T.C.
TRAKYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

İKİ BOYUTTA ETKİLEŞEN TUZAKLANMIŞ AŞIRI SOĞUK BOZONLAR

Ali ihsan MEŞE

DOKTORA TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

Danışman :1. Prof. Dr. Erol OKAN
2. Prof.Dr. Zehra AKDENİZ

EDİRNE – 2010

T.C.

TRAKYA ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

İKİ BOYUTTA ETKİLEŞEN TUZAKLANMIŞ AŞIRI SOĞUK BOZONLAR

DOKTORA TEZİ

FİZİK ANA BİLİM DALI

Ali İhsan MEŞE

Bu tez 18/05/2010 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından kabul edilmiştir.

Prof. Dr. Ş. Erol OKAN
I. Danışman

Prof. Dr. Zehra AKDENİZ
II. Danışman

Prof. Dr. Hasan AKBAŞ
Üye

Doç. Dr. Taner TIMARCI
Üye

Yrd. Doç. Dr. Şaban AKTAŞ
Üye

Doktora Tezi
İki Boyutta Etkileşen Tuzaklanmış Aşırı Soğuk Bozonlar
Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

ÖZET

İki boyutlu bir manyetik tuzakta hapsedilmiş ve birbirleriyle güçlü etkileşme içerisinde olan aşırı soğuk bozonların lokalizasyonu, logaritmik ve Bessel fonksiyonları ile tanımlı iki farklı model kullanarak incelenmiştir. Bose-Einstein yoğuşmasında sonlu sayıdaki girdaplar ile Abrikosov örgülerini anlamaya yönelik, Hartree, Hartree-Fock ve varyasyonel yöntemleriyle ayrı hesaplamalar yapılmıştır. Sayısı 2 ile 9 arasında değişen bozonik Rubidyum atomlarından oluşmuş sistemin taban durum enerjileri ve yoğunluk profilleri elde edilmiştir.

İzotropik tuzak altında, yoğuşmanın fiziksel özellikleri parçacıklar arasındaki etkileşme şiddeti değiştirilerek incelenmiştir. Böylelikle atomlar arasındaki güçlü etkileşmelerin sebep olduğu simetri kırılmaları nedeniyle, Bose-Einstein yoğuşmasından, fermiyonik kristal fazına geçiş açık bir şekilde görülmektedir. Sonuçlar, varyasyonel yöntemlerin Wigner Molekülü lokalizasyona, Hartree-Fock yaklaşımının bir süper molekülün delokalizasyonuna izin verdiği görülmüştür. Ek olarak, logaritmik etkileşme potansiyeli kullanımı ile kristalleşen bozonlar Coulombik etkileşmelere göre farklı kristalizasyon oluşturmaktadır.

Anizotropik harmonik tuzak potansiyelinin etkileri, kristal yapılar için incelenmiştir. Anizotropi parametresinin azaltılması ile bozonik atomların iki boyutlu dağılımdan bir boyutlu dağılıma geçiş yaptığı görülmüştür. Ayrıca, Bose-Einstein yoğuşması ile Wigner kristalizasyonu arasındaki geçiş kriterleri analitik bir metot geliştirilerek belirlenmiştir.

Yıl: 2010
Sayfa:121

Anahtar Kelimeler: Bose Einstein Yoğuşması, Wigner Kristali, Süper molekül, Varyasyonel metot, Hartree-Fock Metodu, Harmonik tuzak.

PhD Thesis

Interacting Ultra Cold Bosons Confined in Two Dimensions

Trakya University, Graduate School of Natural and Applied Science

Department of Physics

SUMMARY

The localization of strongly coupled ultra cold bosonic atoms confined in a two dimensional magnetic trap is investigated via two different models of interparticle interactions, that are a logarithmic potential and a potential described by Bessel functions. An understanding towards the Abrikosov lattice formation by a finite number of vortices in Bose-Einstein Condensate have been developed by using various calculations, namely Hartree, Hartree-Fock and the variational methods. The ground state energies and the density profiles have been obtained for the systems of bosonic Rubidium atoms with their number ranging from two to nine.

Physical properties of the condensate are analyzed by varying the strength of the interparticle interactions under an isotropic trap geometry. Therefore an obvious phase transition from Bose-Einstein Condensation to the fermion-like crystals is observed due to the broken symmetry causing from strong correlations between the atoms. The results exhibit that the variational method allows the localization of Wigner Molecules while Hartree-Fock approximation obtains the delocalization of a supermolecule. Also the use of logarithmic interaction potential crystallizes the bosons to different configuration than that of Coulombic interactions.

The effects of anisotropic harmonical trap potential are also investigated for the crystalline structures. It has been shown that the bosonic atoms are driven from a two dimensional configuration to that of one dimensional, if the anisotropy parameter is small. In addition, the transition criterions between Bose-Einstein Condensate and Wigner Crystallization have been determined by developing an analytical method.

.

Year: 2010

Pages: 121

Key Words: Bose Einstein Condensation, Wigner Crystal, Super Molecule, Variational Method, Hartree-Fock Method, Harmonic trap.

TEŞEKKÜR

Tüm doktora çalışma sürecim boyunca çalışmayı yönlendiren, danışmanlığımı üstlenen ve çalışmanın her adımında bilgilerinden yararlandığım danışmanlarım sayın hocalarım Prof. Dr. Ş. Erol OKAN' a ve Prof.Dr. Zehra Akdeniz'e,

Çalışmanın tamamı boyunca yardımını ve bilgisini hiç esirgemeyen hocam Yard.Doç.Dr. Şaban AKTAŞ , Dr. Pablo CAPUZZİ ve Prof. Dr. Mario TOSI'ye,

Ders aşamasında bilgilerinden faydalandığım Fizik bölümü hocalarıma,

Kısa periyotlar içinde yapılan dönemlik savunma zamanlarında sabırla dinleyip, cesaretlendirdiği için T.Ü. Mühendislik – Mimarlık Fakültesi Makine Mühendisliği Bölümü öğretim üyelerinden Doç. Dr. Taner TIMARCI 'ya,

Çalışmanın yapım ve yazım aşamalarında yaptığı sayısız ve paha biçilmez yardımlarından dolayı Arş.Gör. Engin ÇİÇEK ve değerli arkadaşım Deniz EKŞİ'ye, her adımda verdikleri destek ve moral için arkadaşlarım Özge KILIÇOĞLU ve Barış ÖZKAPI'ya,

Ayrıca bu tez Trakya Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Müdürlüğü tarafından TÜBAP-2008/42 nolu projeyle desteklenmiştir. Trakya Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Müdürlüğü'ne

Her an yanımda olup, sevgilerini hiç eksik etmedikleri için Anne ve Babama, sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

İÇİNDEKİLER

ÖZET i
SUMMARY ii
TEŞEKKÜR iii
SEMBOLLER ve KISALTMALAR vi
TABLOLARIN ve ŞEKİLLERİN LİSTESİ viii

1. GİRİŞ 1

1.1. Bose-Einstein Yoğuşmasının (BEY) Tarihsel Gelişimi 9
1.2. Alkali Atomlarla Bose-Einstein Yoğuşması (BEY) 11
1.3. Laboratuar Ortamında Soğutma ve Tuzaklama 12
1.4 Parçacıklar Arası Güçlü İticiliği Olan Birkaç Bozonlu Sistem 15
1.5 Pseudo Potansiyel Yaklaşıklığı 16
1.6 İtici Potansiyel Şiddeti ve Bozon Molekülünün Oluşumu (Tonks Bölgesi) 18

2. ETKİLEŞEN SİSTEMLERDE ÇÖZÜM YÖNTEMLERİ 21

2.1 Çok Parçacık Problemi 22
2.2 Born-Oppenheimer Yaklaşımı 23
2.3 Dalga Fonksiyonu Yaklaşıklıkları 24
2.3.1 Bogoliubov Yaklaşımı 24
2.3.2 Gross-Pitaevskii Denklemi 25
2.3.3 Hartree Yaklaşımı 29
2.3.4 Hartree-Fock Yaklaşımı 30
2.3.5. Varyasyon Yöntemi 31
2.3.6 Monte Carlo Yöntemi 33
2.4 Yoğunluk Fonksiyoneli Yaklaşımları 34
2.4.1 Thomas-Fermi Yaklaşımı 35
2.4.2 Hohenberg-Kohn teorisi 36
2.4.3 Kohn-Sham Denklemleri 37

2.5 Çözüm Yöntemlerinin Kıyaslanması Ve Bozonlara Uygulanması 38

3. HARTREE-FOCK VE VARYASYONEL YAKLAŞIMIN BOZONİK SİSTEMLER İÇİN TEORİSİ 41

3.1 Bozonlar İçin Hartree-Fock Yaklaşıklığı 43
3.2 Bozonlar için Gaussian Yaklaşıklığı 49

4. İZOTROPİK TUZAK İÇİNDEKİ BOZONLAR İÇİN HARTREE, HARTREE-FOCK VE VARYASYONEL SONUÇ 52

4.1 Etkileşme Potansiyelin İncelenmesi 54
4.2 Hartree, Hartree-Fock ve Varyasyon Yöntemi ile Sistemin Toplam Enerjisinin Bulunması 60
4.3 Yoğunluk Dağılımın İncelenmesi ve Tek Parçacık Matrisleri 70
4.3.1. Wigner Kristali(Molekülü) 73
4.3.2. Süper Molekül 77

5. ANİZOTROPİK TUZAK VE VARYASYONEL SONUÇLAR 83

5.1 Deneysel Düzenek ve Çalışma Prensibi 86
5.2 Yoğunluk Dağılımının İncelenmesi 87
5.3 Sonuçların Bazı Deneysel ve Teorik Çalışmalarla Karşılaştırılması 93
5.4 Eylemsizlik Momenti 99
5.5 Faz Geçişinin Nümerik Olarak Belirlenmesi 105

6. SONUÇLAR VE DEĞERLENDİRME 111

KAYNAKLAR 113

ÖZGEÇMİŞ 121

SEMBOLLER ve KISALTMALAR

SEMBOLLER

λ_{dB}	: de Broglie dalga boyu
w_{3D}	: Çiftlenim (coupling) sabiti
γ	: Etkileşme ve kinetik enerji oranı
$\psi(r)$	: Sistemin dalga fonksiyonu
V(r)	: Dış potansiyel
$V\left(\lvert\vec{r}-\vec{r}'\rvert\right)$	: Etkileşme potansiyeli
$V_{iyon}(r)$	: İyonlar arası etkileşme potansiyeli
$V_H(r)$	: Elektronlar arası etkileşme potansiyeli
μ	: Kimyasal potansiyel
$n(r)$	: Parçacık yoğunluğu
$\psi^+(r)$	: Yaratıcı alan operatörü
$\psi(r)$	: Yok edici alan operatörü
$K_0(r)$	: Bessel fonksiyonu
$\hat{d}^+ ve \hat{d}$	: Artırma ve azaltma operatörleri
S_{ij}	: Örtüşme matrisi
α	: Anizotropi parametresi
l_0	: Manyetik uzunluk
κ	: Potansiyelin erim uzunluğu
V_0	: İtici potansiyel şiddeti (çiftlenim sabiti)
$\phi_i(r)$	: Tek parçacık dalga fonksiyonu
r_s	: Wigner Seitz yarıçapı
a_B	: Bohr yarıçapı
a_x ve a_y	: Parçacığın x ve y eksenindeki konumu

σ	: Gaussian dalga fonksiyonun genişliği
I	: Eylemsizlik momenti
N_0	: Toplam parçacık sayısı
N	: Herbir enerji seviyesindeki parçacık sayısı
V_{kritik}	: Kritik potansiyel değeri

KISALTMALAR

BEY	: Bose Einstein Yoğuşması
BCS	: J. Bordan, L.N. Cooper ve J.R. Schreffer
MOT	: Manyetik optik tuzak
TOP	: Zaman yörüngesel potansiyel
HFB	: Hartree-Fock Bogoliubov yaklaşıklığı
QMC	: Kuantum Monte Carlo yöntemi
YFT	: Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi
GP	: Gross Pitaevski Teoremi
TD	: Taban durum
UBHF	: Sınırlandırılmamış Bose Hartree-Fock Yaklaşıklığı
IMSL	: Uluslar arası Matematiksel ve İstatistiksel Kütüphaneler
DUMPOL	: Çok değişkenli fonksiyonlarım minimizasyonu
RHF	: Sınırlandırılmış Hartree-Fock Yaklaşıklığı
VMC	: Varyasyonel Monte Carlo yöntemi

TABLOLAR

Tablo 1.1 Kinetik ve Etkileşme enerjilerin ve çiflenim sabitinin farklı boyutlarda yaklaşık ifadeleri gösterilmesi 18
Tablo 4.1 Yoğunluk dağılımının parçacık sayına göre değişik etkileşme potansiyelleri için karşılaştırılması 76

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil 1. 1: Bose-Einstein yoğuşması için şematik bir gösterim 7
Şekil 1. 2: Yoğunluk profillerinin sıcaklığa bağlı değişimine göre BEY 8
Şekil 1. 3: Lazerler yardımıyla parçacıkların yavaşlatılması 13
Şekil 1. 4: Buharlaştırarak Soğutma konfigürasyonu 13
Şekil 1. 5: Optik kristal örgü gösterimi 14
Şekil 1. 6: Bozon gazının farklı etkileşme şiddetleri için davranışını gösterilmesi 20
Şekil 4. 1: Etkileşme enerjisinin logaritmik ve Bessel fonksiyonu için konuma bağlı değişimi ve karşılaştırılması 57
Şekil 4.2: Bessel ve logaritmik potansiyelin etkileşme enerjisine etkisinin karşılaştırılması 58
Şekil 4. 3: Toplam potansiyel enerjinin Logaritmik ve Bessel fonksiyonu için konuma bağlı değişimi ve karşılaştırılması 59
Şekil 4. 4: İki parçacığın toplam enerjisinin çiftlenim sabitine göre değişiminin üç farklı yaklaşıklık ile incelenmesi 63
Şekil 4. 5: Üç parçacığın toplam enerjisinin çiftlenim sabitine göre değişiminin üç farklı yaklaşıklık ile incelenmesi 64
Şekil 4. 6: Dört parçacığın toplam enerjisinin çiftlenim sabitine göre değişiminin üç farklı yaklaşıklık ile incelenmesi 65
Şekil 4. 7: Beş parçacığın toplam enerjisinin çiftlenim sabitine göre değişiminin üç farklı yaklaşıklık ile incelenmesi 66
Şekil 4. 8: Altı parçacığın toplam enerjisinin çiftlenim sabitine göre değişiminin üç farklı yaklaşıklık ile incelenmesi 67

Şekil 4.9: Altı parçacık için taban durum enerjisinin araştırılması 68
Şekil 4.10: Yedi parçacık için taban durum enerjisinin araştırılması 69

Sekil 4.11: Yoğunluk profillerinin farklı çiftlenim sabiti şiddetine göre değişimi 79
Şekil 4.12: İki parçacık için yoğunluk dağılımının iki farklı yöntemle incelenmesi 80
Şekil 4.13: Dört parçacık için yoğunluk dağılımının iki farklı yöntemle incelenmesi 81
Şekil 4.14: Altı parçacık için yoğunluk dağılımının iki farklı yöntemle incelenmesi 82
Şekil 5. 1: Toplam enerjinin anizotropi parametresine bağlı değişimi 85
Şekil 5. 2: Deneysel Düzenek 86
Şekil 5.3: Dört parçacık için yoğunluk dağılımlarının farklı çiftlenim sabiti ve anizotropi parametreleri için incelenmesi 89
Şekil 5.4: Beş parçacık için yoğunluk dağılımlarının farklı çiftlenim sabiti ve anizotropi parametreleri için incelenmesi 90
Şekil 5.5: Altı parçacık için yoğunluk dağılımlarının farklı çiftlenim sabiti ve anizotropi parametreleri için incelenmesi 91
Şekil 5.6:Dokuz parçacık için yoğunluk dağılımlarının farklı çiftlenim sabiti ve anizotropi parametreleri için incelenmesi 92
Şekil 5. 7: Dört parçacık için yoğunluk dağılımı çiftlenim sabiti $V_0 = 5\hbar w$ değerinde anizotropi parametresine göre değişimin incelenmesi 95
Şekil 5. 8: Beş parçacık için yoğunluk dağılımın çiftlenim sabiti $V_0 = 5\hbar w$ değerinde anizotropi parametresine göre değişimin incelenmesi 96
Şekil 5. 9: Altı parçacık için yoğunluk dağılımın çiftlenim sabiti $V_0 = 5\hbar w$ değerinde anizotropi parametresine göre değişimin incelenmesi 97
Şekil 5. 10: Dokuz parçacık için yoğunluk dağılımın çiftlenim sabiti $V_0 = 5\hbar w$ değerinde anizotropi parametresine göre değişimin incelenmesi 98
Şekil 5. 11: Eylemsizlik momentinin x ve y bileşenlerinin (I_x / I_y) oranının çiftlenim sabitine göre değişiminin farklı anizotropi parametreleri için incelenmesi 102
Şekil 5. 12: Eylemsizlik momentinin x ve y bileşenlerinin oranının (I_x / I_y) anizotropi parametresine göre değişiminin incelenmesi 103

Şekil 5. 13: Yoğunluk dağılımının çiftlenim sabiti $V_0 = 5\hbar w$ değerinde parçacık sayısı N_0=4, 5, 6 ve 9 olduğunda anizotropi parametresi $\alpha = 0{,}2$ ve $\alpha = 0.1$ için değişiminin incelenmesi 104

Şekil 5.14: N/N_0 oranının çiftlenim sabitine göre değişimi anizotropi parametresi $\alpha = 1, 0.9, \ldots\ldots, 0.1$ değerleri için incelenmesi 107

Şekil 5.15: N/N_0 oranının çiftlenim parametresine göre değişimi anizotropi parametresi $\alpha = 1$ *ve* 0.5 alındığında 4, 5, 6 ve 9 parçacık için incelenmesi 108

Şekil 5.16: N/N_0 oranının çiftlenim sabitine göre değişimi ve fonksiyona göre fit eğrisi anizotropi parametresi $\alpha = 1$ *ve* 0.5 olduğunda sırasıyla 4,6 ve 9 parçacık için incelenmesi 109

Şekil 5.17: Kritik çiftlenim sabitinin iki farklı yaklaşım altında anizotropi parametresine göre değişimi sırasıyla N_0=4, 5, 6 ve 9 parçacık için karşılaştırılması 110

BÖLÜM 1: GİRİŞ

Gazlar, kendi aralarındaki etkileşmeleri sıvı ve katılara göre daha zayıf olan molekül veya atomlardan oluşur. Fiziksel davranış açısından gazları klasik ve kuantum gazları olarak iki sınıfa ayırmak mümkündür. Bose-Einstein Yoğuşması (BEY), sadece kuantum gazlarında gözlenen bir kavramdır ve bu açıdan klasik gazlardan farklılığının incelenmesi gerekir.

Bir gazı oluşturan moleküller topluluğunun çok az sayıdaki bir alt kümesi çarpışmalar yoluyla güçlü etkileşmelere girerler. Moleküller arası kuvvetler Van der Waals kuvvetleri olarak tanımlanır. Buna göre, moleküller herhangi bir anda çaplarından daha büyük mesafelere uzaklaştırıldığında etkileşimin büyüklüğü, aralarındaki uzaklığın altıncı kuvvetiyle hızlı bir şekilde azalır. Bu nedenle düşük yoğunluklarda gaz moleküllerinin birbirleriyle etkileşmeleri çok küçük potansiyel enerjilere sahiptir. Moleküller arasında ortalama uzaklık 30 Aº mertebesindedir bu da bir molekülün çapının 10 katı kadardır (Ketterle, 1999).

İdeal gaz, moleküller arası etkileşme potansiyel enerjisinin hareketin kinetik enerjisi yanında ihmal edilebildiği durumla temsil edilir. Böyle bir gazı temsil eden bölüşüm fonksiyonu ve dolayısıyla gazın serbest enerjisi, klasik istatistik mekaniğe uygun, Maxwell-Boltzman istatistiği ile elde edilir.

