm^{2}\theta + 162m^{2}\alpha\theta + 243m^{2}\theta^{2} - 540q^{3} + 324q^{2}\alpha - 486q^{2}\theta - 324qm^{2} + 810q\alpha\theta - 243q\theta^{2} - 36m^{2}\alpha - 216m^{2}\theta - 36q^{2} - 288q\alpha - 162q\theta + 36m^{2} + 108\alpha\theta - 162\theta^{2} + 96q - 48\alpha + 108\theta - 16,$$
(4.21)

$$\mathcal{K} = 972q^{3}m^{2}\alpha - 972qm^{4}\alpha - m^{4}\alpha\theta + 972q^{5} + 1944q^{4}\alpha - 972q^{3}m^{2} - 972q^{2}m^{2}\alpha$$

$$- 486q^{2}m^{2}\theta - 486qm^{2}\alpha\theta + 324m^{4}\alpha + 324q^{4} - 2268q^{3}\alpha + 972q^{2}m^{2}$$

$$+ 972q^{2}\alpha\theta + 324qm^{2}\alpha + 810qm^{2}\theta + 162m^{2}\alpha\theta + 243m^{2}\theta^{2} - 540q^{3} + 324q^{2}\alpha$$

$$- 486q^{2}\theta - 324qm^{2} + 810q\alpha\theta - 243q\theta^{2} - 36m^{2}\alpha - 216m^{2}\theta - 192q\alpha - 36q^{2}$$

$$- 288q\alpha - 162q\theta + 36m^{2} + 108\alpha\theta - 162\theta^{2} + 96q$$

$$- 48\alpha + 108\theta - 16.$$
(4.22)

$$R(m,q) = -\frac{81}{2} \frac{\mathcal{S}}{\mathcal{Q}^2} \theta^3.$$
(4.23)

Burada S ve Q sembolleri sırasıyla

$$S = 18m^2\alpha + 18q^2 + 36q\alpha - 12q - 9\theta + 6\alpha + 2, \qquad (4.24)$$

$$Q = 108q^{3}\alpha - 108qm^{2}\alpha - 54m^{2}\theta\alpha - 54q^{2}\theta + 108\alpha q^{2} + 54q\alpha\theta + 36m^{2}\alpha - 18q\theta - 27\theta^{2} + 36\alpha\theta + 12\theta - 16\alpha,$$
(4.25)

şeklindedir. R'nin sayısal değerleri m ve q'nun (3.11) ve (3.12) ifadeleri ile tespit edilen denge değerlerinin (4.24) ve (4.25)'te kullanılmasıyla bulunabilir.

Ricci skaleri R'nin F, P ve Q fazlarında indirgenmiş sıcaklık  $\theta$ 'nın bir fonksiyonu olarak değişimi,  $\alpha$ 'nın ikinci-derece faz geçiş sıcaklığı, birinci-derece faz geçiş sıcaklığı ve TCP noktasına karşılık gelen bazı değerleri için Şekil 4.1 (a)-(c)'de gösterildi. Şekillerde sıfır manyetik alanda (h = 0), düşey noktalı çizgiler faz geçiş sıcaklığını ve yatay noktalı çizgiler R = 0 durumunu temsil eder. Şekil 4.1 (a)'ya göre,  $\alpha \ge 2/3$  için F fazında Ricci skaleri çoğunlukla negatiftir ve bu fazda düşük sıcaklıklarda  $\alpha$ 'ya bağlıdır. Sıcaklık azalmasıyla  $R \to -\infty$ ıraksaması gerçekleşir. Bu yeni ve literatürde olmayan özellik, düzen parametrelerinin doyum değerlerinin ( $m \sim 1$  ve  $q \sim 1/3$ ) Eşitlik (4.24) ve (4.25)'te yerine yazılması ve ortaya çıkan ifadenin Eşitlik (4.23)'te kullanılmasıyla doğrulanabilir. Böylece,  $R \propto -\theta^{-1}$  ifadesinin  $\theta \longrightarrow 0$  limitinde  $R \rightarrow -\infty$ 'a ıraksamasına karşılık geldiğini görebiliriz. Diğer taraftan, R Ricci skaleri, artan sıcaklık ile bir tepe noktasını geçtikten sonra azalır ve  $\alpha = 2/3$  için  $\theta_M \approx 0.877$  iken bir minimuma ulaşır  $(R_M = -69.255)$ . Ayrıca, sıcaklık artışının devamı ile  $\theta_{SC} = 0.882$ 'de R işaret değiştirir. Daha sonra, üçlü kritik nokta yakınlarında ( $\theta_{TCP} \approx 0.888$ ) hızlı bir şekilde artarak sonsuza ıraksar  $(R \to \infty)$ . Paramanyetik fazda ise R daima pozitif değerler alır (R > 0). Aynı resimde,  $\alpha = 1.2$  olduğunda R'nin davranışı mavi eğri ile verildi. Bu durumda, F fazındaki minimum ( $\theta_M \approx 1.493, R_M \approx -11.50$ ) daha geniş ve daha küçüktür. R,  $\theta_{SC} \approx 1.541$  iken pozitif değer almaya başlar ve  $\theta_C = 1.6$  civarında hızlı bir şekilde  $\infty$ 'a ıraksar. R'nin  $\theta_{SC}$ 'nin hemen üzerindeki davranışını analitik olarak araştırmak için (3.13)

$$R(\varepsilon) = \frac{1}{4}XY^{-1}\varepsilon^{-2},$$
(4.26)

elde edildi. Burada X veY

$$X = \sum_{k=0}^{4} a_k(\alpha)\varepsilon^k, \qquad Y = \sum_{l=0}^{4} b_l(\alpha)\varepsilon^l, \tag{4.27}$$

şeklindedir. (4.27)'deki  $\alpha$ -bağımlı  $a_k$  ve  $b_l$  katsayılarını sırasıyla

$$a_{0} = 16(3\alpha - 2)^{4}(108\alpha^{3} - 180\alpha^{2} + 96\alpha - 16)\alpha^{2},$$

$$a_{1} = (3\alpha - 2)^{4}(-24(108\alpha^{3} - 180\alpha^{2} + 96\alpha - 16)\alpha + 16(-1134\alpha^{2} + 1188\alpha - 288)\alpha^{2}),$$

$$a_{2} = (3\alpha - 2)^{4}(9(108\alpha^{3} - 180\alpha^{2} + 96\alpha - 16) - 24(-1134\alpha^{2} + 1188\alpha - 288)\alpha - 1296\alpha^{2}),$$

$$a_{3} = -9(3\alpha - 2)^{4}(1134\alpha^{2} - 1404\alpha + 288),$$

$$a_{4} = -729(3\alpha - 2)^{4},$$
(4.28)

ve

$$b_{0} = (648\alpha^{4} - 1512\alpha^{3} + 1296\alpha^{2} - 480\alpha + 64)^{2},$$
  

$$b_{1} = 2(648\alpha^{4} - 1512\alpha^{3} + 1296\alpha^{2} - 480\alpha + 64)$$
  

$$(-486\alpha^{3} + 1620\alpha^{2} + 1242\alpha + 252),$$
  

$$b_{2} = 2(648\alpha^{4} - 1512\alpha^{3} + 1296\alpha^{2} - 480\alpha + 64)(-243\alpha + 81)$$
  

$$+ (-486\alpha^{3} + 1620\alpha^{2} + 1242\alpha + 252)^{2},$$
  

$$b_{3} = 2(-486\alpha^{3} + 1620\alpha^{2} + 1242\alpha + 252)(-243\alpha + 81),$$
  

$$b_{4} = (-243\alpha + 81)^{2},$$
  
(4.29)

ile tanımladık. Eşitlik (4.28) ve (4.29)'dan  $\alpha > 2/3$  şartını sağlayan her sonlu  $\alpha$  sabiti için  $a_0(\alpha) > 0$  ve  $b_0(\alpha) > 0$  olduğu kolaylıkla görülebilir. Böyle bir durumda (4.26)'ya göre daima R > 0 olmaktadır ve  $\varepsilon \to 0$  veya  $\theta \to \theta_C$  limitinde  $R \to \infty$ 'dır. Yeniden (4.26) eşitliği kullanılarak kritik noktanın hemen altında Ricci skalerinin  $R(\varepsilon) \propto \varepsilon^{\lambda_R}$  ile ölçeklendiği ve eğrilik üstelinin  $\lambda_R = -2$  olduğu anlaşılır.  $\lambda_{\alpha}$  özgül ısı üstelinin  $\lambda_{\alpha} \ge 0$ 