İçerisinde N tane molekülden oluşan V hacimli bir kutunun bir ısı banyosunda olduğu büyük kanonik topluluğu ele alalım. Gazın bir molekülünün herhangi bir parçacığını bir durumda bulunma olasılığı ile tanımlanan mümkün olan durumların sayısı, moleküllerin sayısıyla listelenebilir. Buna göre, 1.nci durumda bulunan molekül n_1, 2.nci durumda bulunan molekül n_2 ve r.nci durumda bulunan molekülde n_r durumunu işgal eder. Toplam molekül sayısı seviyelerdeki parçacık sayısının toplamı cinsinden

$$N = \sum n_r \tag{1.1}$$

ile verilir. Sistem yeterince büyük seçildiğinde enerji seviyeleri birbirine oldukça yakın olacağından moleküllerin enerjileri girilebilir durumların sayısı ile ilişkilendirilir. Moleküllerin enerjileri

$$E_1 \leq E_2 \leq ..... \leq E_r \tag{1.2}$$

olarak sıralanır.

Gazların teorisinde momentumu p olan bir m kütleli parçacığa eşlik eden De Broglie dalga boyu λ_{dB} yaklaşık olarak

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}} \tag{1.3}$$

termal dalga boyuna eşittir. Burada h Plank sabiti, k_B Boltzman sabiti, T ise gazın sıcaklığıdır. Bir gazın parçacık yoğunluğu n ile gösterilirse, bir parçacığın çevresindeki hacim $1/n$ ve parçacıklar arasındaki ortalama uzaklık $(1/n)^{1/3}$ olur. Böylece gazları sınıflandırmak üzere aranılan kriter elde edilir. Termal dalga boyu ile parçacıklar arasındaki mesafe karşılaştırılırsa,

$$\begin{aligned} \lambda << (1/n)^{1/3} \quad &\rightarrow \textit{Klasik Gaz} \\ \lambda >> (1/n)^{1/3} \quad &\rightarrow \textit{Kuantum Gazı} \end{aligned} \tag{1.4}$$

ayrımı yapılabilir. Başka bir ifade ile, parçacıklar arasındaki uzaklık termal dalga boyundan büyük ise de Broglie dalgaları yeterli ölçüde girişim yapamazlar. Bu tip parçacıklar Newton mekaniğine uyarlar ve gaz klasiktir. Ancak parçacıkların de Broglie dalga boyları moleküller arası ortalama serbest yola yakın veya eşit büyüklükte ise girişim ortaya çıkar. Gaz artık kuantum rejimindedir (Karaoğlu, 2003).

Kuantum rejiminde bir gazın fiziksel davranışını anlayabilmek için kuantum istatistiği bakış açısından girilebilir durumların sayısını ve diğer özelliklerini bilmek gereklidir. Kuantum mekaniğine göre girilebilir durumların sayısı $n_1, n_2 ...$ setinin bütün keyfi değerleri alamaz. Kısıtlamalar vardır. Kuantum mekaniksel açıdan bakıldığında

birbirinden ayırt edilemeyen parçacıkların bulunduğu çok parçacıklı bir sistemin toplam dalga fonksiyonu, parçacıkların yer değiştirmesine göre ya simetrik ya da antisimetrik olmalıdır. Parçacıkların dalga fonksiyonunun simetrik ya da antisimetrik olmasını parçacığın sahip olduğu spin belirler. Spin kuantum mekaniğine ait bir kavramdır ve parçacığı temsil eden dalga fonksiyonunun bir dönme operasyonu altında parçacığı tekrar yaratması olarak tanımlanır. Bir parçacığın spin sayısı da bu dönmenin nicelik değerine eşittir. Bir kuantum parçacığı için spin $\hbar$ veya $\hbar/2$ nin tam katları değerine sahiptir

Parçacıklar spin değerine bağlı olarak iki sınıfa ayrılabilir. Bu iki sınıf fiziksel olarak tamamen farklı özelliklere sahiptir. İlk sınıf, doluluk sayısının tamsayı değerler aldığı,

$$n_r = 0,1,2,3,.....,\infty \tag{1.5}$$

parçacıklar kümesidir. Bu sınıftaki parçacıklar Bose-Einstein istatistiğine uyarlar. Örneğin π ve K mezonları, fonon bu sınıfa dâhil olan bozon genel adıyla anılan parçacıklardır. Diğer sınıftaki parçacıklar doluluk sayılarının alabileceği değerler

$$n_r = 0,1 \tag{1.6}$$

olan gruptur. Bu parçacıklar Fermi-Dirac istatistiğine uyarlar. Elektron, pozitron, proton ve nötron bu sınıftaki fermiyon adı verilen parçacıklara örnek olarak verilebilir.

Bose-Einstein yoğuşmasının nasıl meydana geldiğini göstermek için kütlesi sıfırdan farklı bir bozon gazının fiziksel davranışı ele alınır. Bozon gazları, spini bir tam sayıya eşit olan atomlardan oluşur. Bozonlar, fermiyonların tersine Pauli dışarlama ilkesine uymazlar. Bu özellikleri önemli fiziksel sonuçlara yol açmaktadır. Bir bozon gazının dağılım fonksiyonu,

$$\overline{n}_i = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i-\mu)}-1} \tag{1.7}$$

bağıntısı ile verilir. Sistemdeki tüm parçacıkların sayısı ise,

$$N_0 = \sum_i n_i = \sum_i \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} - 1} \tag{1.8}$$

olur. Burada ε_i, kinetik enerjiyi ve μ, kimyasal potansiyeli gösterir. k_B Boltzman sabiti ve T sıcaklık olmak üzere $\beta = \frac{1}{k_B T}$ ile verilir. Parçacıkların termal De Broglie dalga boyu $\lambda_{dB} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}}$ olarak hesaplanabilir. Dalga boyunun sıcaklık ile ters orantılı olduğu kolayca görülebilmektedir (Tosi, 2003). Sistem sıcaklığı düşürülmeye başlandığında, parçacıkları temsil eden De Broglie dalga boyu büyüklüğü artmaktadır (Şekil 1.1). Parçacık sayı yoğunluğu ile orantılı olarak bir $T_c \cong 3.31\frac{\hbar^2 n^{2/3}}{mk_B}$ kritik sıcaklığında dalga paketlerinin süperpozisyonu başlar ve sıcaklık, *T,* azaldıkça güçlenir. V hacim olmak üzere, üç boyutta serbest parçacık için durum yoğunluğu,

$$g(\varepsilon) = \frac{V}{3\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \varepsilon^{1/2} \tag{1.9}$$

ve bu durumların enerji yoğunluğu

$$g(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{V 2\pi (2m)^{3/2}}{h^3} \varepsilon^{1/2} d\varepsilon \tag{1.10}$$

olur. (1.8) bağıntısının integral formunu dikkate alarak (1.10) bağıntısını yeniden yazarsak toplam parçacık sayısı,

$$N_0 = \frac{V 2\pi (2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2}}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} - 1} d\varepsilon \tag{1.11}$$

elde edilir. Sistemin sıcaklığı azaldığında uyarılmış durumdaki parçacıkları sayısı azalırken taban durumdaki parçacıkların sayısı artmaya başlar. Sıcaklık düşürüldüğünde en düşük enerjili taban durumda dahi ($E_1 = 0$), doluluk sayısı negatif olamayacağına göre Bose gazımda kimyasal potansiyel $-\infty < \mu \leq 0$ olmasını gerektirir ve sıcaklık düştükçe kimyasal potansiyel μ'de küçülür. $\mu = 0$ iken $T = T_c$ de minimum kritik bir T_c sıcaklığı tanımlar. Bu kritik sıcaklıktan düşük sıcaklıklarda bir bozon gazının faz değiştireceğine açıkça işaret eder (Şekil 1.2).

Ancak (1.11) denklemi uyarılmış enerji düzeylerindeki parçacıkların sayısını verir. Çünkü denklem $\varepsilon > 0$ değerlerini göz önüne alır. Taban enerji düzeyindeki, enerjisi ve momentumu sıfır olan parçacıkların sayısı,

$$N_l = \frac{1}{e^{-\beta\mu} - 1} \tag{1.12}$$

ve uyarılmış durum

$$N_{\varepsilon>0} = \frac{V 2\pi (2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2}}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} - 1} = 2.612 V \left(\frac{m k_B T}{\hbar^2} \right)^{3/2} \tag{1.13}$$

ile verilir. Böylece, toplam parçacık sayısı

$$N_0 = \frac{1}{e^{-\beta\mu} - 1} + 2.612 V \left(\frac{m k_B T}{\hbar^2} \right)^{3/2} \tag{1.14}$$

elde edilir.

Bozonik gazlar için T_c kritik sıcaklığının üstünde, taban durumdaki parçacıklar tamamen ihmal edilebilirler. Fakat kritik T_c sıcaklığının altında kimyasal potansiyel sıfıra gider. Kritik sıcaklığın altında enerjisi sıfırdan farklı parçacıkların sayısı (1.13) bağıntısı $\mu = 0$ alınarak,

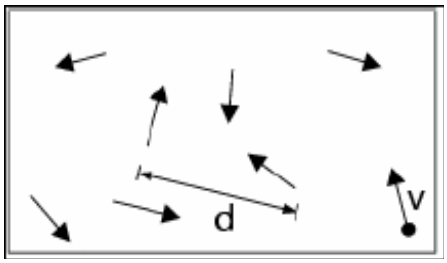
$$\frac{N_{\varepsilon>0}}{N_0} = \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} \tag{1.15}$$

elde edilir. Sonuç olarak $N_{\varepsilon>0} / N$ oranı toplam parçacık sayısı içinde enerjisi $\varepsilon > 0$ olanların kesrini verirken, kalan parçacıkların,

$$(N_1 / N_0) = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} \tag{1.16}$$

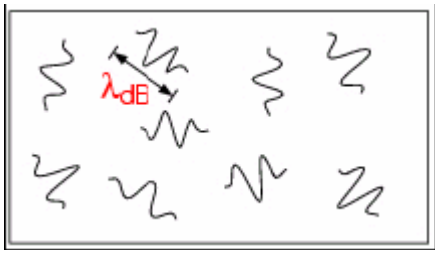
oranı ise enerjisi ve momentumu sıfır olan parçacıkların kesrini verir. Kritik sıcaklığın üstünde taban durumdaki parçacıkların sayısı ihmal edilecek kadar az sayıda iken sıcaklık geçiş sıcaklığının altına düşürüldüğünde parçacıkların çok büyük bir kısmı taban durumda bulunur. Taban enerjisine ulaşan parçacıkların enerjisi ve momentumları sıfır olur. Bu şekilde parçacıkların çok büyük bir kısmı taban durumda bulunmasına Bose-Einstein Yoğuşması (BEY) adı verilir. Yoğuşmanın en önemli fiziksel sonucu, sistemde bulunan tüm bozonik parçacıkların aynı taban enerji durumuna ulaşarak tek bir parçacık gibi davranması şeklinde özetlenebilir. Şekil 1.2 de BEY gösterilmiştir. Fermiyonların aynı kuantum durumunda bulunmaları Pauli dışarlama ilkesine göre imkansızdır. Fermiyonlar bu özelliklerini düşük sıcaklıklarda da korumaktadırlar. Dolayısıyla Fermiyon gazları ile BEY elde edilemez.

a)



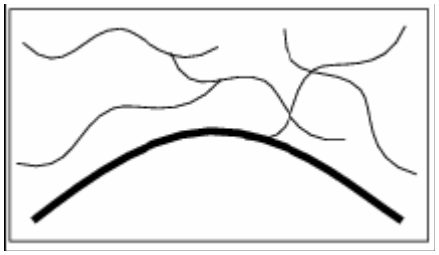
Yüksek $T >> T_c$ sıcaklığında ideal gaz atomları

b)



Düşük $T < T_c$ sıcaklığında $\lambda_{dB} = \frac{\hbar}{mv} \propto T^{\frac{-1}{2}}$

c)

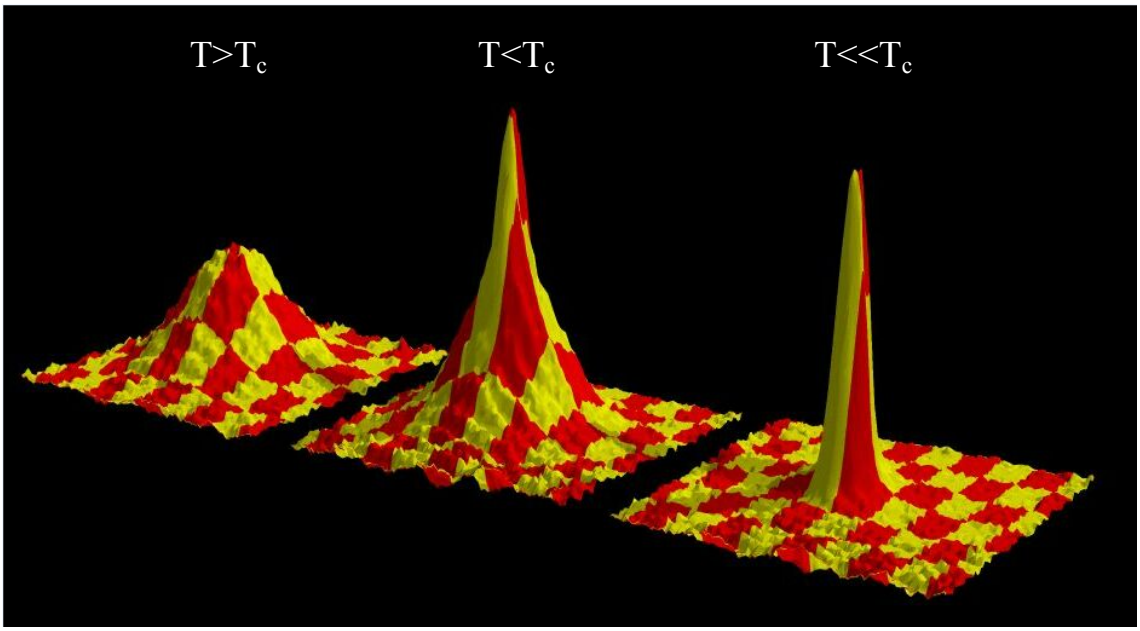


$T << T_c$, BEY $\lambda_{dB} = d$

Şekil 1.1 Bose-Einstein yoğuşmasının şematik olarak tasviri. a) Yüksek sıcaklıklarda zayıf etkileşimli bir gaz 'bilardo topları'ndan oluşan bir sistem gibi davranır. b) Düşük sıcaklıklarda, atomlar λ_{dB} genişliğinde dalga paketleri olarak göz önüne alınırlar. BEY geçiş sıcaklığında, λ_{dB} atomlar arasındaki uzaklıkla karşılaştırılabilir büyüklüktedir. c) Sıcaklık sıfıra yaklaştığında, termal bulut ortadan kaybolması ve saf bozon yoğuşması

Şekil 1.1, ideal gaz atomlarının Bose Einstein Yoğuşmasını nasıl oluşturduğunu açıklamaktadır. Şekil 1.1 a, yüksek sıcaklıklarda atomlar bilardo topları

görüntüsündedir ve ideal gaz atomları serbestçe hareket eder. Şekil 1.1 b, atomun De Broglie dalga boyu ile sıcaklık ters orantılı olduğundan sıcaklık azaldıkca atomların dalga karakteri öne çıkar ve De Broglie dalga boyu ile temsil edilmeye başlarlar. Şekil 1.1.c' de ise atomlar arası uzaklık d ile atomların De Broglie dalga boyu λ_{dB} 'nın karşılaştırılabilir hale geldiği durumdur. T_c kritik sıcaklığın altında BEY'in ortaya çıktığı gözlenir. Yoğunluk profillerinin sıcaklığa bağlı değişimi Şekil 1.2 de gösterilmiştir.



Şekil 1.2 Yoğunluk profillerinin sıcaklığa bağlı değişimine göre BEY

1.1. Bose-Einstein Yoğuşmasın (BEY) Tarihsel Gelişimi

Yirminci yüzyılın başında, ışığın dalga mı yoksa tanecik mi olduğu bilim adamları tarafından tartışılmıştır. Planck bazı deneylerinde ışığın tanecikmiş gibi davrandığını fark etti. Işık sanki devamlı dalgalar değil de, enerji paketcikleri gibi geliyordu. Isıtılan cisimlerden yayılan radyasyonun spektral dağılımının enerjinin kesikli düzeylere sahip olması ile belirlenmişti. Bu keşif 1918 Nobel Fizik ödülünü aldı. Planck'ın sonuçlarını tekrar üreten Einstein, daha sonra Raman spektrumu ile ilişkilendirilecek olan frekans değişimi, atomların ışık ile iyonize edilmesini ve üzerine ışık düşürülen metal yüzeylerden elektron yayınlanmasını sonradan foton adı verilecek enerji paketleri ile açıklandı. Fotoelektrik etki olarak bilinen son açıklama Einstein'e 1921 yılı Nobel ödülü getirdi.

1924 yılında Hintli fizikçi S.N. Bose, ısığın kuanta ya da fotonlar olarak adlandırılan kesikli enerji paketleri olarak davranabileceğini gösterdi (Bose, 1924). Einstein, Bose'nin fotonlar için yaptığı bu çalışmayı ayırt edilemez parçacıklar için genelleştirdi ve etkileşmeyen bozonik parçacıkların toplam sayısının korunması şartı ile tek bir kuantum durumuna yoğuşabileceklerini gösterdi. Böylece Bose-Einstein istatistiği doğmuş oldu ve bu faz geçişi de Bose-Einstein yoğuşması olarak adlandırıldı.

Düşük sıcaklık fiziğinin tarihi 1908 yılında Onnes kaynama sıcaklığı 4.2K olan helyumu sıvılaştırmayı başarmıştı. Üç yıl sonra, Onnes ve arkadaşları metallerin düşük sıcaklıkta dirençlerini incelerken süperiletkenlik olayını keşfetti. Bu nedenle Onnes 1913 yılında Nobel fizik ödülünü kazanmıştır. Ancak 1938 yılında London bu süper akışkanlığın helyum atomlarının bozonik karakterinden kaynaklanması gerektiğini ileri sürdü. Bu tez bozonik karakter taşımayan ve şu an bildiğimiz şekliyle Fermi-Dirac istatistiğine uyan (^3He) izotopunun süper akışkan özelliği ile desteklendi.

Landau, süper akışkanların hiçbir direnç kuvveti ile karşılaşmadan akan bir sıvı gibi davranışını açıklayan teoriyi ilk defa 1941 yılında oluşturuldu. Teoriye göre, girilebilir enerji durumları yeterince azaltıldığında ancak uzun dalga boyuna sahip fotonların uyarılacağını ve böylece süper akışkan bir durum oluşacağı fikrine dayanıyordu (Landau, 1941).

Süperiletkenliğin modern teorisi Bardon, Cooper ve Schrieffer (BCS) tarafından 1957 yılında açıklanmıştır. Bu mikroskobik teori, metallerin elektronları arasındaki etkileşmenin fononlar ile gerçekleştiğini varsaymaktadır. İletim elektronlarının Fermi küresinin oluşturduğu bir metal düşünelim. Bu elektronlar birbirlerini Coulomb kuvveti ile iteceklerdir. Fermi küresinin içindeki diğer elektronların perdelemesi sonucu bu kuvvet azalacaktır. Perdelemeyi de dikkate aldıktan sonra iki elektron arasındaki kuvvet itici küçük bir kuvvettir. BCS teorisine göre, spinleri ve momentumları eşit fakat birbirine zıt iki elektron fonon etkileşmeleri sonucu bir bozon oluştururlar. İki elektrondan oluşan böyle bir sisteme Cooper çifti denir. Normalde elektronlar Fermi-Dirac istatistiğine uyarlar fakat süper iletken geçiş sıcaklığının altında oluşan Cooper çiftleri, olarak da bilinen elektron çiftleri bozon gazı gibi davranarak Bose-Einstein yoğuşmasına benzer bir durumun ortaya çıkmasına yol açarlar. Bu iletim elektronları Fermi yüzeyinin $k_B\theta_D$ enerjisine eşit enerji aralığı içindedirler.

Deneysel gözlemlerin yapılabilmesi için gerekli olan çok düşük sıcaklıklara ulaşmak, atomların lazer ile soğutma tekniklerinden sonra mümkün olmuştur (Letokhov,1979 ve Phillips, 1979). Bölüm 1.3 de bu konuya ayrıntılı değinilecektir. Bunun hemen ardından Phillips, Chu ve Cohen-Tannoudji önceki teorilerin öngördüğü limitler altında soğutma yöntemi geliştirdiler (Nobel Ödülü, 1997) .