Şekil 4.1. IBEG modelinde dış manyetik alan yokluğunda (h = 0) (a)  $\alpha \ge 2/3$ , (b)  $1/3 \le \alpha < 2/3$ , (c)  $\alpha < 1/3$  için Ricci skaleri *R*'nin indirgenmiş sıcaklık  $\theta$ 'ya göre değişimi. Düşey noktalı çizgiler faz geçiş sıcaklıklarına karşılık gelir. Yatay noktalı çizgiler R = 0'a karşılık gelir. (d) Sistemin ( $\theta, \alpha$ ) düzlemindeki geometrik faz diyagramı. Mavi düz çizgi ikinci-derece faz geçiş çizgisini, mavi noktalı çizgiler birinci-derece faz geçiş çizgisini, kırmızı düz çizgi R = 0 çizgisini ve yeşil kesikli çizgi  $R_M$ 'nin yerleşimini gösterir

sağlaması durumunda kritik nokta yakınlarında  $R(\varepsilon) \propto \varepsilon^{\lambda_{\alpha}-2}$  olduğu uzun zamandır tartışılmaktadır (Mirza ve Talei 2013). İlave olarak, BEG modeli çerçevesinde gözlemlenen faz geçişlerinin çoğu,  $\lambda_{\alpha} = 0$ 'a karşılık gelen özgül ısı sıçramalarıyla temsil edilir (Gzik ve Balcerzak 1997). Bundan dolayı  $\lambda_{\alpha} = 0$  almak bizi aynı sonuca, yani  $R(\varepsilon) \propto \varepsilon^{-2}$ 'a ulaştırır. Kısaca bu çalışmada eğrilik üsteli değeri  $\lambda_{\alpha} = -2$  olarak bulundu. Bu sonuç, aralarında herhangi bir bağlantı olmamasına rağmen  $\mathcal{D} > 4$  boyutundaki diğer spin modellerinin eğrilik sonuçları ile uyumludur (Janyszek ve Mrugała 1989; Janke vd 2002; Janke vd 2003; Janke vd 2004; Erdem 2018b). Bu yüzden, yukarıdaki sonuçlar termodinamik metrik eğriliğinin kritik noktada ıraksaması sonucuna verilebilecek benzer bir istatistiksel yaklaşım örneğidir. R niceliği Şekil 4.1 (b)'de  $\alpha$ 'nın  $1/3 \le \alpha < 2/3$  aralığındaki herhangi bir değerinde negatif bölgede sıcaklık artışı ile azalarak birinci-derece F-P faz geçişi sırasında aniden işaret değiştirir ve P fazında pozitif bölgeye geçer. Sıçrama miktarı yaklaşık olarak  $\Delta R \approx 10^4$ 'dır. Şekil 4.1 (c)'de de (b) şeklindeki gibi eğrilik skaleri R,  $\alpha$ 'nın sabit değerlerinde ( $\alpha < 1/3$ ), sıcaklık artışı ile Q fazından P fazına birinci-derece faz geçişi sırasında aniden işaret değiştirerek atlamaktadır. Her iki şekilde de R paramanyetik fazda daima pozitiftir (R > 0). Bu iki şekil arasındaki tek fark, Şekil 4.1 (c)'de Q fazındaki sıcaklık aralığında R Ricci skaleri  $\alpha$ 'dan tamamen bağımsızken, faz geçiş sıcaklığının hemen üzerinde az da olsa  $\alpha$ 'ya bağlı hale gelir ve P fazında çok yüksek sıcaklıklarda yeniden  $\alpha$ 'dan bağımsız olmaktadır. R'nin birinci-derece faz geçişi özelliği daha önce ferroelektrik kristallerde görülen bir özelliktir. Bu sınıftaki kristallerde R, düşük enerji ve düşük basınç aralığında negatif değer alırken enerji ve basınç artışı ile birinci-derece ferroelektrik-paraelektrik faz geçişi ile keskin bir şekilde pozitif bölgeye atlar (Erdem 2020). R'nin F/P faz dengesi boyunca sergilediği davranışın çalışılmasının yanında, Şekil (3.3)'deki faz diyagramına R = 0 ve  $R_M$  çizgileri de ilave edildi. Sonuçlar Şekil 4.1 (d)'de GFD şeklinde verildi. Görüldüğü gibi, kırmızı doğru ile gösterilen R = 0 çizgisi, mavi ile gösterilen faz geçiş çizgisine oldukça yakın bir konumda bulunmaktadır ve R'nin işareti bu çizgi üzerinde sıcaklık artışı ile sürekli bir şekilde negatiften pozitife dönmektedir. Bu değişime "geometrik faz geçişi" denir (Brody ve Hook 2009). R'deki tekillikle ilgili faz geçişinin aksine R < 0'dan R > 0'a olan geometrik faz geçişi bir ıraksama davranışı ile ilgili değildir. Geometrik faz diyagramından görüldüğü gibi  $R_M$  ve R = 0 çizgisi birinci-derece faz geçiş çizgisi üzerinde aynı noktada (E) sonlanır  $(\alpha_E \approx 0.55, \theta_E \approx 0.739)$ . Bu sonuç, Hoston ve Berker'in "kritik son nokta" tanımlamasına çok benzemektedir (Hoston ve Berker 1991a,b).

Şekil 4.2 (a) ve 4.2 (b)'de,  $\alpha = 1.2$  ve  $\alpha \ge 1/3$  olduğu bazı değerler için,  $h \ne 0$  iken R'nin sıcaklıkla değişimi verildi. Görüldüğü gibi, dış manyetik alan Şekil 4.1 (a)'daki tekilliği yok ettiğinden R'de herhangi bir anormallik oluşmaz ve dolayısıyla ortaya pürüzsüz eğriler çıkar. Böyle eğrilerin varlığı iki önemli özelliğe işaret eder: birincisi kritik noktanın üzerinde geniş bir maksimum veya pik  $(R_P)$ , ikincisi kritik noktanın altında küçük bir minimum  $R_M$ . Bu maksimum ve minimumların yerleri ve şekilleri, manyetik alana ve çiftlenim oran sabiti  $\alpha$ 'ya bağlıdır. Örneğin,  $\alpha = 1.2$  alındığında h artarken, bu maksimum ile minimumlar küçülür ve yüksek sıcaklıklara doğru kayar (Şekil 4.2 (a)). Fakat  $\alpha$ 'nın artan değerlerinde ve h = 0.05 olduğunda ise bu  $R_P$  ile  $R_M$ 'ler aynı şekilde kayarken büyüklükleri değişmektedir (Şekil 4.2 (b)). Diğer taraftan, Şekil 4.2 (a)'da gözlenen eğrinin  $R_P$  extremumu, eğrilik maksimum çizgisini belirler. Böylece, izotropik BEG modeli için korelasyon uzunluğunun maksimumu veya Widom çizgisinin yerleşimine işaret eder. Şekil 4.2 (c)'de  $\alpha = 0.4, 2/3, 0.9, 1.2$  değerleri için Widom çizgileri (renkli sürekli eğriler) elde edildi. Şekil 4.2 (c)'de işaret edildiği gibi, çizgiler  $(\theta, h)$  düzleminde, Şekil 4.2 (b)'de verilen kritik sıcaklıklardan başlayarak h > 0 bölgesine uzanmaktadır. Buradaki Widom çizgisi sonuçları,  $(\theta, h)$  düzleminde tek boyutlu Ising modelinde  $(I^1, I^2) = (\beta J, h)$  manifolduna ait sonuçlarla (Dey vd 2013) karşılaştırıldı ve aralarında güzel bir uyum görüldü. Böylece, geometrik özelliklerin araştırılmasında (m,q) manifoldu seçiminin oldukça doğru bir karar olduğu sonucuna varıldı.  $R_P$  çizgisinin R = 0 (renkli kesikli çizgiler) ve  $R_M$  çizgisi (renkli noktalı çizgiler) ile kesişip kesişmeyeceğini sormak doğaldır, çünkü bu çizgiler akışkan sistemlerde çekici etkileşimlerden itici etkileşimlere geçişe işaret eder (Ruppeiner 2012). Şekil 4.2 (c)'de,  $\alpha$ 'nın çeşitli değerleri için elde edilen eğrileri karşılaştırıldı. Gerçekten, h = 0 ve  $\alpha = 2/3$  olduğunda  $\theta_{TCP}$  sıcaklığında üç eğri birleşir. Eğer  $\alpha < 2/3$  ise, yalnızca h'nin çok küçük değerlerinde birleşme meydana gelir. Bu durum, akışkanlardaki uyum (Ruppeiner 2012) gibi R = 0 ve Widom eğrileri arasındaki uyumu temsil eder. h'nin özel bir değeri için  $(h = 0.05), R_P$  ve  $R_M$ 'nin  $(\theta, \alpha)$  düzlemindeki yerleri basitçe Şekil 4.2 (d)'deki gibi belirlendi. Şekilde  $\alpha \ge 1/3$  için,  $(\theta, \alpha)$  düzleminde  $R_P$  (yeşil düz çizgi) ve  $R_M$  (yeşil kesikli çizgi) eğrileri R = 0 (kırmızı düz çizgi) çizgisinin zıt taraflarında bulunur. Ayrıca, Şekil 4.1 (d)'deki geleneksel faz geçiş çizgilerinin (düz ve noktalı mavi çizgiler) R = 0 sınır çizgisi ile kolaylıkla karşılaştırılabilmesi için Şekil 4.2 (d)'de yeniden çizilmiştir.