Optik tuzak BEY olayının gözlenmesi için son yıllarda sıkça kullanılan bir yöntemdir. Optik tuzaklar çok zayıf olduğundan fiziksel açıdan yeterli sayıda atom toplamak için sabırlı bir tuzaklama süreci gerekir. Phillips'in grubu tuzaklama için daha etkili olan manyetik alan kullandılar. Atomik soğurmanın Zeeman yavaşlatıcılığı ile manyetik alan gradyentinin bir birleşimi olan bu yöntem yararlı bir tuzaklama önerisiydi. Yine de optik tuzaklar düşük boyutlu BEY olaylarının incelenmesinde yaygın olarak kullanılmaktadır. Daha güçlü tuzaklama yapabilmek için alkali atomlarda yapılan deneylerde Magneto-Optik Tuzaklama (MOT) kullanmak çok yaygındır (Dalibard, 1986). Çünkü bu yöntemle atomların hem soğutulması hem de tuzaklanmasının etkili bir şekilde gerçekleştirilebilmektedir (Aydıner, 2005).

1.2. Alkali Atomlarla Bose-Einstein Yoğuşması

Atomik gazlardaki ilk olarak hidrojen kullanarak BEY elde edilmesi için tüm parçacık yoğunlukları denenmesine rağmen başarılı olunamadı. Bu nedenle hidrojen atomunda BEY gözlemek için lazer soğutma yöntemi kullanıldı. Ancak, hidrojen atomunun dalga boyu herhangi bir lazer kaynağı ile rezonansa getirilemiyordu. Bu nedenle çalışmalar alkali atomlara yönlendirildi. Alkali atomların enerji seviyelerinin yapısı lazere dayalı tekniklere oldukça iyi uyarlar. Çünkü optik geçişleri mevcut lazerlerle uyarılabilir ve iç enerji seviyeleri çok düşük sıcaklıklara kadar soğutmaya elverişlidir (Moerdijk, 1994).

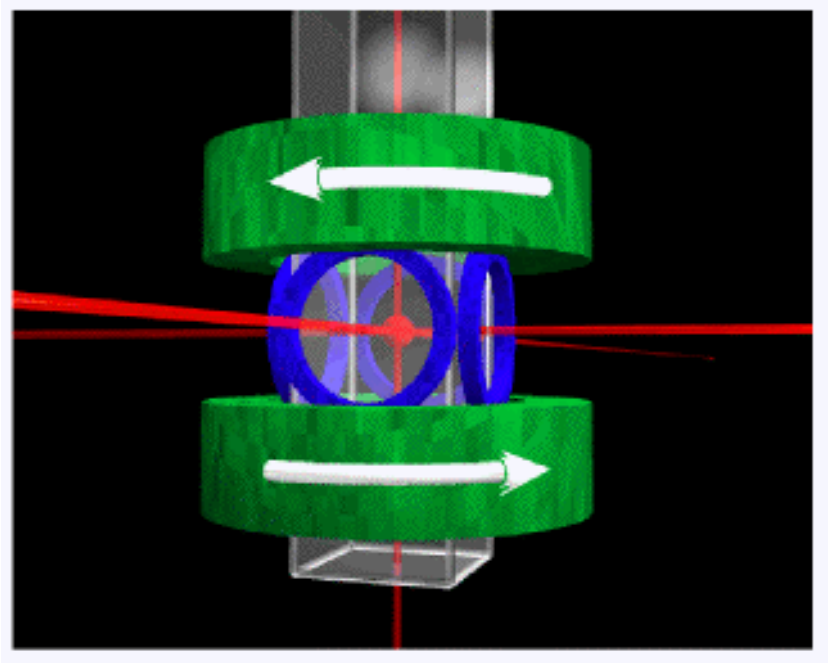
İlk başlarda Wieman'ın temel düşüncesi atomları MOT içinde lazer kullanarak soğutmaktı. Bu düşüncesini gerçekleştirmek için Cornell ile birlikte Rubidyum atomunda BEY'i gerçekleştirmeye çalıştılar. Atomları soğutma işlemi birkaç aşamada gerçekleştirildi. İlk olarak lazer ile soğutulan atomların sıcaklığını, mutlak sıfıra $100\mu K$ 'e kadar yaklaştırıldı. Lazerle soğutma yöntemi ile erişilen sıcaklık BEY olayını gözlemlemek için yeterli değildi. Çünkü tuzağın içinde merkezdeki manyetik alan sıfır oluyor ve bu durumda atomların spin doğrultularının değişmesine neden oluyordu. Manyetik tuzağın merkezinde bulunan alan ortadan kalktığında spin durumları kontrolsüz bir şekilde değişiyordu. Cornell atomların kaybını önlemek için merkezinde manyetik momenti sıfır olmayan yonca yaprağı şeklinde bir tuzak önermiştir. Böylece tuzak potansiyeli ortalama olarak dağılıyor ve parçacık kaybı gözlenmiyordu. Ayrıca manyetik tuzak parçacıkların merkezde toplanmasını sağlıyordu (Şekil 1.3). Fakat BEY'i gözleyebilmek için sıcaklığı daha da düşürmek gerekiyordu. Sistemi soğutmanın bir başka yolu da sistemdeki enerjitik atomların magnetik alandan kaynaklanan dönüşleri sırasında çarpışmalarına sebep olacağından sıcak atomların magnetik tuzağın dışına çıkmalarını, dolayısıyla soğuk atomların tuzakta kalmasını sağlar. Enerjitik parçacıkların buharlaştırma yoluyla dışarı atılması sonucunda sıcaklık, mutlak sıfıra $1\,nK$ 'e kadar yaklaştırılmış ve ^{87}Rb da BEY Wieman, Cornell ve Ketterle tarafından lazerle soğutmaya ilave olarak buharlaştırarak soğutma yönteminin sisteme eklenmesi ile deneysel olarak gözlenmiştir (Şekil 1.2).

1.3. Laboratuar Ortamında Soğutma ve Tuzaklama

Bose-Einstein yoğuşması deneylerinin yapılabilmesi çok düşük sıcaklıklara ulaşmak gerekir. Atom ve moleküller üzerinde spektroskopik gözlemler yapmak, yüksek hızla hareket ettikleri sürece, çok kesin sonuçlar vermeyecektir. Bir sistemde parçacıkların kinetik enerjilerini kaybetmesi hızlarının azalacağı anlamına gelmektedir. Bir enerji biçimi olan sıcaklık, bir parçacık sistemi için bir anlama sahiptir ve böylece bir sistemin kinetik enerjisi sıcaklığın parametrik bir ölçüsüdür. Dolayısıyla, sistemdeki parçacıkların kinetik enerjilerini azaltmak fiziksel olarak sistemin sıcaklığını düşürmeye yani soğutmaya karşılık gelir. Diğer yandan tuzaklama ise atomun tüm serbestlik dereceleri doğrultusunda hareketlerini kısıtlama olarak bilinir (Anderson vd., 1995).

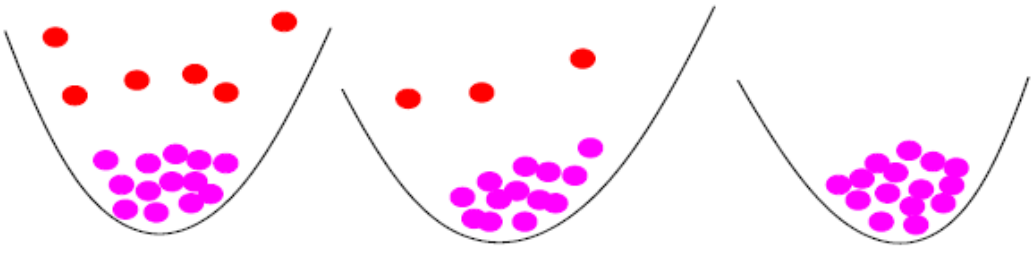
Lazer ile soğutma kavramı ilk olarak 1968 yılında Letokhov, 1970 yılında A. Ashkin tarafından öne sürüldü. Bu konuda farklı çalışmalar yürütüldüğü yıllarda ilk defa lazer ışığının serbest atomları soğutmada kullanılabileceğini gösterdiler (Hansch ve Schawlov, 1975). Lazer ile soğutmadaki amaç, foton-atom saçılmasında "Doppler etkisini" kullanarak atomların ortalama hızlarını düşürmek ve bu yolla onların sıcaklığını düşürmektir (Şekil 1.3).

Atomların yavaşlaması atomların dışardan foton soğurması ile gerçekleşir. Çünkü foton soğurma ile atomun momentumunu değiştirir. Doppler kayması olarak bilinen, atomun enerjisini azaltma yöntemi sayesinde, atom sürekli olarak hareket yönü doğrultusunda momentum soğurur. Lazer ile soğutma düzeneğinde atomlar hapsedilemez sadece ortalama hızları düşürülür. Eğer üç boyutlu bir lazer düzeneği sağlanırsa atomlar tüm serbestlik dereceleri doğrultusunda soğutulabilir (Şekil 1.3). Lazer ve uzaysal olarak değişen manyetik alanın birlikte kullanılması ile oluşturulan Manyetik Optik Tuzak (MOT), atomlar üzerine konuma bağlı bir kuvvet uygulayarak uzayın belli bir kısmında bu soğuk atom bulutunu bir arada tutabilir. Manyetik alan ile etkileşen atomlar, Zeeman yarılmasına maruz kalır. Atomlar, manyetik alanın sıfır olduğu tuzak merkezine doğru geri çağırıcı bir kuvvet algılarlar.



Şekil 1.3 Lazerler yardımıyla parçacıkların yavaşlatılması

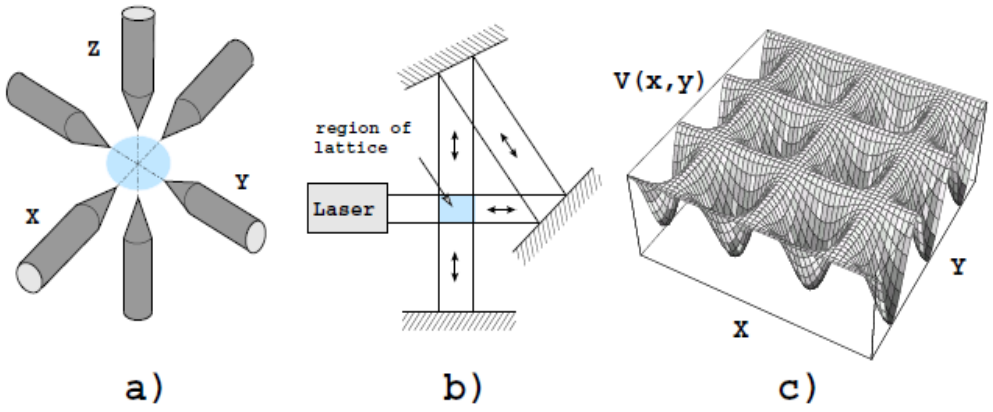
Lazerle soğutma ile ulaşılan sıcaklıklar, oldukça düşük olmasına rağmen Bose-Einstein yoğunlaşmasının gözlenmesine yeterli olmadığından BEY'i elde etmek için gereken yol geliştirilen soğutma yöntemlerinin birleştirilmesinden geçmektedir. İlk olarak lazerle soğutulan parçacıklar buharlaştırma yöntemi ile ikinci bir soğutmaya tabi tutulur. Buharlaştırarak soğutmadaki amaç, yüksek enerjili atomların tuzaktan kaçmasına izin vermektir. Böylece tuzak içerisinde düşük enerjili parçacıklar kalır (Sekil 1.4).



Şekil 1.4 Buharlaştırarak Soğutma konfigürasyonu (www.physics.lsa.umich.edu).

Manyetik optik tuzakların boyutu ve ölçüsü çok önemlidir. Bunun yanı sıra, potansiyel tuzak içindeki soğuk atomları düzgün olarak dönmelerine neden olabilmektedir (Şekil 1.5).

En iyi gözlem yapılan deneyler, düşük boyutlu yapılar ve atomlar arası kuvvetli etkileşme deneyleridir. Bu sistemler optik örgü içinde Bose-Einstein yoğuşmasının oluşmasını sağlar. Optik örgü karşılıklı olarak yerleştirilmiş birbirine dik üç boyutlu olarak yerleştirilmiş lazerden oluşan bir yapıdır. Optik tuzağın derinliği uygulanan lazer ışınının yoğunluğu ile orantılıdır. Eğer üç boyutlu olarak yerleştirilmiş lazerlerin iki tanesinin yoğunluğu diğerinden fazla ise atomlar yoğunluğun düşük olduğu doğrultuda hareket ederler. Böylece iki boyutlu bir yapı oluşturulur ve parçacıklar bir boyutta hareket ederler. Yeterince yüksek ışın yoğunluğu gönderilirse oluşturulan iki boyutlu tüp benzeri yapılar arasında geçiş imkansız hale gelir ve sistem etkin olarak bir boyutlu olur. Tüp ekseni boyundaki parçacığın hareketi 3. lazerin yoğunluğu değiştirilerek modüle edilebilir. Böyle yapılar deneysel olarak (Kinoshita vd., 2004) tarafından çalışıldı ve kuvvetli etkileşme gösteren Bose gazının özellikleri anlaşılmak için kullanıldı.



Şekil 1.5. Şekilde optik kristal örgü gösterilmiştir. a) optik kristal örgünün üç boyutta karşılıklı konmuş lazerle oluşturulması. b) deneysel olarak optik örgü oluşumu c) lazer ışınlarından oluşan kare örgü kuyunun etkin potansiyeli

Diğer bir durum ise bir boyuttaki ışın yoğunluğunun diğer iki boyuttan daha yüksek olduğu durumdur. Bu durumda atomik bulut küçük disk şeklinde küçük gruplara bölünür. Lazer ışının yoğunluğu değiştirilerek her potansiyel kuyusunda birkaç parçacık tuzaklanabilir ve diğer potansiyel tuzağından bağımsız olarak parçacıklar bulundukları potansiyel kuyusu içinde hareket ettirilebilir. Her bir potansiyel kuyusu aynı yöntem kullanılarak bağımsız olarak döndürülebilir. Bunlar binlerce parçacıktan oluşan Bose-Einstein yoğuşmasının oluşturulması için kullanılır. Parçacıklar arası etkileşme geniş bir aralığa taşınabilir ve yüksek bir hassasiyetle kontrol edilebilir. Burada parçacıklar arası etkileşmeyi değiştirmenin birkaç yolu vardır. En yaygın olanı saçılma uzunluğunun değiştirilmesidir. Bu geçişlerde dışardan uygulanan manyetik alanla sağlanabilir. Atomlarım saçılma uzunluğu manyetik alana bağlıdır.

1.4 Parçacıklar Arası Güçlü İticiliği Olan Birkaç Bozonlu Sistem

Bu kısımda, bir tuzak içinde dönen güçlü iticiliği olan bozonlar incelenecektir. Aralarında güçlü iticilik bulunan bozonların Bose-Einstein Yoğuşmasından farklı olarak yeni bir durum gösterdiği anlaşılmıştır.

Çeşitli potansiyeller kullanılarak zayıf etkileşmeli soğuk atom problemi yirmi yılı aşkın süredir araştırılmıştır. Bu çalışmada aralarında güçlü iticiliği olan birkaç bozondan oluşan bir sistemin taban durum özellikleri incelenmiştir. Çalışmalarımızı ilerletmek ve birkaç atomdan oluşan sistemin taban durum özelliklerin anlamak için Bose-Einstein yoğuşmasının tanımının düzenlenmesine ve değiştirmeye gereksinim duyulmuştur. Yoğuşmanın termodinamik tanımı açıkça az sayıdaki parçacık için kullanılamayacağını göstermektedir. Bu yüzden az sayıda parçacıktan oluşan Bose-Einstein yoğuşmasından şunu anlıyoruz ki sistemin bütün parçacıkları aynı tek parçacık kuantum seviyesinde bulunmaktadır. Bunun anlamı sistemin dalga fonksiyonunun tek parçacık dalga fonksiyonlarının çarpımı olarak karakterize edilmesidir.

1.5 Pseudo Potansiyel Yaklaşıklığı

Aralarında güçlü itici etkileşme olan bozonları tanımlamaya başlarken önce parçacıklar arası etkileşme potansiyelini belirlemeliyiz. Soğuk gazın yüksüz atomlardan oluştuğunu farz edelim. Etkileşme potansiyelinin eriminin de De Broglie dalga boyundan çok küçük olduğunu farz edelim. Bu durumda parçacıklar arası potansiyelin şekli önemli değildir, çünkü bütün parçacıklar uzaya dağılacak ve sadece diğer parçacıkların ortalama potansiyelini hissedecektir. Parçacıklar arası etkileşme sadece bir parametre ile saçılma uzunluğu *a* ile karakterize edilebilir ki, bu da potansiyelin etkin çapıdır. Bu limitte kısa erimli potansiyelden saçılma, çapı *a* olan bir katı küreden saçılma olarak görülebilir. Merkez koordinatlarda katı kürenin Schrödinger denklemi

$$\begin{cases} \left(\nabla^2 + k^2\right)\psi(r) = 0 & (r > a) \\ \psi(r) = 0 & (r \le a) \end{cases} \tag{1.17}$$

olarak tanımlanır. Sınır koşullarından etkileşme potansiyelini tanımlamak çok zordur. Problemi kolaylaştırmak için katı küre potansiyeli yerine bir pseudo potansiyel tanımlanır. Ancak bu potansiyel hiçbir sınır koşulu gerektirmeden doğru genlik ve küre dışında doğru faz değişimi vermelidir. Üç boyutta, pseudo potansiyel

$$U_{3B}^{(2)}(r) = W_{3B}\delta(\vec{r})\frac{\partial}{\partial r}(\vec{r}) \tag{1.18}$$

yaklaşımıyla tanımlanır. Burada W_{3B} çiftlenme sabitidir. Eğer çiftlenme parametresi pozitif ise bu bozonlar arası itici etkileşme, negatif ise çekici etkileşme vardır. Üç boyutlu sistemin çiftlenme parametresi saçılma uzaklığına bağlı olarak,

$$W_{3B} = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \tag{1.19}$$

ile tanımlanır. Burada $a = a_{3B}$ atomik saçılma uzunluğu, m ise indirgenmiş kütledir. Üç boyutlu çiftlenme parametresi atomun parametrelerine bağlıdır ve tuzaklama potansiyelinin parametrelerinden bağımsızdır. Bir boyutta ve iki boyutta sistemin pseudo potansiyel tanımı üç boyuta göre daha kolaydır. Kısa erimli etkileşmeler Dirac delta fonksiyonu ile şöyle tanımlanır.

$$U^{(2)}(r) = W\delta(r) \tag{1.20}$$

Tuzaklama potansiyelini hesaba katarak saçılma genliği hesaplandıktan sonra iki boyutlu çiftlenim sabiti

$$W_{2B} = \frac{2\sqrt{\pi}\hbar^2}{m} \frac{1}{l/a + \left(1/\sqrt{2\pi}\right)\ln\left(1/\pi q^2 l^2\right)} \tag{1.21}$$

dir. Burada $l = \sqrt{\hbar/mw}$ tuzaklama potansiyelinin disk düzlemine dik uzunluğu karakterize eder, q ise çarpışan parçacıkların momentumunu göstermektedir. $l>>a$ limitinde logaritmik terim önemsiz olur ve W enerjiden bağımsız hale gelir. Diğer yandan, eğer l yaklaşık a ise, logaritmik terim baskın hale gelir. Bu durumda çiftlenme parametresi yaklaşık

$$W \approx -\frac{2\sqrt{\pi}\hbar^2}{m} \frac{1}{\ln(a/l)} \tag{1.22}$$

olarak tanımlanır. Tuzaklama potansiyeli deforme edilerek çekici atomlar için, önce atomların birbirini ittiği bölgeye ulaşılabilir. Bir boyutta çiftlenme sabiti $a_{1B} = -\frac{l^2}{2a}\left(1 - C\frac{a}{l}\right)$ ve $C = 1.0326$ olmak üzere

$$W_{1B} = -\frac{\hbar^2}{ma_{1B}} \tag{1.23}$$

ile ifade edilir.