Şekil 4.2. IBEG modelinde (a) R'nin  $\theta$ 'ya göre  $h \neq 0$  olduğu durumda değişimi, (b) h = 0.05 için  $\alpha \ge 2/3$  seçilerek elde edilen  $R - \theta$  eğrileri, (c)  $\alpha \ge 1/3$  için R = 0 (kesikli çizgiler),  $R_M$  (noktalı çizgiler) ve  $R_P$  (sürekli çizgiler) eğrilerinin ( $\theta$ , h) düzlemindeki yerleşimi, (d) h = 0.05 için ( $\theta$ ,  $\alpha$ ) düzlemindeki R = 0 (kırmızı düz çizgi),  $R_M$  (yeşil kesikli çizgi) ve  $R_P$  (yeşil düz çizgi) eğrilerinin yerleşimi

# 4.3. BEG Modeli İçin Ricci Skalerinin Türetilmesi ve Çoklu Kritik Faz Diyagramlarının Geometrik Görünümü

Kesim 4.2'de olduğu gibi, anizotropik BEG modeli için de  $(I^1, I^2) = (m, q)$  manifoldu seçildi ve eşitlik (3.15) yardımıyla metrik tensör bileşenleri

$$G_{11} = -\frac{1}{\theta} \frac{\partial^2 g}{\partial m^2} = \frac{m^2 - q\theta - q^2}{\theta(m^2 - q^2)},$$
(4.30)

$$G_{12} = G_{21} = -\frac{1}{\theta} \frac{\partial^2 g}{\partial m \partial q} = -\frac{m}{m^2 - q^2},$$
 (4.31)

$$G_{22} = -\frac{1}{\theta} \frac{\partial^2 g}{\partial q^2} = -\frac{m^2 - q}{(q - 1)(m^2 - q^2)},$$
(4.32)

olarak türetildi. Buna göre, (4.30)-(4.32) eştilikleri (3.35)'te kullanılırsa Christoffel sembolleri için şu ifadeler elde edilir:

$$\Gamma_{11}^{1} = -\frac{1}{2} \frac{(q+1)m\theta}{\mathcal{U}}, \qquad (4.33)$$

$$\Gamma_{12}^{1} = \Gamma_{21}^{1} = \frac{1}{2} \frac{(m^{2} + q)\theta}{\mathcal{U}}, \qquad (4.34)$$

$$\Gamma_{22}^{1} = -\frac{1}{2} \frac{(m^{2} - 1)m\theta}{(q - 1)\mathcal{U}}, \qquad (4.35)$$

$$\Gamma_{11}^2 = \frac{1}{2} \frac{(q-1)(q^2 - q\theta + m^2)}{\mathcal{U}}, \qquad (4.36)$$

$$\Gamma_{12}^2 = \Gamma_{21}^2 = -\frac{1}{2} \frac{(q-1)(2q-\theta)m}{\mathcal{U}}, \qquad (4.37)$$

$$\Gamma_{22}^2 = -\frac{1}{2} \frac{\mathcal{Y}}{(q-1)\mathcal{U}} \,. \tag{4.38}$$

Burada notasyonu basitleştirecek ve hesaplamaları kolaylaştıracak  $\mathcal{Y}$  ve  $\mathcal{U}$  sembolleri için aşağıdaki tanımlar yapıldı:

$$\mathcal{Y} = -3q^2m^2 + qm^2\theta + m^4 + 2q^3 - 2q^2\theta + 2qm^2 - q^2 + q\theta - m^2, \quad (4.39)$$

$$\mathcal{U} = -q^2 m^2 + m^4 + q^3 - q^2 \theta - q m^2 + m^2 \theta.$$
(4.40)

Daha sonra, sıfır olmayan eğrilik tensör bileşenleri

$$R_{212}^1 = -\frac{1}{4}\frac{\mathcal{W}}{\mathcal{Z}}\,,\tag{4.41}$$

$$R_{112}^{1} = R_{221}^{2} = -\frac{1}{4} \frac{\theta m (m^{2} + 2q - \theta - 1)}{\mathcal{Z}}, \qquad (4.42)$$

$$R_{221}^2 = \frac{1}{4} \frac{\theta(m^4 + qm^2 - m^2\theta - 2q^2 + q\theta - m^2 + q)}{\mathcal{Z}(\theta - 1)}, \qquad (4.43)$$

şeklinde ve Ricci tensörü bileşenleri

$$R_{11} = -\frac{1}{4}\frac{\mathcal{W}}{\mathcal{Z}},\qquad(4.44)$$

$$R_{12} = R_{21} = -\frac{1}{4} \frac{\theta m (m^2 + 2q - \theta - 1)}{\mathcal{Z}}, \qquad (4.45)$$

$$R_{22} = \frac{1}{4} \frac{\theta(m^4 + qm^2 - m^2\theta - 2q^2 + q\theta - m^2 + q)}{\mathcal{Z}(q-1)},$$
(4.46)

olarak bulunur. Burada  $\mathcal{W}$  ve  $\mathcal{Z}$  sembolleri sırasıyla

$$\mathcal{W} = q^2 m^2 - q m^2 \theta - m^4 + 2q^3 - 3q^2 \theta - 2q m^2 + q\theta^2 + m^2 \theta - q^2 + q\theta + m^2, \quad (4.47)$$

$$\mathcal{Z} = (q^2 m^2 - m^4 - q^3 + q^2 \theta + q m^2 - m^2 \theta)(m^2 - q + \theta).$$
(4.48)

Son olarak ise Ricci tensör bileşenleri yardımıyla Ricci eğrilik skaleri düzen parametrelerinin bir fonksiyonu olarak aşağıdaki şekilde türetilmiştir:

$$R(m,q) = -\frac{1}{2} \frac{\theta m (m^2 + 2q - \theta - 1)}{(-m^2 + q - \theta)^2}.$$
(4.49)

(4.23) ifadesinde olduğu gibi, aşağıdaki R hesaplamalarında da öz-uyumlu denklemlerin (3.19 ve 3.20) çözümleri (4.49) eğriliğine yansıtılmıştır.

Önce, Şekil (4.3) ve (4.4)'de sırasıyla çekici ve itici bikuadratik etkileşmeleri temsilen r = 3 ve r = -0.5 değerleri kullanılmak suretiyle R'nin  $\theta$  sıcaklığına ve d anizotropisine bağlılığı incelendi. Daha sonra, bu incelemeler ile r = -0.15 ve r = -1 için yapılan diğer benzer hesaplamalar sonucu ortaya çıkarılan geometrik faz diyagramları Şekil 4.5'te sunuldu.