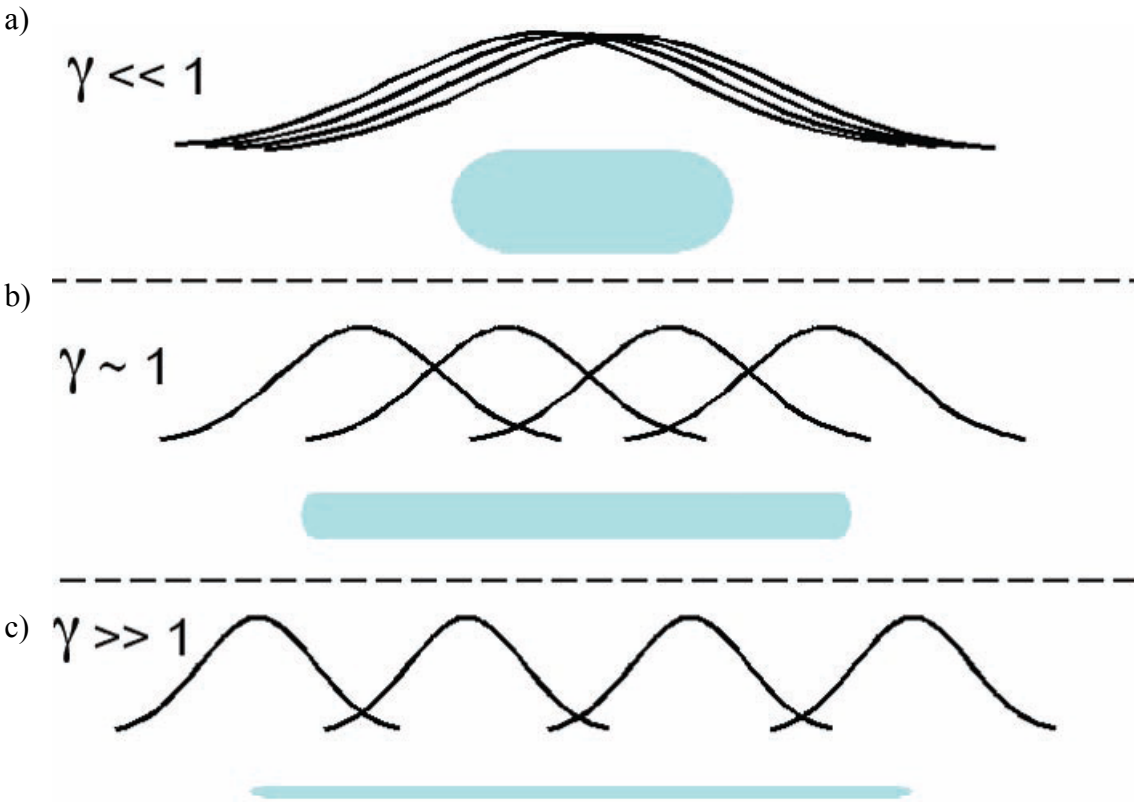
…	**1D**	**2D**	**3D**
K ≈	$\hbar^2 n^2/m$	$\hbar^2 n/m$	$\hbar^2 n^{2/3}/m$
I ≈	nW	nW	nW
W	$\frac{2\hbar^2 a}{ml}$	$\frac{2\hbar^2 \pi}{m\ln(1/ka)}$	$\frac{4\pi\hbar^2 a}{m}$

Tablo 1.1 Kinetik ve Etkileşme enerjilerin ve çiftlenme sabitinin (W) farklı boyutlarda yaklaşık ifadelerinin gösterilmesi

1.6 İtici Potansiyel Şiddeti ve Bozon Molekülünün Oluşumu (Tonks Bölgesi)

Atomlar arası iticiliği karakterize etmek için boyutsuz bir terim olan etkileşme enerjisi ile kinetik enerji arasındaki oranı veren $\gamma = \frac{I}{K}$ parametresi ile başlayabiliriz. γ gösteriyor ki etkileşme şiddeti sadece *W* ya bağlı değil aynı zamanda atom gazının yoğunluğuna da bağlıdır. Tablo 1.1 den de görüldüğü gibi kuvvetli etkileşme ($\gamma >> 1$) her bir durum için farklıdır.

Şekil 1.6 da görüldüğü gibi, sıfır sıcaklıkta ve $\gamma = 0$ durumunda bütün parçacıklar en düşük enerjileri ile aynı kuantum seviyesine düşerler. Böylece Bose-Einstein yoğuşması oluşur. Zayıf iticilik olduğu durumda ($\gamma \sim 1$)etkileşmeden dolayı her ne kadar yörüngeler bozulsa da bozonlar hala kendi yörüngelerinde bulunurlar. Yüksek iticilik şiddetinde ($\gamma > 1$) bozonlar ortak yörüngelerini bozarak itici enerjilerini minimize ederler. Bu durumda Bose-Einstein yoğuşması bozulur ve bozonlar içine girilmez küreler gibi davranırlar. Başka bir deyişle, uzayda aynı noktada bulunmayı engellerler. Bu davranış fermiyonların Pauli dışlama ilkesinden kaynaklanan davranışlarına benzediğinden fermiyonik özellikler göstermesine neden olur. Tuzaklanmış aşırı soğuk atomların deneysel olarak gözlenmesinden çok önce bu davranış teorik olarak gösterilmiştir (Girardeau, 1960). Daha sonra aynı sistemi ele alarak, bozonlar arası etkileşme potansiyeli $U_0\delta(x-x')$ olarak tespit edilmiştir (Lieb ve Liniger, 1963). Bu sonuca taban durum ve uyarılmış durumlar incelenerek ulaşılmıştır. Ayrıca bir boyutta kuvvetli etkileşme limitinde $U_0 \to \infty$ bozonların gerçekten fermiyonlar gibi davrandığını ispatlandı. Klasik olarak katı küre parçacıklarından oluşan bir gaz problemi Tonks tarafından çözüldü. Bozonlar arasında şiddetli iticiliğin olduğu bölgede bozonlar fermiyon gibi davranırlar, bu durum genelde Tonks-Girardeau bölgesi olarak tanımlanmaktadır. Son zamanlarda yapılan deneyler (Kinoshita vd., 2004 ve Paredes vd., 2004) Girardeau'nun yapmış olduğu öngörüyü doğrulamaktadır.



Şekil 1.6. Bozon gazının farklı etkileşme şiddetleri için davranışının gösterilmesi. Şekil a ve b de ise zayıf etkileşme olduğunda Bose-Einstein Yoğuşması gözlenmekte, c) Şiddetli itmenin olduğu limitte parçacıklar farklı orbitallere lokalizasyonunun incelenmesi

BÖLÜM 2: ETKİLEŞEN SİSTEMLERDE ÇÖZÜM YÖNTEMLERİ

Bu bölümde, BEY ve kristal faza geçişi inceleyen yöntemler özetlenecektir. İlk önceleri sıfır sıcaklıkta parçacıklar arasında zayıf etkileşmeleri tanımlamak için Bogoliubov yaklaşımı kullanılmıştır. Yoğuşma durumunda kullanılan dalga fonksiyonu Gross-Pitaevskii denklemleri ile verilir. Yoğuşmayan parçacıkların etkisi ise Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) denklemleri kullanılarak incelenir. Çok parçacıklı sistemlerin incelenmesinde benimsenen diğer bir çözüm yolu ise Kuantum Monte Carlo simulasyon yöntemidir. Yöntem enerji, yoğunluk dağılımı gibi birçok fiziksel özelliklerin hesaplanmasında kullanılmış ve deneylerle uyumlu sonuçlar vermiştir (Ceperley, 1995 ve Giorgini vd., 1999). Ancak anizotropik tuzak için aynı şeyler söylenemez. Bölüm 5 de, Monte Carlo yöntemi ile elde edilmiş sonuçlarla Varyasyon yöntemi ile elde ettiğimiz sonuçlar karşılaştırılacaktır. Bose Einstein yoğuşmasının incelenmesinde kullanılan bir diğer yöntem de Yoğunluk Fonksiyoneli Teoremi (YFT) dir. Yoğunluk Fonksiyoneli Teoremi parçacıklar arasındaki etkileşme ve korelasyon etkilerini de içerdiğinden metaller, yarıiletkenler ve yalıtkanların temel durum özelliklerini belirlemek için oldukça başarılı bir yaklaşımdır. Bu özellikleri nedeniyle YFT fikri etkileşen bir elektronlar sistemini çok-cisim dalga fonksiyonları yoluyla değil elektron yoğunluğu ile tanımlayan bir teori olmasına rağmen son zamanlarda bozon sistemlerinde kullanılmaya başlanmıştır (Kim ve Zubarev, 2003). Yukarıda belirtilen çözüm yöntemlerine benzer sistemin dalga fonksiyonun belirlenmesine dayanan ve literatürde kullanımı daha fazla tercih edilen yöntem ise varyasyon yaklaşımıdır. Aşağıda bu yöntemler özetlenecektir.

2.1 Çok Parçacık Problemi

Elektronların ve çekirdeğin oluşturduğu bir sistem için Schrödinger denklemi,

$$\hat{H}\psi = E\psi \tag{2.1}$$

formunda verilir. Hamilton operatörü atomik birim sisteminde,

$$\hat{H} = -\sum_{i=1}^{N_e}\frac{1}{2}\nabla_i^2 - \sum_{I=1}^{N_i}\frac{1}{2M_I}\nabla_I^2 - \sum_{i=1}^{N_e}\sum_{I=1}^{N_I}\frac{Z_I}{\left|\vec{r}_i - \vec{R}_I\right|} + \sum_{i=1}^{N_e}\sum_{j>i}^{N_i}\frac{1}{\left|\vec{r}_i - \vec{r}_j\right|} + \sum_{I=1}^{N_e}\sum_{j>I}^{N_i}\frac{Z_I Z_j}{\left|\vec{R}_I - \vec{R}_j\right|} \tag{2.2}$$

gibi ifade edilir. Burada M_I çekirdek kütlesi, Z_I atom sayısı, $\vec{r}_i$ ve $\vec{R}_I$ ise sırasıyla elektron ve çekirdeğin koordinatlarıdır. Denklem (2.2)' de ilk terim elektronun ikinci terim ise çekirdeğin kinetik enerjisini, üçüncü terim çekirdek ve elektronlar arasındaki coulomb çekim alanı terimini, dördüncü terim elektronlar arasındaki coulomb itme potansiyelini ve beşinci terim ise çekirdekler arasında meydana gelen coulomb itme potansiyelini ifade etmektedir. Böyle bir sistemin taban durumu özellikleri zamandan bağımsız,

$$\hat{H}\psi\left(\vec{r}_i, \vec{R}_I\right) = E\psi\left(\vec{r}_i, \vec{R}_I\right) \tag{2.3}$$

Schrödinger denkleminin çözümlerinden elde edilir. Burada $\psi\left(\vec{r}_i, \vec{R}_I\right)$ çok parçacık dalga fonksiyonu ve E sistemin toplam enerjisidir. Denklem (2.2) de tanımlanan sistemin hamilton ifadesinin çözümünü kolaylaştırmak için bazı yaklaşımlar yapılmaktadır. Bu yaklaşımlardan en önemlisi Born-Oppenheimer yaklaşımıdır.

2.2 Born-Oppenheimer Yaklaşımı

Çok elektronlu sistemlerin elektronik yapısını anlamada temel öneme sahip Born-Oppenheimer yaklaşımında elektron ve çekirdeklerin hareketleri ayrı ayrı incelenir (Born, 1927). Elektron ve çekirdeğin kütlelerini karşılaştırıldığında elektronun kütlesi çekirdeğin kütlesine göre çok daha hafiftir $\left(\frac{M}{m}=1836{,}1\right)$. Bu nedenle çekirdeğin sabit olduğu ve sadece elektronların hareket halinde olduğu düşünülebilir. Dolayısıyla da çeirdeğin kinetik enerjisi, elektronlarınkine göre ihmal edilebilir derecede küçüktür. Aynı zamanda çekirdek-çekirdek etkileşmesine de bir sabit gibi bakılabilir. Bu durumda (Denklem 2.2' deki ikinci terim) verilen çekirdeğin kinetik enerji terimi ihmal edilebilir. Bu durumda hamiltonyen,

$$\hat{H} = -\sum_{i=1}^{N_e}\frac{1}{2}\nabla_i^2 - \sum_{i=1}^{N_e}\sum_{I=1}^{N_i}\frac{Z_I}{\vec{r}_i - \vec{R}_I} + \sum_{i=1}^{N_e}\sum_{j>i}^{N_i}\frac{1}{\vec{r}_i - \vec{r}_j} \tag{2.4}$$

biçiminde elde edilir. Denklem 2.4, N_e tane elektronun N_i tane çekirdeğin alanında hareketini tanımlayan hamiltonyen ifadesidir. Çekirdeklerin kütleleri elektronlara göre oldukça ağır olduğu için, elektronların koordinatlarını çekirdeğin koordinatları belirler. Yani dalga fonksiyonu, elektronların koordinatlarına bağlıyken, çekirdeğin koordinatlarına parametrik olarak bağlıdır. Elektronların hareketini tanımlayan dalga fonksiyonu,

$$\psi_e = \psi_e(r, R) \tag{2.5}$$

ve, enerjisi ise ,

$$\varepsilon_e = \varepsilon_e(R) \tag{2.6}$$

şeklinde verilir. Çekirdekler arası etkileşme ile birlikte toplam enerji,

$$\varepsilon_{tot}(R) = \varepsilon_e(R) + \sum_{\alpha=1}^{N_i} \sum_{\beta>\alpha}^{N_i} \frac{Z_\alpha Z_\beta}{\left|R_\alpha - R_\beta\right|} \tag{2.7}$$

formunda ifade edilir. Çekirdek, Born-Oppenheimer yaklaşımında bir potansiyel enerji yüzeyinde hareket eder. Bu potansiyel ise elektronik problemin çözülmesi ile bulunur.

Born-Oppenheimer yaklaşımı yaygın bir şekilde kullanılmasına rağmen, elektron ile çekirdeğin hareketi birbirinden ayrılmadığı durumlarda geçersizdir.

2.3 Dalga Fonksiyonu Yaklaşıklıkları

2.3.1 Bogoliubov Yaklaşımı

Bogoliubov 1947 yılında, sıfır sıcaklıkta aralarında zayıf etkileşme olan çok parçacıklı Bose gazları için bir yaklaşım tanımlamıştır. Taban durumdaki parçacıkların düzenli olduğunu varsayımı onun en önemli sonucudur. Bogoliubov, seyreltik bir bozon gazında için parçacıklar arasında itici etkileşme olduğunu ve periyodik sınır koşulları ile çözüm yapılabileceğini varsaymıştır. Bu varsayım çok parçacık problemini kolaylaştırmış ve bildiğimiz yollarla etkileşmeleri hesaba katmamıza yardımcı olmuştur. Bose-Einstein yoğuşmasının özelliklerinin incelenmesinde halen kullanılmaktadır ve üst seviyelerdeki parçacıkların (N_{ex}) ihmal edildiği durumda iyi sonuçlar vermektedir (DuBois vd., 2003).

Etkileşen bozon gazının standart hamiltonyeni ,

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\int d\vec{r}\,\hat{\psi}^{+}(\vec{r})\hat{H}_0\hat{\psi}(\vec{r}) + \frac{1}{2}\int d\vec{r}d\vec{r}'\hat{\psi}^{+}(\vec{r})\hat{\psi}^{+}(\vec{r}')U(\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|)\hat{\psi}(\vec{r})\hat{\psi}(\vec{r}') \qquad (2.8)$$

ile verilir. Burada $\hat{H}_0$ tek parçacık hamiltonyeni,

$$\hat{H}_0 = \frac{p^2}{2m} + V_{ext}(\vec{r}) \qquad (2.9)$$

olarak tanımlanır. Denklem (2.8) de, $\hat{\psi}(r)$ *ve* $\hat{\psi}^{+}(r)$, sırasıyla bir bozon yok edilmesine ve yaratılmasına karşılık gelen alan operatörleri ve $U(\vec{r}-\vec{r}')$ parçacıklar arası etkileşme potansiyelidir. Eğer parçacıklar arası etkileşme yok ise N_0 parçacığın hepsi enerjisi ve momentumu sıfır olan taban durumunda bulunur. Böylece yoğuşan parçacık sayısı toplam parçacık sayısına eşit olur. Eğer parçacıklar arası etkileşme göz önüne alınırsa parçacıklar birbirinden uzaklaşmaya ve farklı konumlarda lokalize olmaya başlayacaklardır.

2.3.2 Gross-Pitaevskii Denklemi

Kritik sıcaklık değerinin altında bütün bozonlar en düşük enerji seviyesinde yani taban durumda bulunma eğilimi göstermektedirler. Sıcaklık azaltılmaya devam edilirse belirli bir değerde tüm parçacıklar aynı enerji durumuna geçecek ve sistem tek bir dalga fonksiyonu ile tanımlanabilecektir. Bununla birlikte problemin çok parçacık problemi olduğu ve parçacıklar arası etkileşmelerin hesaba katılması halen gereklidir.

Gross-Pitaevskii denklemi, seyreltik atomik gazlarda görülen Bose-Einstein yoğuşması olayını açıklamakta başarılıdır. Çünkü sistem tek bir dalga fonksiyonu ile temsil edilmekte ve parçacıklar arası etkileşme s-dalga saçılması ile tanımlanabilmektedir. BEY olayının gözlemlendiği durum iki koşula bağlıdır. Bunların ilki T_c kritik sıcaklık olmak üzere $T << T_k$, ikincisi ise *n* yoğuşma yoğunluğu, *a* s-dalga boyu olmak üzere $n^{1/3}a << 1$ koşullarıdır Böylelikle BEY olayı tek bir denklemle tanımlanabilmektedir.

Tuzak potansiyeli içindeki yoğuşmayı veren enerji fonksiyonu,

$$E(\psi(r)) = \int d\vec{r}\left(\frac{\hbar^2}{2m}|\nabla\psi(r)|^2 + V(r)|\psi(r)|^2 + \frac{g}{2}|\psi(r)|^4\right) \tag{2.10}$$

ile tanımlanır. İntegral içerisindeki terimler sırasıyla kinetik, tuzaklama ve etkileşme potansiyel enerjilerini göstermektedir. Burada $g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}$ ve *m* tuzaklanmış bozonların atomik kütlesidir. Burada temas potansiyeli $V(|\vec{r} - \vec{r}'|)$,

$$V(|\vec{r} - \vec{r}'|) = U_0\delta(\vec{r} - \vec{r}') \tag{2.11}$$

olarak verilir (Romanovsky, 2004).Bu denklem tüm atomların taban durumda bulunduğu kabul edilerek yazılmıştır. Gerçekte ise yoğuşmaya katılmayan atomların bulunması veya taban durumda bulunan atomlar arasındaki atomik etkileşim nedeniyle tüm atomlar taban durumda bulunmayabilir.

Bose-Enstein yoğuşması durumunda, bütün bozonlar aynı kuantum durumunda bulunduklarına göre N_0 parçacıklı bir sistemin dalga fonksiyonu tek parçacık dalga fonksiyonlarının çarpımı olarak,

$$\psi\left(\vec{r}_1,\vec{r}_2,...,\vec{r}_{N_0}\right)=\prod_{i=1}^{N_0}\psi_i(r_i) \tag{2.12}$$

yazılabilir.

Bütün atomların taban durumda bulunduğu veya uyarılmış atomlarla taban durumdaki yoğuşan atomların hiç etkileşmediği varsayıldığında Gross-Pitaevskii denklemleri geçerlidir. Gross-Pitaevskii denklemi yukarıda tanımlanan enerji denkleminin dalga fonksiyonu ile minimize edilerek enerjiyi elde eder. Zamandan bağımsız Gross-Pitaevski denklemi,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r)+V(r)\psi(r)+g\left|\psi(r)\right|^2\psi(r)=\mu\psi(r) \tag{2.13}$$

şeklinde tanımlanır.

Zamana bağlı Gross-Pitaevskii Denklemi ise normalize edilmiş dalga fonksiyonu kullanılarak,

$$i\hbar\frac{\partial\phi(r,t)}{\partial t}=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(r,t)+NU_0\left|\phi(r,t)\right|^2\right]\phi(r,t) \tag{2.14}$$

ile verilir. Zamana bağlı dalga fonksiyonu,

$$\phi(r,t)=e^{-i\mu t}\phi(r) \tag{2.15}$$

ile tanımlanır. İndirgenmiş koordinatlarda zamana bağlı GP denklemi,

$$i\frac{\partial\phi(r,t)}{\partial t}=\left[-\nabla^2+V(r,t)+g\left|\phi(r,t)\right|^2\right]\phi(r,t) \tag{2.16}$$

şekline dönüşür. Burada g boyutsuz sabiti, üç boyutlu sistemler için,

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 m}{a} \tag{2.17}$$

dir. Denklem (2.14)'ün uygulanabilmesi için toplam atom sayısının yeteri kadar fazla olması; seyreltik olma koşulunun sağlanabilmesi için de sıcaklığın yeteri kadar düşük olması gerekmektedir. Ancak bu şekilde yoğuşmanın hem kuantumsal hem de termal olarak bozunmasının ihmal edilmesine olanak sağlanır. Parçacık başına düşen enerjinin beklenen değeri

$$E = \int \left[-\phi^*(r,t)\nabla^2\phi(r,t) + V|\phi(r,t)|^2 + \frac{1}{2}g|\phi(r,t)|^4 \right] dr \tag{2.18}$$

ile tanımlanır.