Şekil 4.3 (a)-(c)'de sırasıyla  $d = d_{TP} = 2.0$ ,  $d = d_C = 2.02$  ve  $d > d_C$  durumlarını temsilen *R*'nin  $\theta$ 'ya karşılık değişimi gösterildi. Benzer şekilde, Şekil 4.3 (d)-(f)'deki *R*'nin d'ye bağlılığı sırasıyla  $\theta < \theta_{TP}, \ \theta_{TP} < \theta < \theta_C, \ \theta_C < \theta_{TCP} < \theta$  durumlarına aittir. Şekillerdeki düşey noktalı çizgiler faz dönüşüm noktalarını, kritik/çoklu kritik noktaları veya R'nin işaret değiştirdiği  $\theta$  ya da d değerlerini temsil etmektedir. Yatay noktalı çizgiler ise R = 0 çizgisidir. Şekil 4.3 (a)'ya göre, F-P1 faz ayrışma çizgisi boyunca R skalerinin tamamen negatif değerler aldığı görülüyor.  $\theta_{TP}$ 'a yaklaşıldıkça R değerleri negatif bölgede hızlıca azalır. TP'ye ulaşıldığında ise, eğrilik aniden pozitif değerler almaya başlar. Buna göre, P2 fazında daima R > 0 olduğu anlaşılmaktadır. Diğer taraftan R'nin P1 fazındaki işaretinin cinsini anlamak için, aynı R hesaplamalarını C noktası için  $d = d_C = 2.02$  kullanarak tekrarladık (Şekil 4.3 (b)). C noktasındaki P1-P2 faz geçişi sırasında TP'deki durumun aynısı ortaya çıkmıştır. Yani P1 fazında R < 0ve P2 fazında R > 0'dır. C noktasının ilerisinde  $(d > d_C)$  daha farklı  $R - \theta$  eğrileri elde edildi. Önceki iki şekildeki R < 0 ile R > 0 durumları arasındaki atlama durumu sürekli bir geçişe dönüştü (Şekil 4.3 (c)). Bu geçişin meydana geldiği sıcaklık değerlerinin hemen altında, yani P1 fazı içerisinde bir minimum  $(R_M)$ , hemen üzerinde P2 fazı bölgesinde de bir maksimum  $(R_P)$  ortaya çıktı. Her iki ekstremum değeri d parametresinin artışıyla hem küçülmekte hem de yüksek sıcaklıklara kaymaktadır. Şekil 4.3 (d)'deki R eğrileri ise R < 0 bölgesinde farklı  $\theta$  değerleri için tam TP noktasında keskin sivri uç yapmakta, ayrıca, bunlar  $\theta$  arttıkça daha derin/keskin hale gelmektedir.  $\theta$  sıcaklığının,  $\theta_{TP}$  ve  $\theta_C$  arasında seçilmesi durumunda Şekil 4.3 (e)'deki R davranışı gözlemlenir. Yani, R skaleri F-P2-P1 birinci-derece faz geçişleri sırasında  $R < 0 \rightarrow R > 0$  ve  $R > 0 \rightarrow R < 0$  arasında ani bir işaret değişikliği meydana gelir. İlave olarak P2 fazında (R > 0) bir *R*-minimumu oluşur. Son olarak, Şekil 4.3 (f)'de ise sıcaklık değeri  $\theta_{TCP}$ 'den büyük olduğu durumda R'nin d'ye göre davranışı verilmiştir. d'nin artmasıyla R skaleri sırasıyla aşağıdaki değişikliklere uğrar: (1) F fazında (R < 0 bölgesinde) azalır ve Şekil 4.3 (c)'deki gibi bir minimum yapar, (2) daha sonra artarak önce işaret değiştirir ve F-P2 sürekli faz geçişi etrafında sonsuza ıraksar ( $R \to \infty$ ), (3) P2 fazında (R > 0 bölgesinde) azalarak yeni bir minimum noktaya gelir, (4) yeniden artmaya başlayarak bir maksimum noktaya ulaşır, (5) azalmaya başlar ve işaret değiştirerek (R < 0) P1 fazında azalmaya devam eder. (6) Son olarak da P1 fazında minimum yaparak tekrar artışa başlar ve R = 0çizgisine doğru ilerler.

Bir sonraki şekil olan Şekil (4.4)'te ise, Şekil 4.3'te yapılan hesaplamaların bir



Şekil 4.3. BEG modelinde (a)-(c) r = 3 iken farklı d değerleri için R'nin  $\theta$ 'ya göre değişimi ve (d)-(f) farklı  $\theta$  değerleri için R'nin d'ye göre değişimi. Düşey noktalı çizgiler faz geçiş noktalarına, R'nin işaret değiştirdiği sıcaklık değerlerine ve P2 fazındaki minimuma karşılık gelir

benzeri r = -0.5 itici bikuadratik etkileşmesi için tekrarlandı. Şekil 4.4 (a)'da görüldüğü gibi, R eğriliği  $\theta$ 'nın artması ile F fazında  $-\infty$ 'dan başlayarak ilerler ve bu fazda sırasıyla bir maksimum  $R_P$  ve bir minimum  $R_M$  yaptıktan sonra yeniden artışa geçer. Daha sonra R, sürekli bir şekilde aynı fazda işaret değiştirip F-P ikinci-derece geçiş sıcaklığına ulaşarak bu sıcaklık civarında  $\infty$ 'a ıraksar ve P fazına ulaşır. P fazında da kritik sıcaklık civarında  $R \to \infty$ 'a ıraksama davanışı sergilenir ve P fazında daima pozitif değerler (R > 0) alacak şekilde azalma olur. Şekil 4.4 (b)'de d = 0.3 için diğer grafiklerden farklı olarak Şekil 3.7 (b)'deki P-F-P yeniden girilebilir durumlar sözkonusudur. İlk önce, P fazında R doyum değerinden azalarak bir  $R_M$  minimum yapar. Sonra artışa geçip P-F faz geçişi sırasında  $R \to \infty$  ıraksaması gerçekleşir. F faz bölgesinde yeniden azalışa geçerek yeni bir  $R_M$  minimum değerine ulaşır ve yeniden artışa geçer. F-P faz geçişi sırasında ise tekrar  $R \to \infty$  olur. Son olarak, P faz bölgesinde azalarak pozitif bölgede ilerler. Benzer şekilde, Şekil 4.4 (c) ve (d)'de R'nin d'ye göre davranışı gösterildi. Şekil 4.4 (c)'de, R'nin F fazında R < 0 bölgesinde azalarak ilerlediği ve C' noktasında aniden işaret değiştirdiği (R > 0) görüldü. P fazında da azalıp bir minimum yaparak F-P faz geçişi sırasında  $R \rightarrow \infty$ 'a ıraksar. Ayrıca, P faz bölgesinde azalarak ilerler. Son olarak, Şekil 4.4 (d) bize, beklenildiği gibi, CEP'de R < 0'dan R > 0'a bir atlama süreksizliği olduğunu gösterir.

Yukarıda ayrıntıları ile verilen R hesaplamaları, r = -0.15 ve r = -1 itici bikuadratik etkileşmeleri dikkate alınarak genişletildi. Şekil 4.3 ve 4.4'te tespit edilen R = 0,  $R_P$  ve  $R_M$  değerleri ile birlikte iki yeni itici etkileşme için bulunanların çoklu kritik faz diyagramlarındaki yerleri belirlendi. R = 0,  $R_P$  ve  $R_M$  eğrileri sırasıyla kırmızısürekli, yeşil-sürekli ve yeşil-kesikli çizgiler şeklinde, Şekil 3.7'deki termodinamik faz diyagramlarına ilave edildi. Ortaya çıkan faz diyagramları, Şekil 4.1 (d)'deki gibi, GFD olarak r = 3, -0.15, -0.5 ve -1 bikuadratik etkileşmeler için sırasıyla Şekil 4.5 (a)-(d)'de gösterildi. Şekil 4.5 (a)'da R = 0 ve  $R_M$  eğrileri F faz bölgesinde (ikinci-derece geçiş eğrisinin hemen altında) ilerleyerek TCP noktasının ilerisinde, birinci-derece faz geçiş eğrisi üzerinde bir E noktasında birleşir ve sonlanır ( $\theta_E = 0.762, d_E = 1.930$ ). Bu sonuç Şekil 4.1 (d) ile uyumludur. P2 fazında, TP noktası civarında da ( $d_{TP} = 2$ ) başka bir  $R_M$  oluşur ve bu noktanın üzerindeki bölgede sıcaklık artışı ile bir doğru olarak ilerleyip belli bir sıcaklık değerinden itibaren sola doğru yönelir. Ayrıca, bu fazda C'nin uzantısı gibi ilerleyen bir  $R_P$  eğrisi kendini gösterir. P1 fazında ise, C noktasından



Şekil 4.4. BEG modelinde (a)-(b) r = -0.5 iken farklı *d* değerleri için *R*'nin  $\theta$ 'ya göre değişimi ve (c)-(d) farklı  $\theta$  değerleri için *R*'nin *d*'ye göre değişimi. Düşey noktalı çizgiler faz geçiş noktalarına ve *R*'nin işaret değiştirdiği sıcaklık değerine karşılık gelir

 $(d_C = 2.02)$  itibaren ikinci R = 0 ve  $R_M$  eğrileri ortaya çıkar ve birbirlerinden uzaklaşarak bu fazda devam ederler. Özetle, Şekil 4.5 (a)'ya göre F ve P1 fazlarında kısmen R < 0 iken, P2 fazında ise daima R > 0'dır. Şekil 4.5 (a)'da olduğu gibi, Şekil 4.5 (b)'de de F faz bölgesinde R = 0 ve  $R_M$  eğrileri ikinci-derece geçiş çizgisinin altında uzanır ve birinci-derece geçiş çizgisi üzerinde sırasıyla E1 ve E2 noktalarında son bulurlar  $(\theta_{E1} = 0.241, d_{E1} = 0.411; \theta_{E2} = 0.234, d_{E2} = 0.411)$ . Diğer taraftan, Şekil 4.5 (c)'de F bölgesinde C' iç kritik noktasında buluşacak şekilde R = 0 ve  $R_M$  çizgileri oluşurken,



Şekil 4.5. BEG modelinin (a) r = 3, (b) r = -0.15, (c) r = -0.5 ve (d) r = -1 değerleri için  $(d, \theta)$  düzleminde geometrik faz diyagramları. Mavi noktalı ve mavi sürekli çizgiler sırasıyla birinci-derece faz geçişi ve ikinci-derece faz geçişine karşılık gelir. Kırmızı sürekli çizgiler R = 0, yeşil kesikli çizgiler R'nin minimum ve yeşil sürekli çizgiler ise R'nin maksimum olduğu durumu gösterir

 $R_M$  çizgisini tamamlayan ve yarım halka oluşturan bir  $R_P$  çizgisi meydana gelir. Bu  $R_P$ çizgisi, CEP noktasının altında birinci-derece faz geçiş çizgisi üzerinde bir M noktasında sonlanır ( $\theta_M = 0.060, d_M = 0.250$ ). Yine F fazında R = 0 ile ikinci-derece faz geçiş çizgisi arasındaki bölgede, C' iç kritik noktasından başlayıp yine bu noktada sonlanan  $R_M$ ve  $R_P$  eğrilerinin birleşimi ile küçük bir halka oluşur. Son olarak, Şekil 4.5 (d)'de diğer GFD'lerden farklı olarak F fazında yalnızca R = 0 eğrisi bulunur ve bu eğri sıfır-sıcaklık kritik noktası Z'de sonlanır.

Özetle, R = 0 çizgileri GFD'lerdeki F faz bölgesini R < 0 ve R > 0 olarak iki kesime ayırır. r > 0 bikuadratik etkileşmelerinde R > 0 olan F kesiminin alanı oldukça küçüktür. Ancak, bu kesim r < 0 etkileşmelerinde r'nin azalmasıyla genişler ve daha büyük bir alana yayılır. Diğer taraftan, P1 hariç tüm paramanyetik fazlarda daima R > 0 olmaktadır.

### 5. SONUÇLAR

Bu tezde, spin-1 izotropik ve anizotropik BEG modelleri ortalama alan yaklaşımına dayalı denge istatistik teori ve Ruppeiner formalizmine dayalı termodinamik geometri birleştirilerek elde edilen bir metot ile incelendi. Her iki spin sistemi için "mq" uzayı olarak da adlandırılan (m, q) termodinamik parametre uzayının Ricci eğriliği türetildi ve R'ye bağlı olarak geometrik faz diyagramları elde edildi. Böylece, spin-1 BEG sistemlerinin geometrik olarak incelenmesi farklı bir metrik ile yapılmış oldu. İzotropik BEG modelinde bulunan sonuçlara göre, spin sistemi kritik sıcaklık altında ( $\theta < \theta_C$ ) ve üzerinde ( $\theta > \theta_C$ ) farklı davranışlar sergilemektedir.  $\theta < \theta_C$  iken R genellikle negatiftir ve  $\theta = 0$ 'da ıraksama tekilliği görülmektedir  $(R \to -\infty)$ . Bu durumda, ferromanyetik spin etkileşimlerinin çekici olduğunu söyleyebiliriz.  $\theta > \theta_C$  olduğunda ise spin etkileşimleri iticidir ve R daima pozitiftir. Çalışmada, R'nin hızla artarak işaret değiştirdiği indirgenmiş sıcaklık değerleri  $\theta_{SC}$ ,  $\alpha$ 'ya bağlı olarak değişirken bu sıcaklıklardaki geometrik geçişlerin genellikle sürekli olduğu görüldü. Ayrıca, R'nin F fazında  $\theta \sim \theta_C$  civarındaki özellikleri için kritik üstel tahminleri de doğrulandı ve eğrilik skalerinin  $\theta_C$ 'nin hemen altında  $\lambda_R = -2$  kritik üsteli ile sonsuza ıraksadığı  $(R \to \infty)$  bulundu. Tezde rapor edilen bu ıraksama tekilliği ve  $R \propto \varepsilon^{-2}$  ölçekleme kuralı beklenildiği gibi ortalama alan karakterindeki bazı Ising sınıfı spin modellerinin eğrilik analizleri ile uyum göstermiştir (Janyszek ve Mrugała 1989; Dey vd 2013; Erdem 2018b). Ayrıca, çalışmada küresel spin modelinin özel bir durumu ile de aynı ölçekleme sonucu gözlenmiştir. Bilindiği gibi küresel modelde  $\mathcal{D} = 1$  ve  $\mathcal{D} = 2$  boyutlarında faz geçişi gözlenmez.  $\mathcal{D} = 3$  boyutunda ise  $\lambda_{\alpha} = -1$  özgül 1sı üsteli geçerli olmak üzere faz geçişi meydana gelir. Bu durumda  $R \propto \varepsilon^{-3}$  yerine  $R \propto \varepsilon^{-2}$  olduğu gösterilmiştir (Janke vd 2003).  $\mathcal{D} \ge 4$  boyutlarında özgül ısı üsteli sıfırdır ve böylece ortalama alan eğrilik üsteli -2'dir. Dolayısıyla (4.26) eşitliği ile öngörülen eğrilik kritik üstel değerinin evrensel sınıfta yer aldığını söyleyebiliriz.

Diğer taraftan, izotropik BEG sistemine dış manyetik alan ilave edilirse, R > 0ve R < 0 bölgelerinde sırasıyla eğrilik maksimumları ve minimumları oluşarak R skaleri  $\theta$ 'nın sürekli bir fonksiyonu haline gelmektedir (Şekil 4.2). Bu durumda,  $\theta_{SC}$  hem  $\alpha$  hem de h ile değişmektedir. Daha sonra, aynı hesaplamalar anizotropik BEG modeline genişletildi ve R'nin  $\theta$  ve d'ye göre değişimleri ayrıntılı şekilde çalışıldı. İzotropik modelden farklı olarak R skalerinin TP, C, C', CEP ve Z noktalarındaki tekillikleri gözlendi. Her iki modelden ortaya çıkan sonuçlar ( $R \rightarrow \infty, R \rightarrow -\infty, R = 0, R_M, R_P$ , vb.) GFD'lerde toplanarak ferromanyetik/paramanyetik fazların ve termodinamik faz geçişlerinin geometrik görünümleri sergilendi (Şekil 4.1 (d) ve Şekil 4.5). Sonuçlar benzer sistemler olarak ferroelektrik kristallerdeki düzenli/düzensiz fazlar ve bunlar arasındaki geçişler için verilen Ricci skaleri bulguları ve ortaya çıkarılan GFD'leri (Erdem 2020) ile karşılaştırıldı. Aralarında tam bir uyum tespit edildi. Bu uyumun kaynağı olarak BEG modelinin kuantum örgü versiyonunun ferrolektrik kristallerde etkili bir modelleme aracı olması gösterilebilir (Velychko ve Stasyuk 2019).

Son bir husus ise, yapılan bu tezde iki-boyutlu (n = 2) manifold kullanılmış olmasıdır ki iki-boyut dışında (n > 2) tezde ortaya çıkan özelliklerin sergilenip sergilenmeyeceği henüz bilinmemektedir. Bu bağlamda, çalışmamızı daha ileriye taşıyarak üç-boyutlu manifold  $(I^1, I^2, I^3) = (\theta, m, q)$  ile de benzer sonuçların elde edilip edilemeyeceği araştırılmaya devam edilecektir. Başka üç boyutlu  $\mathcal{M}$ 'lar dört durumlu ve üç düzen parametreli spin-3/2 IBEG modellerinde (Canko ve Keskin 2006) ve karışık spinli (spin-1/2 ve spin-1) Ising sistemlerinde de (Ekiz ve Keskin 2003) seçilebilir. Böylece, geçerli olan serbest enerji ifadeleri kullanılarak Çizelge 3.1'e uygun metrikler tespit edildikten sonra ilgili spin sistemlerinde gözlenen faz dönüşümlerinin R skaleri hesaplanarak analiz edilebileceği öngörülmektedir. Yalnızca düzen parametrelerinin koordinat olarak seçildiği üç boyutlu termodinamik  $\mathcal{M}$ 'lar için en iyi örnek, Bethe yaklaşımına dayalı antiferromanyetik Ising modelidir (Erdem 2018b).

### 6. KAYNAKLAR

- Adler, J., Aharony, A. and Oitmaa, J. 1978. Renormalization group studies of the Blume-Emery-Griffiths model in two dimensions. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 11: 963-974.
- Akheyan, A. Z. And Ananikian, N. S. 1996. Global Bethe lattice consideration of the spin-1 Ising model. J. Phys. A: Math. Gen., 29: 721-731.
- Albayrak, E. and Keskin, M. 1999. Phase diagram of the Blume-Emery-Griffiths model calculated by the mean-field approximation including the transverse fields effects. J. Magn. Magn. Mater., 206: 83-92.
- Albayrak, E. and Keskin, M. 2000. Phase diagram of the Blume-Emery-Griffiths model on the simple cubic lattice calculated by the linear chain approximation. *J. Magn. Magn. Mater.*, 203: 201-212.
- Antenucci, F., Crisanti, A. and Leuzzi, L. 2014. Small-cluster renormalization group in Ising and Blume-Emery-Griffiths models with ferromagnetic, antiferromagnetic and quenched disordered magnetic interactions. *Phys. Rev. E*, 90: 012112.
- Bakchich, A. and El Bouziani, M. 1997-I. Phase diagrams of the three-dimensional semiinfinite Blume-Emery-Griffiths model. *Phys. Rev. B*, 56 (17): 11155-11160.
- Baran, O. R. and Levitskii, R. R. 2002. Reentrant phase transitions in the Blume-Emery-Griffiths model on a simple cubic lattice: The Two-Particle Cluster Approximation. *Phys. Rev. B*, 65: 172407.
- Benyoussef, A., Ez-Zahraouy, H., Mahboub, H. and Ouazzani, M. J. 2003. Layering sublimation transitions of the spin-1 Blume-Emery-Griffiths model in a transverse field. *Physica A*, 326: 220-232.
- Berker, N. and Wortis, M. 1976. Blume-Emery-Griffiths-Potts model in two dimensions: Phase diagram and critical properties from a position-space renormalization group. *Phys. Rev. B*, 14: 4946-4963.
- Bernasconi, J. and Rys, F. 1971. Critical behavior of a magnetic alloy. *Phys. Rev. B*, 4: 3045-3048.