Küresel bir tuzaklayıcı potansiyel kullanıldığında kimyasal potansiyel için zamandan bağımsız Gross-Pitaevskii denklemi

$$\mu\phi(r) = \left[-\nabla^2 + V(r) + g|\phi(r)|^2 \right]\phi(r) \tag{2.19}$$

ifadesi ile gösterilir. Denklem(2.19), birbirlerinden bağımsız bir şekilde Gross ve Pitaevski tarafından 1961 yılında türetilmiştir ve düşük sıcaklıklardaki uniform olmayan seyreltik Bose gazlarının araştırılmasında temel araçtır. Bu denklem, parçacıklar üzerine etkiyen potansiyelin, V dış potansiyellerinin toplamı ve $g|\phi(r)|^2$ diğer bozonlar tarafından oluşturulan ortalama alan olmak üzere, lineer olmayan Schrödinger denklemi formundadır. Burada öz değerin, lineer Schrödinger denkleminde olduğu gibi parçacık başına düşen enerji olmayıp, kimyasal potansiyeldir. Aynı seviyede bulunan tüm parçacıklar için kimyasal potansiyel, parçacık başına düşen enerjidir; ancak etkileşen parçacıklar için bu durum söz konusu değildir.

Zamana bağlı ve zamandan bağımsız Gross Pitaevskii (GP) denklemleri oldukça düşük sıcaklıklarda etkileşimin zayıf olduğu sistemlerde ve uyarılmış atomların ihmal edildiği durumlar için iyi bir yaklaşımdır (Blakie, 2004).

2.3.3 Hartree Yaklaşımı

Hartree yaklaşımında çok elektronlu sistemin dalga fonksiyonunu tek elektron dalga fonksiyonlarının çarpımı olarak yazma ilkesine dayanır (Hartree, 1928). Hartree yaklaşımında sistemin dalga fonksiyonu,

$$\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,...,\vec{r}_N)=\prod_{i=1}^{N_0}\psi_i(r_i) \tag{2.20}$$

ile ifade edilir. Denklemde i. elektrona etki eden potansiyel $V_i(\vec{r})$, iyon ve Hartree potansiyelinin toplamı olarak,

$$V_i(\vec{r})=V_{iyon}(\vec{r})+V_H(\vec{r}) \tag{2.21}$$

ile tanımlanır. V_{iyon} ve $V_{Hartree}$ potansiyelleri sırasıyla,

$$V_{iyon}(\vec{r})=-\sum_{\alpha}\frac{Z_\alpha}{|\vec{r}-\vec{r}_\alpha|} \quad , \qquad V_H(\vec{r})=-\int d\vec{r}\,\frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \tag{2.22}$$

denklemleri ile verilir. Hartree potansiyelindeki yoğunluk terimi,

$$\rho(\vec{r}')=\sum_{i\neq j}\left|\psi_j(\vec{r}')^2\right| \tag{2.23}$$

şeklindedir. Bu durumda hamiltonyen,

$$\hat{H}=-\sum_{i=1}^{N_0}\frac{1}{2}\nabla_i^2+V_i(\vec{r}) \tag{2.24}$$

formunda olup, Denklem (2.20) ile birlikte alınarak toplam enerjiyi minimum yapan tek elektron dalga fonksiyonları, Hartree denklemi ile verilir. Toplam enerjiyi en küçük yapan tek elektron dalga fonksiyonları Hartree denklemleri ile verilir. Bu denklem,

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla_i^2 + V_{iyon}(\vec{r})\right]\psi_i(\vec{r}) + \sum_{j\neq i}\int \vec{dr}' \frac{\left|\psi_i(\vec{r}')\right|^2}{\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|}\psi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i\psi_i(\vec{r}) \qquad (2.25)$$

ile gösterilmektedir. Denklem (2.25), yörüngeler için öz uyumlu çözüldüğünde denklem (2.20) ile sistemin dalga fonksiyonu elde edilmiş olunur. Hartree yaklaşımı atomlar için güzel sonuçlar verir. Tek elektron fonksiyonlarında oldukça iyidir. Fakat parçacık indislerinin değiş tokuşu olduğunda tam bir simetriye sahip değildir. Halbuki çok elektron dalga fonksiyonu komşu indislerin değiş tokuşuna göre antisimetrik olmalıdır. Bu yüzden, Hartree yaklaşımı yerine Hartree-Fock yaklaşımı daha yaygın kullanılır.

2.3.4 Hartree-Fock Yaklaşımı

Genel olarak çok parçacık problemi tam olarak çözülemediğinden tek yol yaklaşık çözüm yapmaktır. En iyi yaklaşımlardan birisi uygun dalga fonksiyonu seçimi ile çözümleri basitleştirmektir. Parçacıklar arası etkileşme kuvvetli ise ve bu etkileşmelerden dolayı parçacıklar yoğuşma durumundan başka bir faza geçiş yapmaya eğilimli ise Bogoliubov yaklaşımının kullanılması uygun olmaz. Bu değişimi açıklayacak yöntemlerden en sık kullanılanı ortalama alan teoremlerinden birisi olan Hartree-Fock yaklaşıklığıdır. Parçacıklar birbirinden ayırt edilemeyen bozonlar olduğu için sistemi tanımlayan dalga fonksiyonu iki parçacığın konumları değiştiğinde simetrik kalmalıdır. Hartree-Fock yaklaşımında dalga fonksiyonu bu simetri özelliğini sağlayacak şekilde seçilir. Dalga fonksiyonu ,

$$\psi\left(...\vec{r}_i,...\vec{r}_j,...\right)=\psi\left(...\vec{r}_j,....\vec{r}_i,...\right) \tag{2.26}$$

formuna sahiptir. Taban durum enerjisinin beklenen değeri,

$$E=\left\langle TD\middle|H\middle|TD\right\rangle=\sum_i n_i H_0^{ii}+\frac{1}{2}\sum_{ij} n_i n_j (V_{ijij}+V_{ijji})-\frac{1}{2}\sum_i n_i (n_i+1)V_{iiii} \tag{2.27}$$

olarak yazılır (Christopher, 2004). Burada $n_i=\left\langle d_i^+ d_i\right\rangle$ i.orbital de bulunma olasılığını ifade eder. Bu yaklaşımın ayrıntıları bir sonraki bölümde tartışılacaktır. Hartree-Fock yaklaşımı kullanılarak harmonik bir tuzakta tuzaklanmış T>0 sıcaklığındaki ^{7}Li atomlarının özellikleri (Bergaman, 1997) ve iki farklı spin yönelimine sahip bir sistemin özellikleri hesaplanmışlardır (Esry vd., 1997). ^{87}Rb için ise yoğuşmanın yerçekiminden ve atomlar arasındaki etkileşmelerden etkilendiğini gösterilmiştir (Rieger vd., 2007).

Bu yaklaşımın avantajlı yönü tek parçacık dalga fonksiyonunu içeren bir Slater determinantı kullanılması, varyasyonel olması ve toplam enerjiyi minimize eden bir deneme dalga fonksiyonunu kullanmasıdır. Ancak Hartree-Fock metodu parçacıklar arasındaki korelasyonu göz önüne almaz. Ayrıca değiş-tokuş terimi yerel olmadığından Hartree Fock denkleminin çözümü oldukça zordur ve hesaplanması da yoğunluk fonksiyonel teorisine göre oldukça uzundur.

2.3.5. Varyasyon Yöntemi

Varyasyon yönteminde, sistemin gerçek minimum enerji değerini bulmak için bir deneme dalga fonksiyonu tanımlanır. Bu fonksiyon, a_i *ve* λ gibi bazı değişim

parametreleri içeren bir deneme dalga fonksiyonudur. Bu deneme dalga fonksiyonu ile sistemin zamandan bağımsız Hamilton operatörünün ortalama değeri,

$$E(\psi) = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \tag{2.28}$$

gibi tanımlanır. Bu ortalama değeri minimum yapacak parametre değerleri hesaplanır. Taban durum enerjisini bulmak için bu a_i değerlerini

$$\frac{\partial}{\partial a_i} E\ (a_1, a_2, ...a_n) = 0 \tag{2.29}$$

koşulundan belirlemek gerekir. Böylece, belirlenen bu a_i *ve* λ varyasyon parametreleri deneme dalga fonksiyonunda yerine konularak, bulunan taban durum enerjisine karşılık gelen özfonksiyonlar da bulunmuş olur (Levine, 2000).

Birçok durumda, deneme dalga fonksiyonu belirlemek ayrı bir problem oluşturmaktadır. Çünkü seçilen deneme dalga fonksiyonu, varyasyon parametresine bağlı olarak belirli bir analitik formla sınırlı kalsada varyasyon parametreleri ölçüsünde değişiklikler olabilir. (Safak vd., 2003). Sistemi daha iyi tanımlayabilmek için birçok varyasyon parametresi içeren deneme dalga fonksiyonları kullanıldığında işlem zamanı çok uzayabilmekte ancak genellikle çok iyi sonuç vermektedir. Bir sonraki bölümde bu yöntemle çok sayıda varyasyon parametresi kullanılarak sistemi nasıl daha iyi modellenebileceği gösterilecektir.

2.3.6 Monte Carlo Yöntemi

N_0 cisim probleminin analitik çözümünün olmayışı Moleküler Dinamik adlı sayısal çözümleme yönteminin ortaya çıkmasına neden olmuştur (Rapaport, 1995). Ancak, Moleküler Dinamik yüksek sayıda matematiksel hesaplama içeren bir yöntem olduğundan bazı problemlerin çözümü mümkün olsa bile sonuç almak çok uzun bilgisayar zamanı gerektirebilir.

Rastgele sayılar üzerine kurulmuş çok cisim sistemlerini simüle etmek için kullanılan metotlardan birisi de Monte Carlo yöntemidir. Faz uzayında sadece konum bilinmekte fakat momentum hakkında bir bilgi bulunmamaktadır. Hareketin yönü rastgele sayılar sayesinde belirlenir. Bu yönteme göre belirlenen kurallar çerçevesinde bu sayılar kabul veya reddedilir. Moleküler olayların açıklanmasında Moleküler Monte Carlo olarak adlandırılan yöntem kullanılır. Bu yöntem, taban durum enerjilerinin hesaplanmasında Boltzman Dağılımının kullanıldığı Klasik Monte Carlo ve dalga fonksiyonların ve enerji düzeylerinin hesaplanmasında kullanılan Kuantum Monte Carlo yöntemleri olarak ikiye ayrılır.

McMillan 1964 ve Kalos 1974, Varyasyonel Monte Carlo yöntemi ve Green fonksiyonu Monte Carlo yöntemini ilk olarak basit bozon sistemlerine uygulanmıştır. Buradaki sistemde, etkileşim potansiyelinin sadece parçacıklar arasındaki mesafeye bağlı olduğu düşünülmüştür.

2.4 Yoğunluk Fonksiyoneli Yaklaşımları

Yoğunluk fonksiyoneli Teorisi(YFT); temelde kuantum mekanik yasalarından sistemin özelliklerini anlamaya amaçlayan atom, molekül ve katıların elektronik yapılarını hesaplayabilen başarılı bir teoridir. Bu teorinin kapsamı çok geniş olmakla birlikte, temelini çok parçacık sisteminin temel durum özelliklerini tahmin edebilme düşüncesi oluşturmaktadır. YFT'nin kullandığı yaklaşımda temel değişken olarak, çok-cisim dalga fonksiyonu yerine, parçacık yoğunluğu kullanılır.

N_0 parçacıklı sistem için Schrödinger denklemi,

$$\left(\sum_{i}^{N_0}\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla_i^2 + V(r)\right) + \frac{1}{2}\sum_{i<j}^{N_0} U(r_i, r_j)\right)\psi(r_i) = E\psi(r_i) \tag{2.30}$$

şeklindedir. Burada $U(r_i, r_j)$, parçacıklar arası etkileşmeyi tanımlamaktadır. $n(\vec{r})$ yoğunluğu sadece üç tane uzaysal koordinatın (dalga fonksiyonunun ya da N_0 tane koordinatının değil) fonksiyonu olduğundan, bu teorem çok büyük sistemleri bile hesaplama kolaylığı getirir. Yoğunluk fonksiyoneli teorisi, sistemdeki tüm diğer parçacıklarla etkileşim halinde olan bireysel parçacıkların etkileşmelerini ele alarak başlayan Hartree-Fock teorinin tersine bütün parçacıklı sistemi göz önüne alınarak başlanır (Capelle, 2003). Hohenberg ve Kohn homojen olmayan elektron gazının taban durumunu bulmak için YFT'yi geliştirmişlerdir (Hohenberg P. and Kohn W 1964). Böyle bir sistem için, bulunan dalga fonksiyonu kullanılarak sistemdeki parçacık yoğunluğu $n(\vec{r})$ şöyle hesaplanır.

$$n(\vec{r}) = N_0 \int \left|\Psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_{N_0})\right|^2 d\,\vec{r}_2 \ldots \vec{r}_{N_0} \tag{2.31}$$

Burada $\psi(r)$ sistemin taban durumu dalga fonksiyonudur. Hohenberg ve Kohn sistemin taban durum enerjisinin yoğunluğun fonksiyoneli olarak verilebileceği göstermişlerdir.

Bu çözüm yönteminin bozonlardan oluşan bir sisteme uygulaması ayrıntılı olarak gösterilmiştir (Akbaş,2007). Yoğunluk fonksiyonelleri teorisine dayanan Thomas-Fermi teorisi hala günümüzdeki çalışmalarda çözüm yöntemi olarak kullanılmaktadır.

ğunluk fonksiyonelleri teorisinin ilk formu olan Thomas-Fermi yaklaşımı günümüzde bir çok çalışmada çözüm yöntemi olarak kullanılmaktadır.

2.4.1 Thomas-Fermi Yaklaşımı

Thomas ve Fermi teoreminde, atomun kinetik enerjisini elektron yoğunluğunun fonksiyoneli olarak temsil edilip bir atomun enerjisi hesaplanmıştır. Bu ifadeyi parçacık-çekirdek ve parçacıklar arası etkileşmeleri temsil eden klasik ifadelerle birleştirmişlerdir. Bu iki etkileşme de elektron yoğunluğu cinsinden ifade edilirse sistemin enerjisi,

$$E[n(r)] = A_s \int d^3\mathbf{r} n^{5/3}(\mathbf{r}) + \int d^3 r V_{dı}(\mathbf{r}) n(r) + \frac{1}{2}\int d^3 r \int d^3 r' \frac{n(r)n(r')}{|r-r'|} \qquad (2.32)$$

formunda verilebilir. Burada, $A_s = \frac{3}{10}\left(3\pi^2\right)^{\frac{2}{3}} = 2.8712$ olarak tanımlanan bir katsayıdır. Thomas-Fermi teorisi çok parçacık etkileşmelerini tanımlamakta önemli bir ilk adım olmasına rağmen, Hartree-Fock teorisince öngörülen bir atomun degiş-tokuş enerjisini dikkate almadığından doğruluğu sınırlıdır. Ayrıca bu yaklaşıklıkta parçacıklar arası etkileşmeler göz önüne alınırken denklem (2.32) de son terim parçacıkların kendileri ile etkileşmelerini de içermektedir. Thomas Fermi yaklaşıklığı sadece çok

büyük sayıda parçacık içeren sistemlere uygulandığı için bu hatanın giderilmesine gerek duyulmamıştır.

2.4.2 Hohenberg-Kohn Teorisi

Hohenberg ve Kohn 1964 yılında $n(r)$ parçacık yoğunluğunun fonksiyonelini temel alan varyasyonel bir yöntem geliştirdiler. Yöntem, dış potansiyel ne olursa olsun taban durumdaki tüm elektronik sistemlere uygulanabilen bir F[n(r)] fonksiyonelinin tanımlanmasına dayanır.

Böylelikle sistemin taban durumundaki bütün fiziksel özellikleri parçacık yoğunluğu cinsinden tanımlanabileceği için sistemin bu Hamiltonyene karşılık gelen toplam enerjisinin beklenen değeri,

$$E[n] = T[n] + U[n] + V[n] \tag{2.33}$$

şeklinde parçacık yoğunluğunun bir fonksiyoneli olarak yazılır. Burada T kinetik enerjiyi, U parçacıklar arası etkileşmeyi, V ise dış potansiyeli tanımlamaktadır. Bu denklemde enerjiyi minimum yapan parçacık yoğunluğu n(r) belirlenir ve n(r) kullanılarak taban durum dalga fonksiyonu da belirlenmiş olur.

İlkesel olarak Hohenberg-Kohn teorisi hiçbir yaklaşım içermez ve bu anlamda tamdır ve bütün gözlenebilirlerin tam olarak hesaplanması mümkündür. Ancak kinetik ve etkileşme fonksiyonellerini tanımlayan tam ve açık bir form henüz belirlenememiştir. Bu nedenle, bu fonksiyoneller için bazı yaklaşımların kullanılması gerekmektedir.

2.4.3 Kohn-Sham Denklemleri

Kohn ve Sham 1965 de, çok-parçacık sistemleri için, değişim ve korelasyon etkilerini de içeren, Hartree-Fock denklemlerinine benzer öz-uyumlu denklemler için bir formülasyon önerdiler. Bu formülasyonda, gerçek ve etkileşen bir elektronlar sistemi, etkileşmeyen kuramsal bir sisteme dönüştürülerek etkin bir potansiyelde hareket ettirilir.

Yoğunluk fonksiyoneli teorisi, dalga fonksiyonlarını kullanmadan sadece temel durum elektron yoğunluğunu kullanarak çok parçacık sistemlerinin özelliklerini belirlemeyi amaçlar. N_0 elektron içeren bir sistemin Schrödinger denklemi,

$$H = \sum_{i=1}^{N_0}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r_i)\right] + U_0\sum_{i<j}^{N_0}\delta(r_i - r_j) \tag{2.34}$$

olarak tanımlanır. Bu denklemi kullanarak enerji yoğunluk fonksiyonu cinsinden tanımlanırsa en genel halde

$$E(n(\vec{r})) = \frac{1}{2}\int\left[\nabla_r^2(\vec{r},\vec{r}')\right]d\vec{r} + \int v(\vec{r})n(\vec{r})d\vec{r} + \frac{e^2}{2}\int\int\frac{n(\vec{r})n(\vec{r}')}{4\pi\varepsilon_0|\vec{r}-\vec{r}'|}d\vec{r}\,d\vec{r}' + E_{xc}(n(\vec{r})) \tag{2.35}$$

şeklinde tanımlanır.

Enerjideki ilk terim kinetik enerjiyi, ikinci terim dış potansiyelden kaynaklanan enerjiyi, üçüncü terim elektron-elektron etkileşmseninden kaynaklanan Hartree Potansiyeli, son terim ise ilk üç terimde hesaplanamayan tüm katkıları içeren değiş-tokuş

ve korelasyon enerjisini göstermektedir. Değiş-tokuş ve korelasyon potansiyelinin bilinmesi halinde kapalı bir takım oluşturan bu denklemler ilk kez (Kohn ve Sham 1965) tarafından türetilmiştir. Tam formu bilinmeyen değiş-tokuş ve korelasyon potansiyeli yoğunluğun bir fonksiyonudur, fakat dış potansiyele bağlı bir katkı olarak alınabilir. Bu bağlılık, incelenen fiziksel sistemin kendine özgü bir değiş-tokuş ve korelasyon enerji fonksiyonuna sahip olduğunu gösterir.

Buraya kadar Kohn-Sham Denklemleri fermiyonlar için tanımlansada benzer yaklaşımlar üç ve daha az boyutlu tuzaklardaki N_0 bozondan oluşan sistem içinde kullanılabilir. Bu durumda elektron için tanımlanan yoğunluk dağılımı bozonlar için,

$$n(r) = N_0 |\psi_0(r)|^2 \tag{2.36}$$

ifadesinden hesaplanır, yani etkileşmeyen sistemde bütün bozonların taban durumda bulundukları varsayılır.