- Blume, M. 1966. Theory of the first-order phase magnetic phase change in UO<sub>2</sub>. *Phys. Rev. B*, 141 (2): 517-524.
- Blume, M., Emery, V. J., Griffiths, R. B. 1971. Ising Model for the  $\lambda$  transition and phase separation in  $He^3$ - $He^4$  mixtures. *Phys. Rev. B*, 4: 1071-1077.
- Bollé, D. and Verbeiren, T. 2003. Thermodynamics of fully connected Blume-Emery-Griffiths neural networks. J. Phys. A: Math. Gen., 36: 295-305.
- Bonfim, O. F. de A. and Barreto, F. C. S. 1985. Renormalization group treatment of a spin-one Ising model with biquadratic exchange interaction. *Phys. Lett. A*, 109: 341-343.
- Booth, R. J. C., Hua, L., Tucker, J. W., Care, C. M. and Halliday, I. 1993. Monte Carlo study of the BEG model on a honeycomb lattice. J. Magn. Magn. Mater., 128: 117-123.
- Borelli, M. E. S. and Carneiro C. E. I. 1996. Gloabal mean-field phase diagram of the spin-1 Ising ferromagnet in a random crystal field. *Physica A*, 230: 249-256.
- Boughazi, B., Boughrara, M. and Kerouad, M. 2014. Phase diagrams and magnetic properties of a ferrimagnetic cylindrical core/shell spin-1 Ising nanowire. J. Magn. Magn. Mater., 354: 173-177.
- Brody, D. C. and Hook, D. W. 2009. Information geometry in vapour-liquid equilibrium. *J. Phys. A: Math. Theor.*, 42: 023001.
- Buzano, C. and Pelizzola, A. 1992. Multicritical points and reentrant phenomenon in the BEG model. *Physica A*, 189: 333-347.
- Buzano, C. and Pelizzola, A. 1993. Surface reentrance in the semi-infinite spin-1 Ising models. *Physica A*, 195: 197-214.
- Buzano, C., Evangelista, L. R. and Pelizzola, A. 1996. Phase transitions in a spin-1 model with plaquette interaction on the square lattice. *Phys. Rev. B*, 53: 15063-15070.

- Canko, O. and Keskin, M. 2006. Spin-3/2 Ising model by the Cluster variation method and the path probability method. *Physica A*, 363: 315-326.
- Capel, H. W. 1966. On the possibility of first-order phase transitions in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting. *Physica*, 32: 966-988.
- Carneiro, C. E. I., Henriques, V. B. and Salinas, S. R. 1987. Renormalization group calculations for a spin-1 Ising model with bilinear and biquadratic exchange interactions. J. Phys. A: Math. Gen., 20: 189-197.
- Chakraborty, K. G. 1988. The re-entrant behaviour of the spin-1 Ising model in the effective-field approximation. *J. Phys. C: Sol. Stat. Phys.*, 21: 2911-2915.
- Dani, I., Tahiri, N., Ez-Zahraouy, H. and Benyoussef, A. 2014. A Monte Carlo study of the spin-1 Blume-Emery-Griffiths phase diagrams within biquadratic exchange anisotropy. *Physica A*, 407: 295-302.
- Dey, A., Roy, P. and Sarkar, T. 2013. Information geometry, phase transitions and the Widom line: Magnetic and liquid systems. *Physica A*, 392: 6341-6352.
- Dong, H. P. and Yan, S. L. 2006. Magnetic properties of the bond and crystal field dilution Blume-Emery-Griffiths model in the presence of magnetic field. *Solid State Commun.*, 139: 406-411.
- Dong, H. P. and Yan, S. L. 2007. Critical behaviors of bond and crystal field dilution Blume-Emery-Griffiths model. J. Magn. Magn. Mater., 308: 90-96.
- Dong, H. P. and Yan, S. L. 2008. Staggered quadrupolar phase and bicritical point of spin-1 bond and anisotropy dilution Blume-Emery-Griffiths model. *Commun. Theor. Phys.*, 49: 511-515.
- Ekiz, C. and Keskin, M. 2002. Multicritical phase diagrams of the Blume-Emery-Griffiths model with repulsive biquadratik coupling including metastable phases. *Phys. Rev. B*, 66: 054105.
- Ekiz, C. and Keskin, M. 2003. Magnetic properties of the mixed spin-1/2 and spin-1 Ising ferromagnetic system. *Physica A*, 317: 517-534.
- Erdem, R. and Keskin, M. 2001. Dynamics of a spin-1 Ising system in the neighborhood of equilibrium states. *Phys. Rev. E*, 64: 026102.
- Erdem, R., Ekiz, C. and Keskin, M. 2003. Relaxation phenomena in the Blume-Emery-Griffiths model near the critical and multicritical points. *Phys. Stat. Sol. B*, 240: 220-229.
- Erdem, R. 2008. Magnetic relaxation in a spin-1 Ising model near the second-order phase transition point. *J. Magn. Magn. Mater.*, 320: 2273-2278.
- Erdem, R. 2018a. Riemannian geometriy of Ising model in the Bethe approximation. *J. Phys.: Conf. Series*, 1132: 012028.
- Erdem, R. 2018b. Antiferromagnetic Ising model in the framework of Riemannian geometry. *Acta Phys. Pol. B*, 49 (10): 1823-1834.
- Erdem, R. 2019. Thermodynamic geometry of Ising ferromagnet in an external magnetic field: A self-consistent field theory calculation. *Physica A*, 526: 121173.
- Erdem, R. and Özüm, S. 2019. Relaxation times obtained from the rate equations using path probability method for the spin-1 Ising model. *Mod. Phys. Lett. B*, 33 (22): 1950258.
- Erdem, R. 2020. Quantum lattice model with local multi-well potentials: Riemannian geometric interpretation for the phase transitions in ferroelectric crystals. *Physica* A, 556: 124837.
- Erdem, R., Yalçın, O., Özüm, S., Şahin, A. and Demirer, N. 2021. Hysteretic behavior of quadrupolar ordering in a 2D magnetic spin-1 Ising nanoparticle. *Chin. J. Phys.*, 69: 38-49.
- Erdem, R. 2022. Geometrical description of the state space in spin crossover solids with high-spin low-spin degree of freedom. *Physica A*, 598: 127335.
- Erdinç, A. and Keskin, M. 2002. Equilibrium and nonequilibrium behavior of the spin-1 Ising model in the quadrupolar phase. *Physica A*, 307: 453-468.

- Erdinç, A., Canko, O. and Keskin, M. 2006. Multicritical behavior of the antiferromagnetic Blume-Emery-Griffiths model with the repulsive biquadratic coupling in an external magnetic field. J. Magn. Magn. Mater., 301: 6-12.
- Ertaş, M. and Keskin, M. 2015. Dynamic phase transitions and dynamic phase diagrams of the Blume-Emery-Griffiths model in an oscillating field: the effective-field theory based on the Glauber-type stochastic dynamics. *Phase Transitions*, 88 (6): 634-647.
- Ertaş, M. and Kantar, E. 2015a. The kinetic spin-1 Ising system on triangular lattice: the effects of crystal field and frequency of oscillating external magnetic field. J. Supercond. Nov. Magn., 28: 3037-3044.
- Ertaş, M. and Kantar, E. 2015b. Cylindrical Ising nanowire with crystal field: existence of a dynamic compensation temperatures. *Phase Transitions*, 88: 567-581.
- Ez-Zahraouy, H., Mahboub, H., Benyoussef, A. and Ouazzani, M. J. 2004. Phase diagrams of the spin-1 Blume-Emery-Griffiths model in a random transverse field. *Int. J. Mod. Phys. B.*, 18: 4129-4142.
- Falikov, A. and Berker, A. N. 1996. Tricritical and critical end-point phenomena under random bonds. *Phys. Rev. Lett.*, 76: 4380-4383.
- Fittipaldi, I. P. and Siqueira, A. F. 1986. New effective-field theory for the Blume-Emery-Griffiths model. J. Magn. Magn. Mater., 54-57 (2): 694-696.
- Fittipaldi, I. P. and Kaneyoshi, T. 1989. Re-entrant behaviour of the anisotropic BEG model in the Effective-Field Approximation. J. Phys.: Condens. Matter, 1: 6153-6522.
- Glauber, R. J. 1963. Time-dependent statistics of the Ising model. *Physica A*, 4 (2): 294-307.
- Grigelionis, G. and Rosengren, A. 1994. Study of the Blume-Emery-Griffiths model on the triangular lattice by the cluster-varition method. *Physica A*, 208: 287-299.