2.5 Çözüm Yöntemlerinin Kıyaslanması ve Bozonlara Uygulanması

Tek elektron dalga fonksiyonlarının çarpımından oluşan Hartree dalga fonksiyonun tanımlanmasının akabinde, Slater determinantı olarak isimlendirilen dalga fonksiyonu Slater ve Fock tarafından oluşturulmuştur. Sistemin Schrödinger denklemi, kendi içinde tutarlı alan döngüsü içinde çözülür. Elde edilen dalga fonksiyonları atomdaki elektronları tanımlayan en iyi dalga fonksiyonlarıdır. Ancak hesap güçlüğünden, yıllarca, dalga fonksiyonu yerine elektron yoğunluğu kullanılmıştır.

YFT'de ise sistemin taban durum enerjisi, yoğunluk fonksiyoneli olarak yazılmıştır. Yoğunluk, sistemin parçacık sayısını, parçacık-parçacık etkileşmelerini, parçacıkların çekirdekle etkileşim potansiyeli gibi sistemle ilgili tüm bilgiyi vermektedir.

Bogoliubov yaklaşımı sıfır sıcaklıktaki zayıf etkileşimli bozon gazları için geliştirilmiştir. Üst seviyelerdeki bozonların ihmal edilebildiği makroskopik yoğuşma limitinde Bogoliubov yaklaşımında kullanılan dalga fonksiyonu Gross-Pitaevskii denklemleri ile verilir. Sonlu sıcaklıklarda yoğuşmayan parçacıkların etkileri Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) denklemleri kullanılarak incelenebilir. Hartree-Fock yaklaşıklığı korelasyon etkilerini içermemektedir. Bu çalışmada ikinci kuantumlanma formalizmi kullanılarak uyarılmış durumların da etkisi incelenmiştir. Literatürde yer alan şekliyle bozonlar için YFT yaklaşımı şu ana kadar Gross-Pitaevskii teorisinin çok da ilerisine gidememiştir yani sadece sıfır sıcaklık ve zayıf etkileşmeler ele alınarak hesaplamalar yapılmıştır. Bu yaklaşımda da üst sevilerdeki bozonlarla etkileşmeler göz ardı edilmektedir. Değiş-tokuş ve korelasyon enerjisinin toplam enerjiye olan katkısı tam olarak bilinmemektedir ve buradan kaynaklanan engel YFT yaklaşımının esas eksikliğidir. Thomas-Fermi teorisinde sadece çok büyük sayıda parçacık içeren sistemlere uygulandığı için $N_0<10$ parçacık sistemleri için uygun değildir. Kuantum Monte Carlo (QMC) yöntemleriyle çok parçacık bozon sistemlerinde parçacıklar arası etkileşim sonucunda üst seviyelere uyarılma oranları incelenmiştir (DuBois, 2001 ve DuBois, 2002).

Benzer olarak Hartre-Fock yönteminden varyasyon yöntemine indirgenmiş şekliyle kuvvetli ve zayıf (temas potansiyeli) etkileşmeler için taban durum hesaplamaları yapmışlardır (Romanovsky, 2004). Ancak, yapılan hesaplamalara göre; çok parçacık bozon sistemlerinin taban durumdaki bazı özelliklerini incelerken temas potansiyeli kullanılmasının doğru olmadığını göstermiştir. Temas potansiyeli sıfır menzilli bir potansiyel olduğu için sadece aynı konumda bulunmaları halinde bir etkileşim söz konusu olacaktır. Bu nedenle tuzak içerisindeki çok küçük bir bölgede tüm parçacıkların bulunması mümkün olabilecektir. Gerçekte ise Bose Einstein Yoğuşması sırasında sıcaklığın çok düşük olması nedeniyle parçacıkların termal de Broglie dalga boyları çok uzun hale gelir ve parçacıklar sürekli bir etkileşim

içindedirler. Bu yüzden bu tezde parçacıklar arası etkileşeme olarak kuvvetli itici logaritmik ve Bessel fonksiyonları ile tanımlanan potansiyel kullanılmış ve üst seviyedeki parçacıkların etkilerini de hesaba katarak sistemin enerjisi Hartre-Fock Yaklaşımı ve Varyasyon yöntemi ile araştırılacaktır.

BÖLÜM 3: HARTREE-FOCK VE VARYASYONEL YAKLAŞIMIN BOZONİK SİSTEMLER İÇİN TEORİSİ

Bir sistemde yer alan parçacıkların yerleri değiştirildiğinde sistemin fiziksel parametrelerinde bir değişim olmuyorsa parçacıklar özdeştir. Klasik istatistik mekanikte yörüngeleri izlenebilir olduğundan parçacıklar özdeş olmasına rağmen birbirinden ayırt edilmesi mümkündür. Kuantum istatistiğinde özdeş parçacıkları birbirinden ayırt etmek mümkün değildir. Ayırt edici tek özellik fermiyonlar için geçerli olan Pauli dışarılama ilkesine göre, aynı kuantum sayılarına sahip iki fermiyon aynı sistem içinde bulunamaz.

İki parçacıklı bir sistem örneğinde durumu inceleyebiliriz. Parçacıkların birincisinin yerinin ve spininin 1 sayısı ile gösterildiğini ve bu parçacığın ϕ_A durumunda bulunduğunu, ikinci parçacığın yerini ve spinini 2 sayısı ile gösterildiğini ve bu parçaığın ϕ_B durumunda bulunduğunu farz edelim. Çok parçacıklı bir sistemi tanımlayan dalga fonksiyonu her bir parçacığın dalga fonksiyonlarının çarpımına eşittir ve $\psi\ (1,2) = \phi_A(1)\phi_B(2)$ olarak ifade edilir. İki parçacık değiş tokuş edildiğinde yeni dalga fonksiyonu $\psi(1,2) = \phi_B(1)\phi_A(2)$ şeklinde olur. Olasılık yoğunluğu, özdeş parçacıklar aralarında yer değiştirdiği zaman aynı kalmalıdır yani değiş-tokuş edilmiş dalga fonksiyonu $\psi(2,1)$ ile gerçek dalga fonksiyonu $\psi(1,2)$ arasında en fazla işareti farklı olabilir. Eğer parçacıkların değiş-tokuşu ile dalga fonksiyonun işareti değişiyorsa bu durumda dalga fonksiyonu antisimetriktir. Özdeş parçacıkları tanımlayan dalga fonksiyonu parçacıkların değiş-tokuşu altında işaret değiştirmiyorsa dalga fonksiyonu simetriktir. Simetrik dalga fonksiyonlarına sahip özdeş parçacıklar Bose-Einstein istatistiğine uyarlar ve bu nedenle bozon adını alırlar. Antisimetrik dalga fonksiyonlarına sahip özdeş parçacıklar da Fermi Dirac istatistiğine uyarlar ve bu sebepten dolayı fermiyon adını alırlar. Bir parçacığın spinlerinin değeri ile bu parçacıklardan oluşan sistemlere ait dalga fonksiyonlarının simetri özelliği arasında bir ilişki vardır. Spinleri $\hbar$ nin tam katı değerinde olan parçacıklar bozondur. Spinleri $\hbar$ nin buçuklu tam katı değerinde olan parçacıklar fermiyondur. Mezonlar ve fotonlar

bozonik özellik, protonlar ve nötronlar fermiyonik özellik göstermektedir. Bu açılamaların ışığında toplam dalga fonksiyonu şöyle tanımlanır.

$$\psi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2!}}\left[\phi_A(1)\phi_B(2) \pm \phi_B(1)\phi_A(2)\right] \tag{3.1}$$

Eğer (3.1) denkleminde ortadaki işaret artı seçilirse toplam dalga fonksiyonu parçacıkların değiş-tokuşuna göre simetrik durumu yani bozon benzeri parçacıkları tanımlamaktadır. Eğer aradaki işaret eksi ise o zaman sonuç antisimetrik dalga fonksiyonudur. Bu durumda fermiyonları tanımlamaktadır. Başındaki kat sayı ise parçacık sayısına bağlı olarak değişen normalizasyon katsayısıdır.

Eğer iki fermiyon aynı kuantum durumunda ise $\phi_A(1) = \phi_B(1)$ *ve* $\phi_A(2) = \phi_B(2)$ olur. Bu durumda fermiyonları tanımlayan dalga fonksiyonu sıfır olur dolayısıyla olasılık yoğunluğu da sıfırdır. O halde iki fermiyon aynı kuantum durumunda bulunamaz. Bu durum Pauli dışarılama ilkesinin matematiksel temelidir. Buna karşın sistemi tanımlayan dalga fonksiyonu A ve B katsayılarının eşit olması durumunda bozonlar için sıfır olmamaktadır. Bu sebepten dolayı bozonların aynı kuantum durumunda bulunabildiğini yani Pauli dışarılama ilkesine uymadığı görülmektedir. Yeteri kadar düşük sıcaklıklara inilirse bozonlar fermiyonlara göre çok farklı davranış gösterip büyük bir çoğunluğu taban durum enerjisinde toplanmaya başlarlar. Böyle tek bir kuantum durumuna toplanmaya Bose-Einstein yoğuşması denilmektedir.

Bu açıklamalar ışığında Bose-Einstein yoğuşmasını gözlemek için tanımlanması gereken dalga fonksiyonu Hartree dalga fonksiyonu olmalı yani tek parçaçık dalga fonksiyonlarının çarpımından oluşmalıdır. Eğer bozon parçacıklarının da kendi aralarında değiş-tokuş yaptığını göz önünde alınırsa bu durumda simetri özelliğini sağlayan Hartre-Fock dalga fonksiyonu kullanılmalıdır. Bu iki dalga fonksiyonu tanımı kullanılarak parçacıklar arası etkileşme potansiyelinin şiddeti değiştirildiğinde parçacık dağılımının nasıl değiştiği ve faz geçişinin incelenmesi bu tezin araştırma konusudur.

3.1 Bozonlar İçin Hartree-Fock Yaklaşıklığı

Çok parçacıklı bozonik sistemlerinin incelenmesinde Hartree-Fock yaklaşıklımı kullanılacaktır. İkinci kuantumlanma formalizmi altında sistemin hamilton fonksiyonu alan operatörleri $\psi^+(r)$ *ve* $\psi(r)$ kullanılarak tanımlanır. $\psi^+(r)$ *ve* $\psi(r)$ uzayda r konumunda bir parçacığın yaratılmasına ve yok edilmesine karşılık gelir.

Alan operatörleri bozonlardan oluşan böyle sürekli sistemler için komütatör

$$[\hat{\psi}(r),\hat{\psi}^+(r')] = \delta(r-r') \tag{3.2}$$

bağıntısına uyarlar. Parçacık sayısı,

$$\hat{N}_0 = \int d^3\vec{r}\,\hat{\psi}^+(r)\hat{\psi}(r) \tag{3.3}$$

olur. Sistemin hamiltonyeni ,

$$\hat{H} = \int d\vec{r}\,\hat{\psi}^+(\vec{r})\hat{H}_0\hat{\psi}(\vec{r}) + \frac{1}{2}\int d\vec{r}d\vec{r}'\hat{\psi}^+(\vec{r})\hat{\psi}^+(\vec{r}')V(\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|)\hat{\psi}(\vec{r})\hat{\psi}(\vec{r}') \tag{3.4}$$

olarak verilir (Dalfovo, 1999 ve Olivier, 2004). Burada tek parçacık hamiltonyeni H_0,

$$\hat{H}_0 = \frac{p^2}{2m} + V_{ext}(\vec{r}) \tag{3.5}$$

dir. Denklem 3.4 'teki $V(\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|)$ parçacıklar arası etkileşme potansiyelidir. Üç boyutlu seyreltilmiş bozon gazı için etkileşme potansiyeli (Yannouleas, 2005),

$$V(\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|) = g\delta(\vec{r}-\vec{r}') \tag{3.6}$$

tanımlanır. Bozonlar arası Coulomb etkileşmesi ifadesi üç boyutta Poisson denklemi çözülerek iki boyutta indirgendiğinde,

$$V(\left|\vec{r}-\vec{r}^{\,'}\right|)=\left(V_0 K_0\left(\frac{\left|\vec{r}-\vec{r}^{\,'}\right|}{\kappa}\right)\right) \tag{3.7}$$

olduğu gösterilmiştir (Nelson, 1989). Burada K_0 Bessel fonksiyonudur. Bessel fonksiyonunun limit durumları incelendiğinde $x=\frac{\left|\vec{r}-\vec{r}^{\,'}\right|}{\kappa}$ tanımlaması yapılırsa etkileşim potansiyelinin

$$V(\left|\vec{r}-\vec{r}^{\,'}\right|)=\begin{pmatrix} V_0\sqrt{\frac{\pi}{2x}}e^{-x} \;, & x>>1 \\ \\ -V_0 Log(x)\;, & x<<1 \end{pmatrix} \tag{3.8}$$

olduğu görülmüştür (Davoudi vd., 2001). Burada V_0 çiftlenim sabiti, κ varyasyon parametresini gösterir. Bessel fonksiyonun değişkeni çok küçük ise bu ifade seriye açılabilir ve yaklaşık olarak logaritmik bir fonksiyona eşit olarak düşünülebilir. Alan operatörünü hangi parçacığın dalga fonksiyonu olduğunu bilmediğimiz $\phi_i(\vec{r})$ cinsinden yaratıcı ve yok edici fonksiyonlar yardımıyla,

$$\hat{\psi}(\vec{r})=\sum_i d_i^{+}\phi_i(\vec{r}) \tag{3.9}$$

belirlenir. Burada $\hat{d}^{+}$ *ve* $\hat{d}$ ile gösterilen yaratma ve yok etme operatörleri,

$$\begin{aligned} \hat{d}\left|N_0\right\rangle &= \sqrt{N_0}\left|N_0-1\right\rangle \\ \hat{d}^{+}\left|N_0\right\rangle &= \sqrt{N_0+1}\left|N_0+1\right\rangle \end{aligned} \tag{3.10}$$

ve

$$\left\lfloor \hat{d}_i , \hat{d}_j^{+} \right\rfloor = \delta_{ij} \tag{3.11}$$

özelliklerine sahiptirler. Taban durum enerjisinin beklenen değerini artırma ve azaltma operatörlerine bağlı olarak aşağıdaki gibi yazılabilir (Christopher, 2004).

$$E = \langle TD | H | TD \rangle = \sum_i n_i H_0^{ii} + \frac{1}{2} \sum_{ij} n_i n_j (V_{ijij} + V_{ijji}) - \frac{1}{2} \sum_i n_i (n_i + 1) V_{iiii} \tag{3.12}$$

Bu denklemdeki $n_i = \left\langle d_i^{+} d_i \right\rangle$, bir parçacığın i.orbital de bulunma olasılığını ifade eder. (3.12) denkleminde

$$H_0^{ii} = \langle i | H_0^{ii} | i \rangle = \int \phi_i^{*}(\vec{r}) \hat{H}_0 \phi_i(\vec{r}) d\vec{r} \tag{3.13}$$

$$V_{ijkl} = \langle ij | V | kl \rangle = \int \phi_i^{*}(\vec{r}) \phi_j(\vec{r}') V(|\vec{r} - \vec{r}'|) \phi_k^{*}(\vec{r}') \phi_l(\vec{r}) d\vec{r} d\vec{r}' \tag{3.14}$$

ve

$$\langle TD | \hat{d}_i^{+} \hat{d}_j^{+} \hat{d}_k \hat{d}_l | TD \rangle = (\delta_{il}\delta_{kl} + \delta_{ik}\delta_{jl}) n_i n_j - \delta_{ijkl} n_i (n_i + 1) \tag{3.15}$$

olarak ele alınmıştır. $\phi_i(\vec{r})$ 'yi diklik koşulunu sağlayan $\varphi_n(\vec{r})$ cinsinden

$$\phi_i(\vec{r}) = \sum_n C_i^n \varphi_n(\vec{r}) \tag{3.16}$$

olur. Böylece alan operatörünü tekrar düzenlenirse,

$$\hat{\psi}(\vec{r}) = \sum_n \hat{a}_n \varphi_n(\vec{r}) \tag{3.17}$$

elde edilir. (3.16) denklemini (3.12) denkleminde yerine yazarsak taban durum enerjisi,

$$E = \sum_{\substack{i \\ nn'}} n_i C_i^{n*} C_i^{n} H_0^{nn'} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{ij \\ nn' \\ mm'}} n_i n_j C_i^{n*} C_j^{m*} C_i^{n'} C_j^{m'} (V_{nmn'm'} + V_{nmm'n'}) \\ - \frac{1}{2} \sum_{\substack{ij \\ nn' \\ mm'}} n_i (n_i + 1) C_i^{n*} C_i^{m*} C_i^{n'} C_i^{m'} V_{nmn'm'} \tag{3.18}$$

bulunur. E 'yi minimize ederek $\{C_i^n, n_i\}$ katsayılarını elde edilir. Dalga fonksiyonun ortogonallik özelliğini kullanıp minimizasyon yapılırsa denklem,

$$\frac{\partial \tilde{E}}{\partial C_k^{l*}} = n_k \sum_i C_k^{n'} H_o^{\ln'} - \varepsilon_k C_k^l + \frac{1}{2} \sum_{\substack{ij \\ nn' \\ mm'}} n_i n_j C_i^{n'} C_j^{m'} \left[\delta_{ki}\delta_{nl} C_j^{m*} + \delta_{ik}\delta_{ml} C_i^{n*}\right](V_{nmnm'} + V_{nmmn'}) \\ - \frac{1}{2} \sum_{\substack{in \\ nn' \\ mm'}} n_i (n_i + 1) C_i^{n'} C_i^{m'} \left[\delta_{ki}\delta_{nl} C_i^{m*} + \delta_{ik}\delta_{ml} C_i^{n*}\right](V_{nmnm'}) = 0 \tag{3.19}$$

haline dönüşür. Bu denklem düzenlenirse,

$$n_k \varepsilon_k C_k^l = n_k \sum_{n'} C_k^{n'} H_0^{\ln'} + \frac{1}{2} n_k \sum_{\substack{in \\ n'm}} n_i C_k^m C_i^{n'} C_i^{n\,*\,'} (V_{n'\ln m} + V_{n'lmn} + V_{\ln'mn} + V_{\ln'nm}) \\ - \frac{1}{2} n_k (n_k + 1) \sum_{nn'm} C_k^{n'} C_k^m C_k^{n*} (V_{\ln mn'} + V_{n\ln'm}) \tag{3.20}$$

elde edilir. Eğer $n_k \neq 0$ ise (3.20) denklemi,

$$\varepsilon_k C_k^l = \sum_{n'} C_k^{n'} \left[\begin{array}{l} H_0^{\ln'} + \frac{1}{2} \sum_{inm} n_i C_i^{m*} C_i^{n\ '} (V_{m\ln n'} + V_{m\ln' n} + V_{lmn'n} + V_{lmnn'}) \\ -\frac{1}{2}(n_k + 1) \sum_{nm} C_k^m C_k^{n*} (V_{\ln mn'} + V_{n\ln' m}) \end{array} \right] \tag{3.21}$$

olarak bulunur. Burada $k = 1,....n_{par}$ sistemdeki parçacık sayısını ve $l = 0,....n_{seviye}$ hangi enerji durumunda olduğunu belirtmektedir. Böylece bozonlar için Hartree-Fock denklemini elde edilmiş olur. Denklem (3.21) yeni ifadelerle tanımlanırsa.

$$\left\langle a_m^+ a_n \right\rangle = P_{mn} = \sum_i n_i C_i^{m*} C_i^n \quad \text{ve} \quad P_{mn}^k = n_k C_k^m C_k^{n*} \tag{3.22}$$

olur. Bu ifadeler yardımıyla yoğunluk fonksiyonu tanımlanabilir. Böylece durum yoğunluğu,