- Gzik, M. and Balcerzak, T. 1997. Study of the Blume-Emery-Griffiths model on the triangular lattice by the cluster-varition method. *Acta Phys. Pol. A*, 92: 543.
- Heidari, A. and Ghorbani, M., 2012. The computation of scalar curvature in the fourstate mixed spin model and the investigation of its behavior: A computational study. J. Mod. Phys., 3 (1): 37-42.
- Honmura, R. and Kaneyoshi, T. 1979. Contribution to the new type of effective-field theory of the Ising model. J. Phys. C: Solid State Phys., 12: 3979-33992.
- Hoston, W., and Berker, N. 1991a. Multicritical phase diagrams of the Blume-Emery-Griffiths model with repulsive biquadratic coupling. *Phys. Rev. Lett*, 67: 1027-1030.
- Hoston, W., and Berker, N. 1991b. Dimensionality effects on the multicritical phase diagrams of the Blume-Emery-Griffiths model with repulsive biquadratic coupling: Mean-field and Renormalization-group studies. J. Appl. Phys., 70: 6101-6103.
- Ising, E. 1925. Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus. Z. Phys., 31: 253-258.
- Janke, W., Jonston, D. A. and Malmini, R. P. K. C. 2002. Information geometry of the Ising model on planar random graphs. *Phys. Rev. E*, 66: 056119.
- Janke, W, Johnston, D. A. and Kenna R. 2003. Information geometry of the spherical model. *Phys. Rev. E*, 67: 046106.
- Janke, W, Johnston, D. A. and Kenna R. 2004. Information geomery and phase transitions. *Physica A*, 336: 181-186.
- Janyszek, H. and Mrugała, R. 1989. Riemannian geometry and the thermodynamics of model magnetic systems. *Phys. Rev. A*, 39: 6515-6523.
- Kadanoff, L. P. 1966. Scaling laws for Ising models near  $T_C$ . Phys., 2 (6): 263-272.
- Kaneyoshi, T., Fittipaldi, I. P., Honmura, R. and Manabe, T. 1981. New correlatedeffective-field theory in the Ising model. *Phys. Rev. B*, 24 (1): 481-484.

- Kasono, K. and Ono, I. 1992. Re-entrant phase transitions of the Blume-Emery-Griffiths model: I. Monte Carlo simulations on the simple cubic lattice. Z. Phys. B. Condens. Matter, 88: 205-212.
- Keskin, M., Arı, M. and Meijer, P. H. E. 1989. Stable, metastable and unstable solutions of a spin-1 Ising system obtained by the molecular-field approxximation and the path probability method. *Physica A*, 157: 1000-1017.
- Keskin, M. and Özgan, Ş. 1990. Stable, metastable and unstable solutions of a spin-1 Ising system based on the free energy surfaces. *Phys. Lett.*, 145: 340-342.
- Keskin, M. 1993. Stable, metastable and unstable solutions of a spin-1 Ising system in the presence of an external magnetic field. *Physica Scripta.*, 47: 328-332.
- Keskin, M. and Arslan, H. 1995. Stable, metastable and unstable solutions of a spin-1 Ising system in the presence of magnetic fields due to the dipole and quadrupole moments. J. Magn. Magn. Mater., 146: L247-L250.
- Keskin, M. and Erdem, R. 1997. Dynamic behavior of a Spin-1 Ising Model. I. Relaxation of order parameters and the "Flatness" property of metastable states. J. Stat. Phys., 89: 1035-1046.
- Keskin, M., Ekiz, C. and Yalçın, O. 1999. Stable, metastable and unstable solutions of the Blume-Emery-Griffiths model. *Physica A*, 267: 392-405.
- Keskin, M. and Solak, A. 2000. Dynamics of the spin-1 Ising Blume-Emery-Griffiths model by the path probabilty method. *J. Chem. Phys.*, 112: 6396-6403.
- Keskin, M. and Ekiz, C. 2000. The metastable phase diagram of the Blume-Emery-Griffiths model in addition to the equilibrium phase diagram. *J. Chem. Phys.*, 113: 5407-5412.
- Keskin, M. and Erdem, R. 2002. Effect of the off-diagonal Onsager rate cofficient on the relaxation times in the spin-1 Ising systems. *Phys. Lett. A*, 297 (5-6): 427-431.
- Keskin, M. and Erdem, R. 2003. Critical behavior of the sound attenuation in a Spin-1 Ising model. J. Chem. Phys., 118 (13): 5947-5954.

- Keskin, M. and Erdinç., A. 2004. Multicritical phase diagrams of the Blume-Emery-Griffiths model with repulsive biquadratic coupling including metastable phases: the pair approximation and the path probability method with pair distribution. J. Magn. Magn. Mater., 283: 392-408.
- Kikuchi, R. 1960. Irreversible cooperative phenomena. Annals of Physics., 10: 127-151.
- Kikuchi, R. 1974. Superposition approximation and natural iteration calculation in cluster-variation method. *J. Chem. Phys.*, 60 (3): 1071-1080.
- Koza, Z., Jasiukiewicz, C. and Pękalski, A. 1990. Transfer matrix methods in the Blume-Emery-Griffiths model. *Physica A*, 164: 191-206.
- Lapinskas, S. and Rosengren, A. 1994. Blume-Emery-Griffiths model on threedimensional lattices: Consequences for the antiferromagnetic Potts model. *Phys. Rev. B*, 49: 15190-15196.
- Lajzerowicz, J., Sivardière, J. 1975. Spin-1 Lattice Gas model. I. Condensation and solidification of a simple fluid. *Phys. Rev. A*, 11: 2079-2089.
- Luque, L., Grigera, S. A. and Albano, E. V. 2019. Numerical simulations study of a spin-1 Blume-Emery-Griffiths model on a square lattice. *J. Stat. Mech.*, 3: 033210.
- May, H. and Mausbach, P. 2012. Riemannian geometry study of vapor-liquid phase equilibria and supercritical bahavior of the Lennard-Jones fluid. *Phys. Rev. E*, 85: 031201.
- May, H., Mausbach, P. and Ruppeiner, G. 2013. Thermodynamic curvature for attractive and repulsive intermolecular forces. *Phys. Rev. E*, 88: 032123.
- May, H., Mausbach, P. and Ruppeiner, G. 2015. Thermodynamic geometry of supercooled water. *Phys. Rev. E*, 91: 032141.
- Meijer, P. H. E. and Stamm, W. C. 1978. Phase diagram and critical points for a metamagnetic Ising model using constant coupling approximation. *Physica A*, 90: 77-96.

- Meijer, P. H. E., Keskin, M. and Bodegom, E. 1986. A simple model for the dynamics towards metastable states. *J. Stat. Phys.*, 45: 215-232.
- Mijatović, M., Veselinović, V. and Trenčeveski, K. 1987. Differantial geometry of equilibrium thermodynamics. *Phys. Rev. A*, 35 (4): 1863-1867.
- Mirza, B. and Talaei, Z. 2013. Thermodynamic geometry of a kagome Ising model in a magnetic field. *Phys. Lett. A*, 377: 513-517.
- Netz, R. R. 1992. New phases and multiple re-entrance of the Blume-Emery-Griffiths model with repulsive biquadratic coupling: Monte Carlo Renormalization-Group Theory. *Europhys. Lett.*, 17: 373-377.
- Netz, R. R. and Berker, A. N. 1993. Renormalizaton-Group Theory of an internal critical-end-point structure: The Blume-Emery-Griffiths model with biquadratic repulsion. *Phys. Rev. B*, 47: 15019-15022.
- Newman, K. E. and Dow, J. D. 1983. Zinc-blend-diamond order-disorder transition in metastable crystalline  $(GaAs)_{1-x}Ge_{2x}$  alloys. *Phys. Rev. B*, 27 (12): 7495-7508.
- Onsager, L. 1931. Reciprocal relations in irreversible processes. I. Phys. Rev., 37: 405-426.
- Onsager, L. 1944. Crystal Statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, 65: 117-149.
- Osório, R., Oliveira, M. J. and Salinas, S. R. 1989. The Blume-Emery-Griffiths model on a Bethe lattice: bicritical line and re-entrant behaviour. *J. Phys.: Condens. Matter.*, 1: 6887-6892.
- Özüm, S. and Erdem, R. 2020. Determination of the steady-state kinetics in a spin-1 Ising model using path probability method. *Mod. Phys. Lett. B*, 34 (30): 2050338.
- Pawlak, A., Erdem, R., and Gülpınar, G. 2019. Dynamic dipolar and quadrupolar susceptibilities for the Blume-Emery-Griffiths model based on Onsager theory of irreversible thermodynamics. J. Magn. Magn. Mater., 472: 86-95.