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{\substack{nm \\ i}} n_i C_i^{m*} C_i^n \varphi_m^* \varphi_n = \sum_{nm} P_{mn} \varphi_m^*(\vec{r}) \varphi_n(\vec{r}) = \sum_i n_i \left| \psi_i(\vec{r}) \right|^2 \tag{3.23}$$

olarak bulunur. (3.16) denklemini yoğunluk fonksiyonu cinsinden tekrar düzenlenirse,

$$\varepsilon_k C_k^l = \sum_{n'} C_k^{n'} \left[H_0^{\ln'} + \sum_{nm} P_{mn} (V_{lmn'n} + V_{lmnn'}) - \sum_{nm} (n_k + 1) C_k^{m*} C_k^n (V_{lmnn'}) \right] \tag{3.24}$$

olarak elde edilir. Burada $V_{lmn'n}$ Hartree $V_{lmnn'}$ ise Fock potansiyelleridir. Denklem (3.24) de $P_{mn} = P_{nm}^*$ eşitliği kullanıldı. Hartree kısmının Hartree potansiyelinin matrisi olduğu görülür. Hartree potansiyelini,

$$V_H(\vec{r}) = \int \rho(\vec{r}) V\left(\left|\vec{r} - \vec{r}'\right|\right) d\vec{r}' \tag{3.25}$$

gibi tanımlanır. Potansiyelin beklenen değeri,

$$\langle l|V_H(\vec{r})|n'\rangle = \int \varphi_l^*(\vec{r}) V_H(\vec{r}) \varphi_{n'}(\vec{r}) d\vec{r} \tag{3.26}$$

olur. Bu ifadeleri kullanarak enerji ifadesi,

$$\begin{aligned} E = & \sum_{\substack{i \\ nn'}} n_i C_i^{n*} C_i^{n'} H_0^{nn'} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{ij \\ nn' \\ mm'}} n_i n_j C_i^{n*} C_i^{n'} C_j^{m*} C_j^{m'} \left(V_{nmn'm'} + V_{nmm'n'} \right) \\ & - \frac{1}{2} \sum_{\substack{i \\ nn' \\ mm'}} n_i (n_i + 1) C_i^{n*} C_i^{n'} C_i^{m*} C_i^{m'} \left(V_{nmn'm'} \right) \end{aligned} \tag{3.27}$$

yada

$$E = \sum_{nn'} P_{nn'} H_0^{nn'} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{nn' \\ mm'}} P_{nn'} P_{mm'} \left(V_{nmn'm'} + V_{nmm'n'} \right) - \frac{1}{2} \sum_{\substack{i \\ nn' \\ mm'}} n_i C_i^{n*} C_i^{n'} P_{mm'} \left(V_{nmn'm'} \right) \tag{3.28}$$

olarak düzenlenebilir. Bu ifadeyi bir parçacığın enerjisi cinsinden tekrarlarsak,

$$\begin{aligned} \sum_i n_i \varepsilon_i = & \sum_{i\,\ln'} n_i C_i^{l*} C_i^{n'} H_0^{\ln'} + \sum_{\substack{i \\ \ln' \\ nm}} n_i P_{mn} C_i^{l*} C_i^{n'} \left(V_{lmn'n} + V_{lmnn'} \right) - \frac{1}{2} \sum_{\substack{i \\ \ln' \\ nm}} n_i P^i{}_{mn} C_i^{l*} C_i^{n'} \left(V_{lmn'n} \right) \\ = & \sum_{nn'} P_{nn'} H_0^{\ln'} + \sum_{\substack{nn' \\ mm'}} P_{mm'} P_{nn'} \left(V_{nmn'm'} + V_{nmm'n'} \right) - \frac{1}{2} \sum_{\substack{i \\ \ln' \\ nm}} n_i P^i{}_{mn} C_i^{l*} C_i^{n'} \left(V_{lmn'n} \right) \end{aligned} \tag{3.29}$$

formunda olur. Böylece taban durum enerjisi,

$$\begin{aligned} \sum_i n_i \varepsilon_i = & E + \sum_{\substack{nn' \\ mm'}} P_{mm'} P_{nn'} \left(V_{nmn'm'} + V_{nmm'n'} \right) - \frac{1}{2} \sum_{\substack{i \\ \ln' \\ nm}} n_i P^i{}_{mn} C_i^{l*} C_i^{n'} \left(V_{lmn'n} \right) \\ = & 2E - \sum_{nn'} P_{nn'} H_0^{nn'} \end{aligned} \tag{3.30}$$

olarak bulunur. Enerji değerinin bulunması için nümerik olarak öz-uyumlu çözüm yapılır.

3.2 Bozonlar için Gaussian Yaklaşıklığı

Çok parçacık dalga fonksiyonunu tek parçacık dalga fonksiyonun çarpımının olasılıklarının toplamı olarak aşağıdaki tanımlanır (Romanovsky, 2004 ve Mese vd., 2008).

$$|\psi\rangle=\frac{1}{\sqrt{N_0!}}Perm\left[\phi_1(r_1)...\phi_{N_0}(r_{N0})\right]=\frac{1}{\sqrt{N_0!}}\sum_{p=1}^{N_0!}\phi_{p(1)}(r_1)\phi_{p(2)}(r_2)...\phi_{p(N_0)}(r_{N_0}) \tag{3.31}$$

Buradaki toplam, p nin 1 den N_0 kadar permütasyonlarıdır. Burada p(i), i durumundaki p permütasyonunu ifade eder. Enerjinin beklenen değerini bulmak için normalizasyonu tanımlamak gerekir. Çok parçacık sistemi için normalizasyon,

$$\begin{aligned}\langle\psi|\psi\rangle&=\frac{1}{N_0!}Perm\left[\phi_1(r_1)...\phi_{N_0}(r_{N_0})\right]^* Perm\left[\phi_1(r_1)...\phi_{N_0}(r_{N_0})\right]dr_1...dr_{N0}\\&=\sum_{p_1p_2}\int dr_1...dr_{N0}\,\phi^*_{p_1(1)}(r_1)\phi_{p_2(1)}(r_1)...\phi^*_{p_1(N_0)}(r_{N0})\phi_{p_2(N_0)}(r_{N_0})\end{aligned} \tag{3.32}$$

olarak tanımlanır. Normalizasyonun tanımında genel olarak

$$S_{ij}=\int\phi_i^*(r)\phi_j(r)dr \tag{3.33}$$

örtüşme matrisi kullanılır (Ira, 2000). Bu matris ifadesi kullanılarak normalizasyon denklemi düzenlenirse,

$$N = \langle \psi | \psi \rangle = \frac{1}{N_0!} \sum_{p_1, p_2 = 1}^{N_0!} \prod_{i=1}^{N_0} S_{p_1(i) p_2(i)} \tag{3.34}$$

olmaktadır. En yalın hale indirgemek istenirse normalizasyon ifadesi,

$$N = \sum_{p_1=1}^{N_0!} \prod_{i=1}^{N_0} S_{p_1(i) i} \tag{3.35}$$

olarak tanımlanabilir. Örnek olarak iki parçacık için normalizasyonu açık olarak ifade edilirse, olası 2 durum vardır ve bunlarda p={12,21} dir. Böylece normalizasyon

$$N_2 = S_{11} S_{22} + S_{21} S_{12} \tag{3.36}$$

gibi tanımlanır. Benzer olarak üç parçacık için olası 6 durum vardır ve bunlar p={123, 132, 213, 231, 312, 321} dir.. Böylece normalizasyon

$$N_3 = S_{11} S_{22} S_{33} + S_{11} S_{32} S_{23} + S_{21} S_{12} S_{33} + S_{21} S_{32} S_{23} + S_{31} S_{12} S_{23} + S_{31} S_{22} S_{13} \tag{3.37}$$

gibidir. Çok parçacık sistemini en genel halde tanımlayan Hamiltonyen,

$$\begin{aligned} H &= \sum_{i=1}^{N_0} \left(\frac{P_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m w^2 (\alpha x^2 + y^2) \right) + \sum_{i \neq j} V_{\text{int}} \left(r_i - r_j \right) \\ &= \sum_{i=1}^{N_0} H_0(i) + \sum_{i \neq j} V_{\text{int}} \left(r_i - r_j \right) \end{aligned} \tag{3.38}$$

olarak tanımlanır. Burada α anisotropi parametresi, H_0 bütün tek parçacık etkilerini yani kinetik enerjiyi ve harmonik tuzak potansiyel enerjiyi içermektedir. Önce tek parçacık terimlerinden gelen enerji bulunursa,

$$E_0 = \sum_{i=1}^{N_0} \langle \psi | H_0(i) | \psi \rangle \tag{3.39}$$

olur. Bozonları tanımlayan dalga fonksiyonunu parçacıkların yer değiştirmelerine göre simetrik olduğundan birbirini tekrarlayan terimlerden kurtulup basitleştirirsek aşağıdaki denklem elde edilir.

$$\begin{aligned} E_0 &= N_0 \langle \psi | H_0(1) | \psi \rangle \\ &= N_0 \frac{1}{N_0!} \sum_{p_1, p_2 = 1}^{N_0!} \int \phi^*_{p_1(1)} H_0(1) \phi_{p_2(1)} dr_1 \int \prod_{i=2}^{N_0} \phi^*_{p_1(i)} \phi^*_{p_2(i)} dr_2 \ldots dr_{N_0} \end{aligned} \tag{3.40}$$

Bu enerji denklemini daha yalın hale getirildiğinde

$$E_0 = \frac{1}{(N_0 - 1)!} \sum_{p_1, p_2 = 1}^{N_0!} H_0^{p_1(1) p_2(1)} \prod_{i=2}^{N_0} S_{p_1(i) p_2(i)} \tag{3.41}$$

elde edilir. Parçacıklar arası etkileşmeyi içeren enerji denklemi

$$E_{\text{int}} = \int d\vec{r} d\vec{r}' \phi_i^*(\vec{r}) \phi_j^*(\vec{r}') V(|r - r'|) \phi_k(\vec{r}') \phi_l(\vec{r}) \tag{3.42}$$

ile bulunur. Bu ifade de dalga fonksiyonu parçacıkların yer değiştirmelerine göre simetrik olduğundan daha basit

$$\begin{aligned} E_{\text{int}} &= \frac{N_0(N_0 - 1)}{2} \langle \psi | V(1-2) | \psi \rangle \\ &= \frac{N_0(N_0 - 1)}{2(N_0!)} \sum_{p_1, p_2 = 1}^{N_0!} \left(\iint \phi_{p_1(1)} \phi_{p_1(2)} V(1-2) \phi_{p_2(1)} \phi_{p_21(2)} dr_1 dr_2 \right) \prod_{i=3}^{N_0} S_{p_1(i) p_2(i)} \end{aligned} \tag{3.43}$$

denklemiyle tanımlanır.

BÖLÜM 4: İZOTROPİK TUZAK İÇİNDEKİ BOZONLAR İÇİN HARTREE, HARTREE-FOCK VE VARYASYONEL SONUÇLAR

Parçacıklar arası etkileşmeler ihmal edilirse N_0 bozondan oluşan bir gazın Hamilton fonksiyonu,

$$H = \sum_{i=1}^{N_0} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{r}_i) \right] \tag{4.1}$$

ile tanımlanabilir. Deneysel olarak Bose-Einstein Yoğumasının gerçekleşmesi için bozon gazı bir magneto optik tuzakta tutulur. Tuzağın merkezinde oluşan potansiyeli tanımlamak için harmonik osilatör potansiyeli kullanılır. Dışarıdan uygulanan iki boyutlu harmonik-osilatör potansiyeli,

$$V(\vec{r}_i) = \frac{m}{2}\left(w_1^2 x^2 + w_2^2 y^2 \right) \tag{4.2}$$

ile ifade edilebilir. Burada w_1 *ve* w_2 sırasıyla x ve y doğrultudaki salınım frekanslarıdır. Eğer $w_1 = w_2$ ise izotropik harmonik potansiyeli elde edilir.

İndirgenmiş uzunluk birimi tuzağın karakteristik genişliği olan $l_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{mw}}$ ile enerji birimi ise $\hbar w$ olarak tanımlanırsa indirgenmiş birimlerde sistemin toplam Hamilton operatörü (Mese vd., 2008),

$$\hat{H} = \sum_i^{N_0} \frac{\hbar^2}{m}\left[\left(-\frac{\nabla_i{}^2}{2} + \frac{m^2 w^2}{2\hbar^2}\frac{r_i^2}{2}\right)\right] = \sum_i^{N_0} \hbar w l_0^2\left[\left(-\frac{\nabla_i{}^2}{2} + \frac{1}{2l_0^4}\frac{r_i^2}{2}\right)\right] = \sum_i^{N_0}\left[-\frac{\nabla_i{}^2}{2} + \frac{r_i^2}{2}\right] \quad (4.3)$$

olarak belirlenir. Denklem 4.3 de bozonlar arası etkileşme ihmal edildiğinden çok parçacıklı sistemin Homiltonyeni tek parçacık hamiltonyenlerinin toplamı olarak tanımlanabilmektedir.

4.1 Etkileşme Potansiyelinin İncelenmesi

Parçacıklar arası etkileşme potansiyeli denklem (3.7) de tanımlandığı gibi

$$V(\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|)=\sum_{i<j}^{N_0}V(\left|\vec{r}_i-\vec{r}_j\right|)=V_0K_0\left(\frac{\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|}{\kappa}\right)$$

şeklindedir. Bununla birlikte $K_n(x)$ Bessel fonksiyonu argümanı x'in çok küçük olduğu durumlarda (x<<) $-\log(x)$ olarak ifade edilebilir. Bose-Einstein Yoğuşması probleminde bozonlar arası etkileşme potansiyelini logaritmik olarak kullanılmasının doğru sonuçlar verdiği gözlenmiştir (C.J. Pethick ve H. Smith, 2002). $\gamma=0.577$ *Euler Sabiti ve* $I_n(x)=\frac{e^x}{\sqrt{2\pi x}}\left[1-\frac{4n^2-1^2}{1!8x}+.....\right]$ olmak üzere K_0 modifiye Bessel fonksiyonun en genel ifadesi

$$K_n(x)=(-1)^{n+1}\left(\gamma+\log_e\frac{x}{2}\right)I_n(x)+\frac{\left(\frac{x}{2}\right)^2}{(1!)^2}+\frac{\left(\frac{x}{2}\right)^4}{(2!)^2}(1+\frac{1}{2})+..... \qquad (4.4)$$

ile verilir.

Bozonlar arası etkileşme potansiyelinin beklenen değeri E_{etk}, logaritmik ve Bessel etkileşme fonksiyonları için sırasıyla Şekil 4.1.a ve b de gösterilmiştir. Şekli 4.1 a da, logaritmik potansiyel kullanıldığında potansiyelin erim mesafesi (cut off) olarak

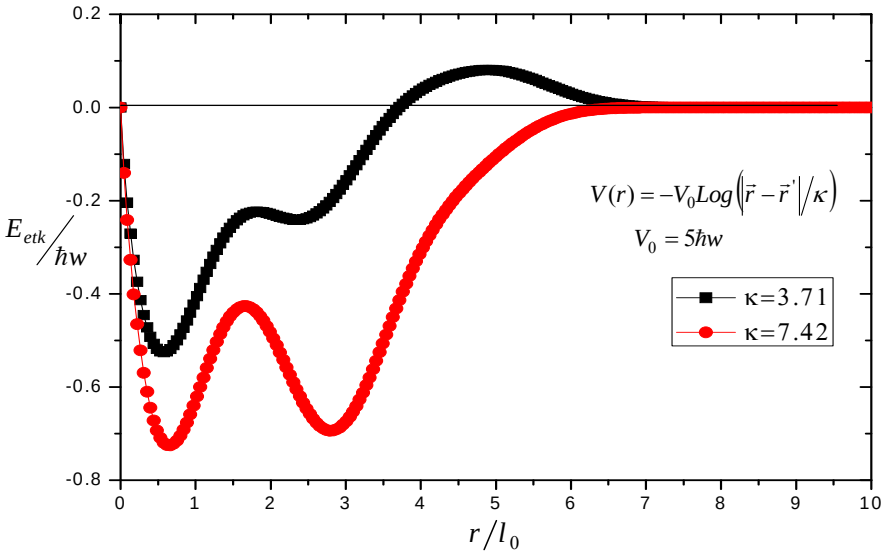
tanımlanan $\kappa = 3.71$ *ve* $\kappa = 7.42$ değerleri için etkileşme enerjilerinin davranışında karakter farklılığı gözlenmektedir. Bunun nedeni erim mesafesi $\kappa = 3.71$ nin parçacıkların farklı yerlerde lokalize olması durumunda parçacıklar arası mesafeye göre küçük olması ve potansiyelin değişkeni $\left(\left|\vec{r} - \vec{r}'\right| / \kappa\right) < 1$ ise log(x) ifadenin sonucu negatif, eğer birden büyük ise pozitif olmasıdır. Bu nedenle erim mesafesi $\kappa = 3.71$ olduğunda etkileşme enerjisinde davranış farklılığı doğmaktadır. Eğer $\kappa = 7.42$ olarak yani ilk değerin 2 katı alınırsa parçacıkların farklı yerlerde lokalize olması durumunda parçacıklar arası mesafe erim mesafesinden küçük kaldığından ve potansiyel değişkeni birden büyük olması için parçacıklar arası mesafenin çok büyük olması gerektiğinden logaritmik potansiyel Bessel fonksiyonuna yakınsamaktadır. Çiftenim sabitinin değerini değiştirmek sadece etkileşme enerjinin derinliğini etkilemekte, erim uzunluğunu ise değiştirmemektedir. κ'nin aynı değerleri için Şekil 4.1 b de, $V_0 K_0\left(\left|\vec{r} - \vec{r}'\right| / \kappa\right)$ potansiyeli kullanıldığında iki farklı erim mesafesi için karakter farklılığı görülmemektedir.

Şekil 4.2 den görüldüğü gibi parçacıklar arası mesafe çok artarsa etkileşme enerjisi sıfır olmaktadır. Bunun anlamı, parçacıklar birbirleriyle etkileşmeden farklı yerlerde lokalize olmakta ve kristal davranışı göstermektedir. Parçacıklar arası etkileşme enerjileri karşılaştırıldığında potansiyelinin değişkeni x<<1 olduğu durumda Bessel fonksiyonunu $-Iog(x)$ olarak almak iyi bir yaklaşım oluşturmaktadır.

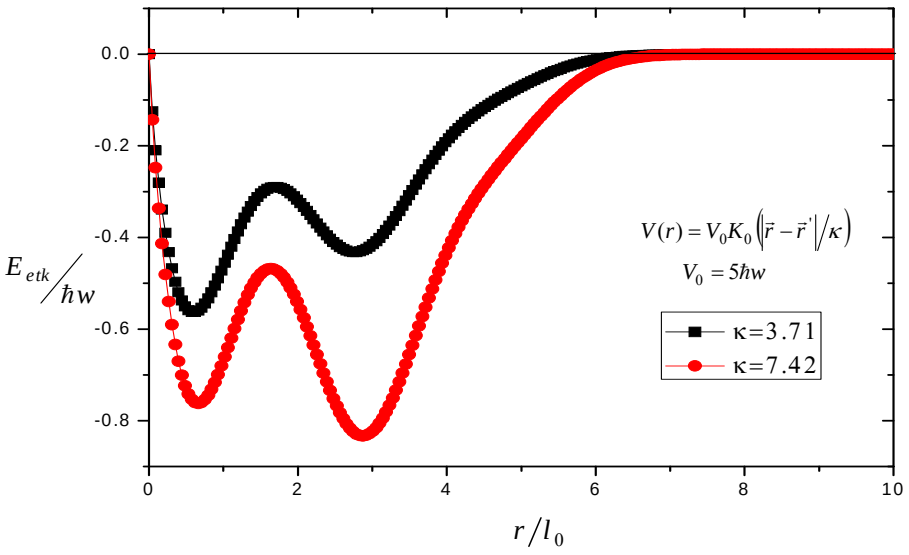
Şekil 4.3 de ise etkileşme enerjisi ile harmonik tuzak enerjilerinin toplamının konuma göre nasıl değiştiği incelenmiştir. Harmonik tuzak potansiyel enerjisi etkileşme enerjiye göre daha etkin olduğundan logaritmik potansiyelin enerjisinde küçük erim mesafeleri için görülen davranış farklılıklarının çok fazla etkisinin olmadığı belirlenir.

Ancak çok küçük gibi görülen bu davranış değişikliği özellikle parçacık sayısının büyük olduğu durumlarda yoğunluk dağılımlarında önemli değişmelere neden olmaktadır. Şekil 4.3 a ve b de sistemin toplam potansiyel enerjini sırasıyla logaritmik ve Bessel fonksiyonlarına göre değişimi araştırılmıştır. Şekil 4.3 c de ise logaritmik ve Bessel fonksiyonları ile tanımlanan etkileşme ve tuzak potansiyel enerjilerinin toplamı aynı şekil üzerinde gösterilmiştir. Genel olarak iki farklı fonksiyonla tanımlanan etkileşme potansiyeli kullanılarak elde edilen toplam potansiyel enerjileri arasında bir davranış farklılığı gözlenmemiştir.