- Plascak, J. A. and Silva N. P. 1982. A double chain approximation to the Ising model. *Phys. Stat. Sol. (b)*, 110: 669-675.
- Rosengren, A. and Lapinskas, S. 1993. Phase diagrams of the Blume-Emery-Griffiths model on the honeycomb lattice calculated by the cluster-variation method. *Phys. Rev. B*, 47: 2643-2647.
- Ruppeiner, G. 1979. Thermodynamics: A Riemannian geometric model. *Phys. Rev. A*, 20 (4): 1608-1613.
- Ruppeiner, G. and Davis. C. 1990. Thermodynamic curvature of the multicomponent ideal-gas. *Phys. Rev. A*, 41 (4): 2200-2202.
- Ruppeiner, G. 1991. Riemannian geometric theory of critical phenomena. *Phys. Rev. A*, 44 (6): 3583-3595.
- Ruppeiner, G. 1995. Riemannian geometry in thermodynamic fluctuation theory. *Rev. Mod. Phys.*, 67 (3): 605-659.
- Ruppeiner, G. 1998. Riemannian geometric approach to critical points: General theory. *Phys. Rev. E*, 57 (5): 5135-5145.
- Ruppeiner, G. 2012. Thermodynamic curvature from the critical point to the triple point. *Phys. Rev. E*, 86: 021130.
- Ruppeiner, G., Sahay, A., Sarkar, T. and Sengupta, G. 2012. Thermodynamic geometry, phase transitions and the Widom line. *Phys. Rev. E*, 86: 052103.
- Ruppeiner, G. and Bellucci, S. 2015. Thermodynamic curvature for a two-parameter spin model with frustration. *Phys. Rev. E*, 91: 012116.
- Ruppeiner, G., Mausbach P. and May, H. 2015. Thermodynamic *R*-diagrams reveal solid-like fluid states. *Phys. Lett. A*, 379: 646-649.
- Santos, J. P. and Sá Barreto, F. C. 2016. Tricritical behavior of the Blume-Emery-Griffiths model on a Kagomé lattice: Effective-field theory and Rigorous bounds. *Physica A*, 442: 22-35.

- Sanwari, R. and Sahay A. 2022a. Thermodynamic geometry of spin-one lattice models.I. Spin quadrupolar orders and critical scaling functions in one dimension. *Phys. Rev. E*, 105: 034134.
- Sanwari, R. and Sahay A. 2022b. Thermodynamic geometry of spin-one lattice models. II. Critically and coexistence in the mean-field approximation. *Phys. Rev. E*, 105: 034135.
- Schick, M. and Shih W. H. 1986. Spin-1 model of a microemulsion. *Phys. Rev. B*, 34: 1797-1801.
- Sivardière, J., Lajzerowicz, J. 1975a. Spin-1 Lattice Gas model. II. Condensation and phase seperation in a binary fluid. *Phys. Rev. A*, 11: 2090-2100.
- Sivardière, J., Lajzerowicz, J. 1975b. Spin-1 Lattice Gas model. III. Tricritical points in binary and ternary fluids. *Phys. Rev. A*, 11: 2101-2110.
- Stanley, H. E. 1971. "Mean Field Theory of Magnetic Phase Transitions". Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena, Oxford University Press, pp. 79-91, Oxford.
- Tanaka, M. and Mannari, I. 1976. Phase transitions of a solvable spin-one system with bilinear and biquadratic interactions. *J. Phys. Soc. Japan*, 41 (3): 741-746.
- Tanaka, M. and Kawabe, T. 1985. Spin-One Ising model including biquadratic interaction with positive coupling constant. *J. Phys. Soc. Japan*, 54 (6): 2194-2203.
- Takahashi, K. and Tanaka, M. 1979. Spin-one Ising model with bilenear and biquadratic interactions. *J. Phys. Soc. Japan*, 46 (5): 1428-1433.
- Temirci, C., Kökçe, A. and Keskin, M. 1996. Equilibrium properties of a spin-1 Ising system with bilinear, biquadratic and odd interactions. *Physica A*, 231: 673-686.
- Temizer, Ü., Kantar, E., Keskin, M., Canko O. 2008. Multicritical dynamical phase diagrams of the kinetic Blume-Emery-Griffiths model with repulsive biquadratic coupling in an oscillating field. J. Magn. Magn. Mater., 320 (11): 1787-1801.

- Tucker, J. W. 1988. The effective-field theory of the isotropic Blume-Emery-Griffiths model. J. Phys. C: Solid State Phys., 21 (36): 6215-6218.
- Tucker, J. W. 1989a. Improved Effective Field Treatment of the BEG model. J. Magn. Magn. Mater., 80: 203-210.
- Tucker, J. W. 1989b. The tri-critical point in the isotropic Blume-Emery-Griffiths model. J. Phys.: Condens. Matter, 1: 485-489.
- Tucker, J. W. 1991. The spin-1 Ising model on a honeycomb lattice. J. Appl. Phys., 69: 6164-6166.
- Tucker, J. W. 1992. Effective field theory of a quenched dilute spin-1 Ising model. J. Magn. Magn. Mater., 104-107, 191-192.
- Tucker, J. W., Balcerzak, T., Gzik, M. and Sukiennicki, A. 1998. Phase diagram of a spin-1 magnetic bilayer by cluster variational theory: Exact results for a BEG model on a Bethe lattice with five-fold coordination. J. Magn. Magn. Mater., 187: 381-392.
- Velychko, O. V. and Stasyuk, I.V. 2019. Thermodynamics of quantum lattice system with local multi-well potentials: dipole ordering and strain effects in modified Blume-Emery-Griffiths model. *Phase Transitions*, 92 (5): 420-429.
- Yalçın, O., Erdem, R. and Özüm, S. 2014. Origin of the martensitic and austenitic phase transition in core-surface smart nanoparticles with size effects and hysteretic splitting. J. Appl. Phys., 115: 054316.
- Wang, Y. L. and Wentworth, C. 1987. Phase diagrams of three-dimensional Blume-Emery-Griffiths model. J. Appl. Phys., 61: 4411-1412.
- Wang, Y. L., Lee, F. and Kimel, J. D. 1987. Phase diagrams of the spin-1 Ising Blume-Emery-Griffiths model: Monte Carlo simulations. *Phys. Rev. B*, 36: 8945-8947.
- Wannier, G. H. 1945. The statistical problem in cooperative phenomena. *Rev. Mod. Phys.*, 17 (1): 50-60.

- Weinhold, F., 1975. Metric geometry of equilibrium thermodynamics. J. Chem. Phys., 63 (6): 2479-2483.
- Wilson, K. G. 1971. Renormalization group and critical phenomena. I. Renormalization group and the Kadanoff scaling picture. *Phys. Rev. B*, 4 (9): 3174-3183.
- Žukovič, M. 2012. Ground states of the frustrated Blume-Emery-Griffiths model in a field. *Phys. Lett. A*, 376: 3649-3653.

# ÖZGEÇMİŞ



### Nigar ALATA

#### nigaralata@akdeniz.edu.tr

Doktora	Akdeniz Üniversitesi
2014-2022	Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalı, Antalya
Yüksek Lisans	Gazi Üniversitesi
2006-2009	Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalı, Ankara
Lisans	Gazi Üniversitesi
2001-2006	Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Ankara

# ÖĞRENİM BİLGİLERİ

## MESLEKİ VE İDARİ GÖREVLER

Öğretim Görevlisi	Akdeniz Üniversitesi
2013-Devam Ediyor	Gıda Güvenliği ve Tarımsal Araştırmalar Merkezi, Antalya

#### **ESERLER**

## Uluslararası hakemli dergilerde yayımlanan makaleler

1- Erdem, R. and Alata N. (2020). Ruppeiner geometry of isotropic Blume-Emery-Griffiths model. *Eur. Phys. J. Plus*, 135 (11), 911. Doi.org/10.1140/epjp/s13360-020-00934-3

#### Uluslararası bilimsel toplantılarda sunulan ve bildiri kitaplarında basılan bildiriler

- 1- Erdem, R. and Alata, N. (2019). A geometrical perspective on the phase and phase transitions in a spin-1 Ising system. 44th Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics, Münih, Almanya. (Özet Bildiri)
- 2- Alata, N. and 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, Riga, Letonya. (Özet Bildiri)