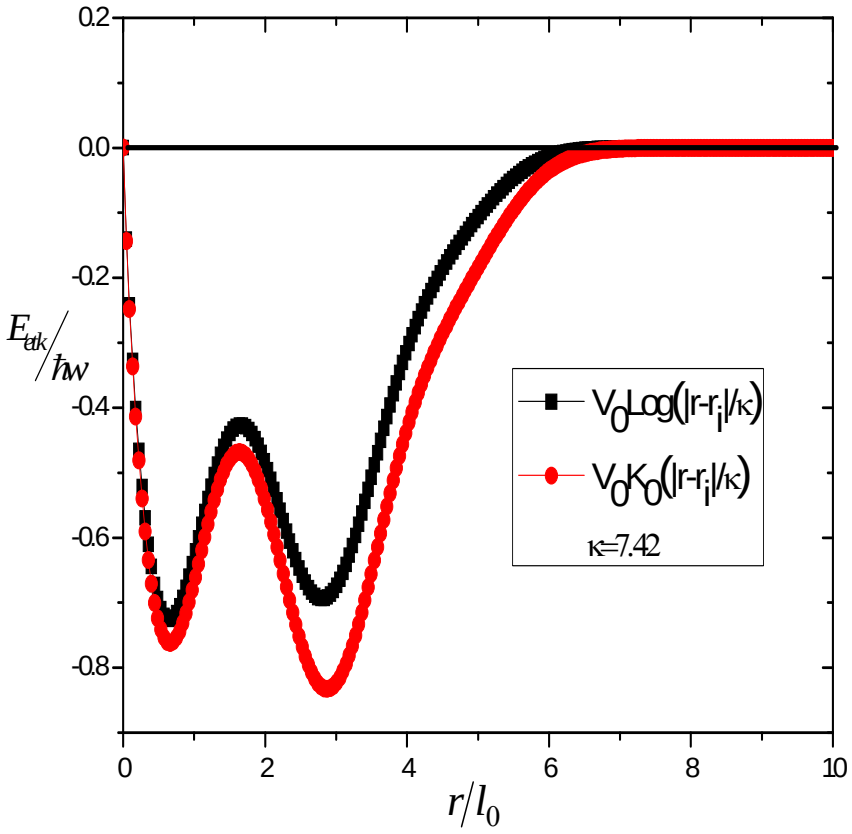
a)



b)

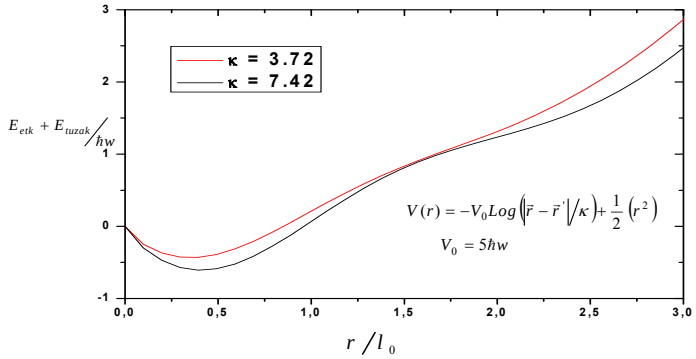


Şekil 4.1 Etkileşme enerjisinin a) logaritmik ,b) Bessel fonksiyonu için konuma bağlı değişimi

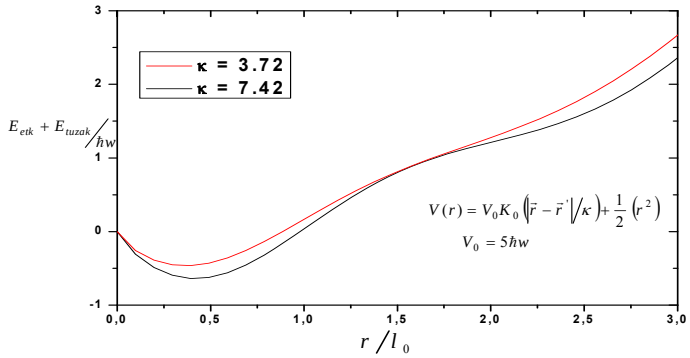


Şekil 4.2 Bessel ve logaritmik potansiyelin etkileşme enerjisine etkisinin karşılaştırılması

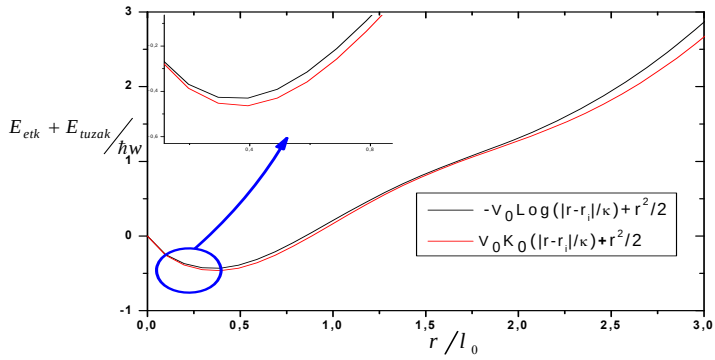
a)



b)



c)



Şekil 4.3 Toplam potansiyelinin enerjinin logaritmik ve Bessel fonksiyonu için konuma bağlı değişimi ve karşılaştırılması

4.2 Hartree, Hartree-Fock ve Varyasyon Yöntemi ile SisteminToplam Enerjisinin Bulunması

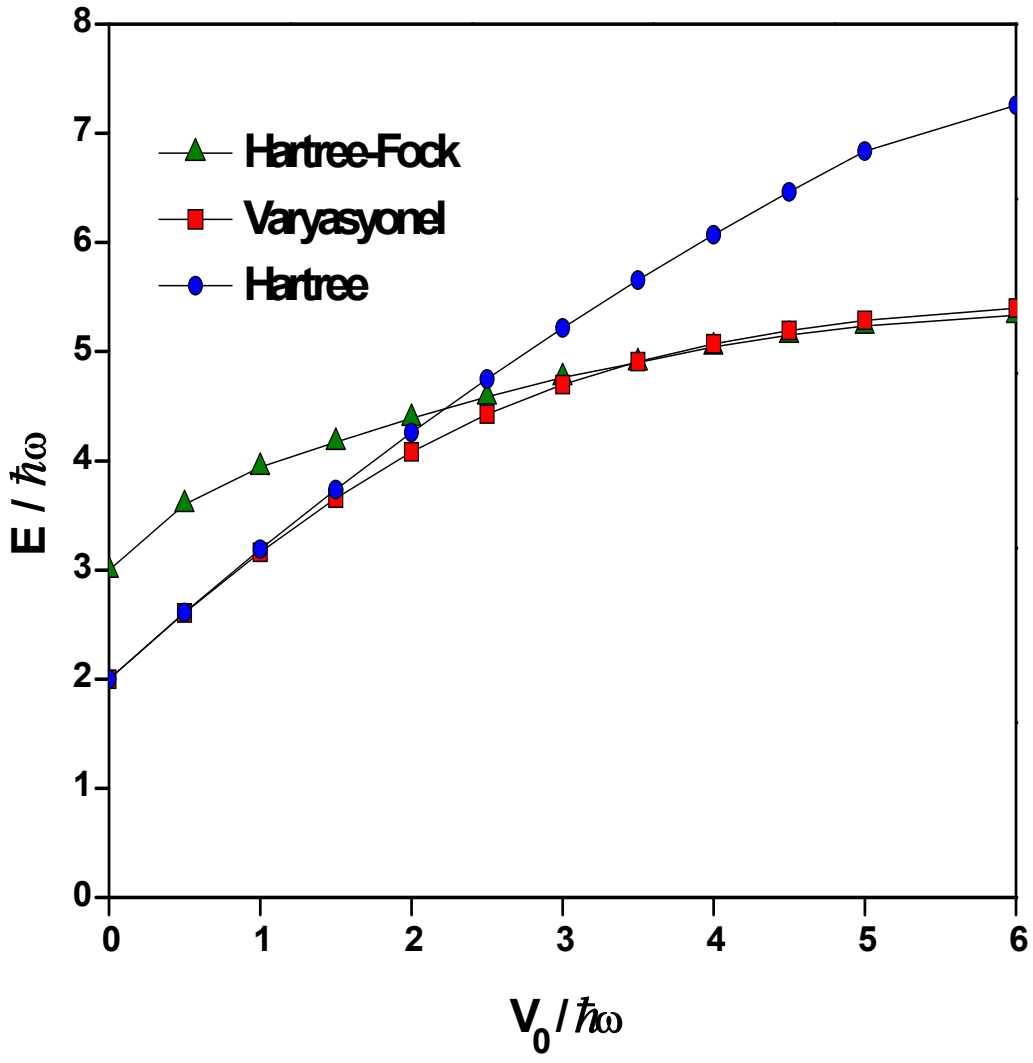
Çok parçacıklı bozon sisteminin toplam enerjisinin hesaplanmasında Hamilton denkleminin yaratma ve yok etme operatörleri cinsinden ifadesi (3.4) denkleminde ve ilgili matris elemanları (3.13 ve 3.14) denkleminde tanımlanmıştır. Hartree yaklaşıklığı için sistemin dalga fonksiyonu tek parçacık dalga fonksiyonlarının çarpımı olarak Denklem (2.20) de verildiği gibi kullanılmıştır. Hartree-Fock yaklaşıklığında ise bozonlar için simetri özelliğini göz önünde bulunduran Denklem (3.31) dalga fonksiyonu ele alınmıştır. Varyasyonel yaklaşımda ise sistemin dalga fonksiyonunu tanımlarken tek parçacık dalga fonksiyonlarının Gaussian formda olduğu varsayılmıştır. Gaussian dalga fonksiyonunun kullanılmasının sebebi ise bozonlar karşılıklı iticiliklerini minimize etmek için uygun olmasıdır (Romanovsky, 2004).

Şekil 4. 4 de iki parçacığın toplam enerjisi çiftlenim sabitine bağlı değişimi için üç farklı yöntemle bulunan sonuçlar karşılaştırılmıştır. Düşük çiftlenim sabiti değeri için $(V_0 < 2\hbar w)$ Hartree yaklaşıklığı ve varyasyon ile bulunan enerjilerin Hartree-Fock'dan dala küçük olduğu görülmektedir. Küçük çiftlenim sabiti değerleri için Hartree-Fock enerjisinin büyük olmasının sebebi hesaplamalarda kullanılan dalga fonksiyonu her ne kadar bozonları tanımlamasından dolayı simetrik olsa da sistemin Pauli dışarlama ilkesine uygun olarak yapılandırılmasından kaynaklanmaktadır. Başka bir deyişle tek parçacık dalga fonksiyonları ortogonal seçildiğinden Bose-Einstein Yoğuşması küçük V_0'lar için gözlenmemektedir. Ancak, büyük çiftlenim sabiti değerlerinde parçacıklar

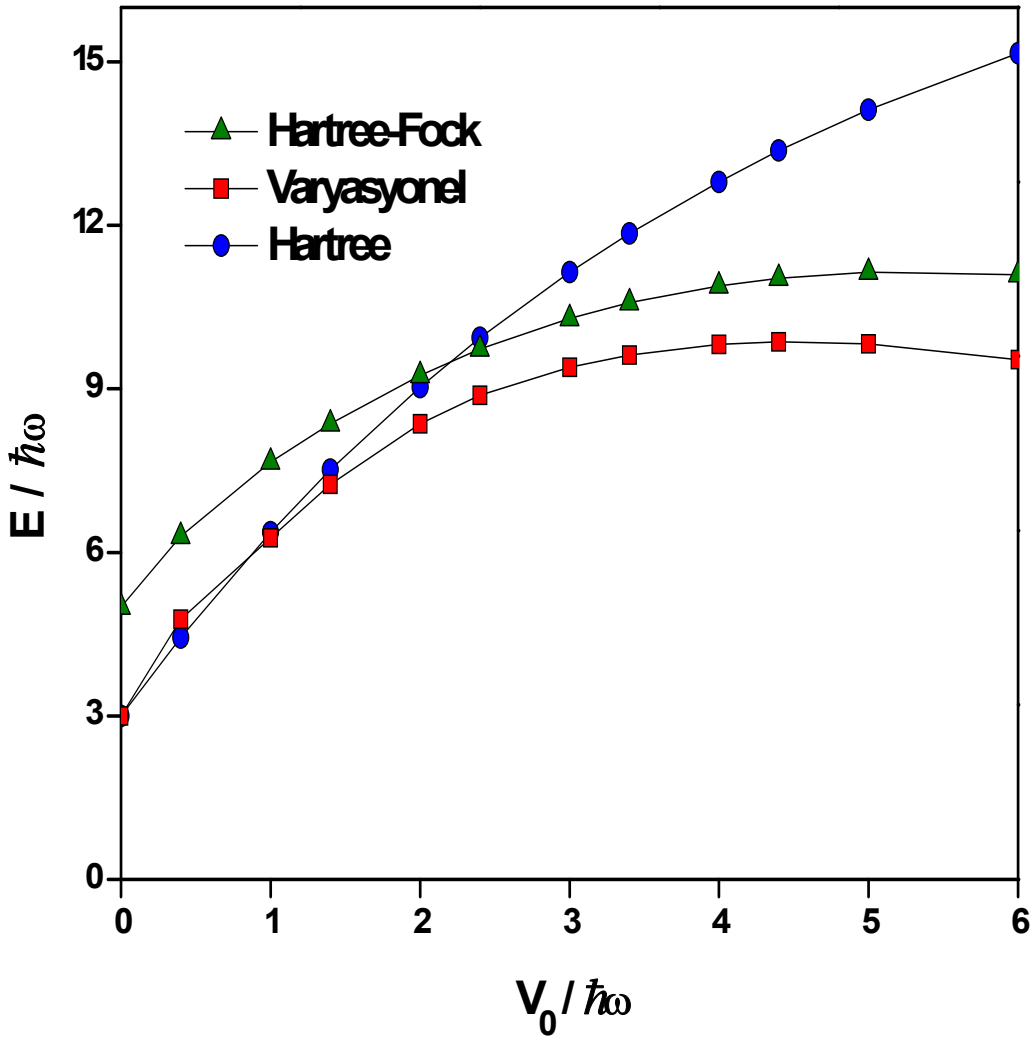
arası etkileşme artmakta, aynı kuantum seviyesinde bulunma ihtimali azaldığından Hartree-Fock yaklaşıklığı ile Varyasyon yaklaşıklığı sonuçları örtüşmektedir. Bu esnada büyük çiftlenim sabiti değerleri için Hartree yaklaşımı Pauli dışarılama etkisini göz önüne almadığından ve bozonlar arası itme büyük olduğundan daha büyük enerjilerde minimize olabilmektedir. Benzer sonuçlar Şekil 4.5 de 3 parçacık için, Şekil 4.6 de 4 parçacık için, Şekil 4.7 de 5 parçacık için ve Şekil 4.8 de 6 parçacık için gösterilmiştir.

Altı parçacık için bulunan sonuçlar literatürdeki bazı çalışmalarla uyum göstermesine rağmen bazılarıyla farklılık göstermektedir. Ele aldığımız sisteme benzer bir yapıyı tek parçacık dalga fonksiyonunu Gaussian formda ele alarak çözen bir çalışma yapılmıştır. Bu çalışmada altı parçacıklı bir bozonik sistemin yüzey merkezli bir beşgen örgü şeklinde kristalize olduğu tespit edilmiştir (Romanovsky vd., 2004). İlk olarak 6 parçacık için görülen bu dağılım literatürde $(1,N_0\text{-}1)$ dağılımı olarak tanımlanmakta olup burada N_0 parçacık sayısını göstermektedir. Bu tez çalışmasında varyasyon yaklaşıklığı kullanılarak bulunan sonuçlar gösteriyor ki; 6 parçacık için dağılımın $(1,N_0\text{-}1)$ şeklinde değil de $(0,N_0)$ altıgensel (hegzogonal) bir dağılım gösterdiği görülmüştür. Bu farklılığın nedeni, aynı yöntemle yapılan çalışmada etkileşme potansiyeli olarak coulomb ve temas potansiyellerinin kullanılmasıdır. Coulomb potansiyeli üç boyutlu etkileri ifade etmek için, temas potansiyeli ise kısa erimli etkileri tanımlamak için geçerlidir. Bu nedenle iki boyutta etkileşen sistemlerde log(r) potansiyel kullanmak hem BEY hem de kristalizasyonun gözlemlenmesi için daha doğrudur. Şekil 4.9 da görüldüğü gibi, Log(r) potansiyel kullanıldığında (0,6) dağılımının enerjisinin (1,5) dağılımı enerjisine göre daha düşük olmasından dolayı altı parçacık için sistemin gerçek kristal yapısı (0,6) şeklinde olacaktır. Bu durum yedi parçacık için değişmektedir. Şekil 4.10 de gösterildiği gibi büyük çiftlenim sabiti

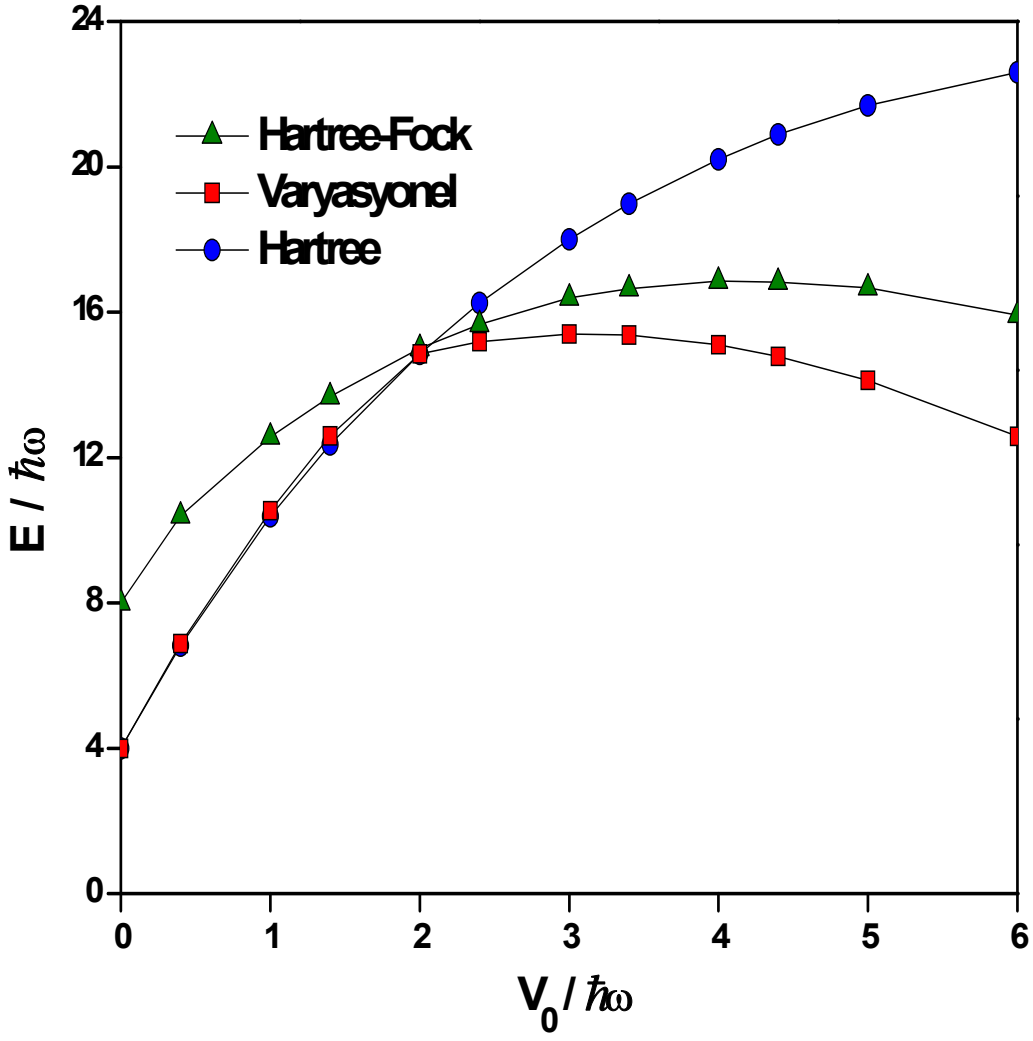
değerlerinde (1,6) dağılımının enerjisi (0,7) dağılımı enerjisinden daha küçüktür. Bundan dolayı sistem düşük enerjili durumda bulunacağından 7 parçacık için (1,6) kristalizasyonu tercih etmektedir (Mese vd., 2008).



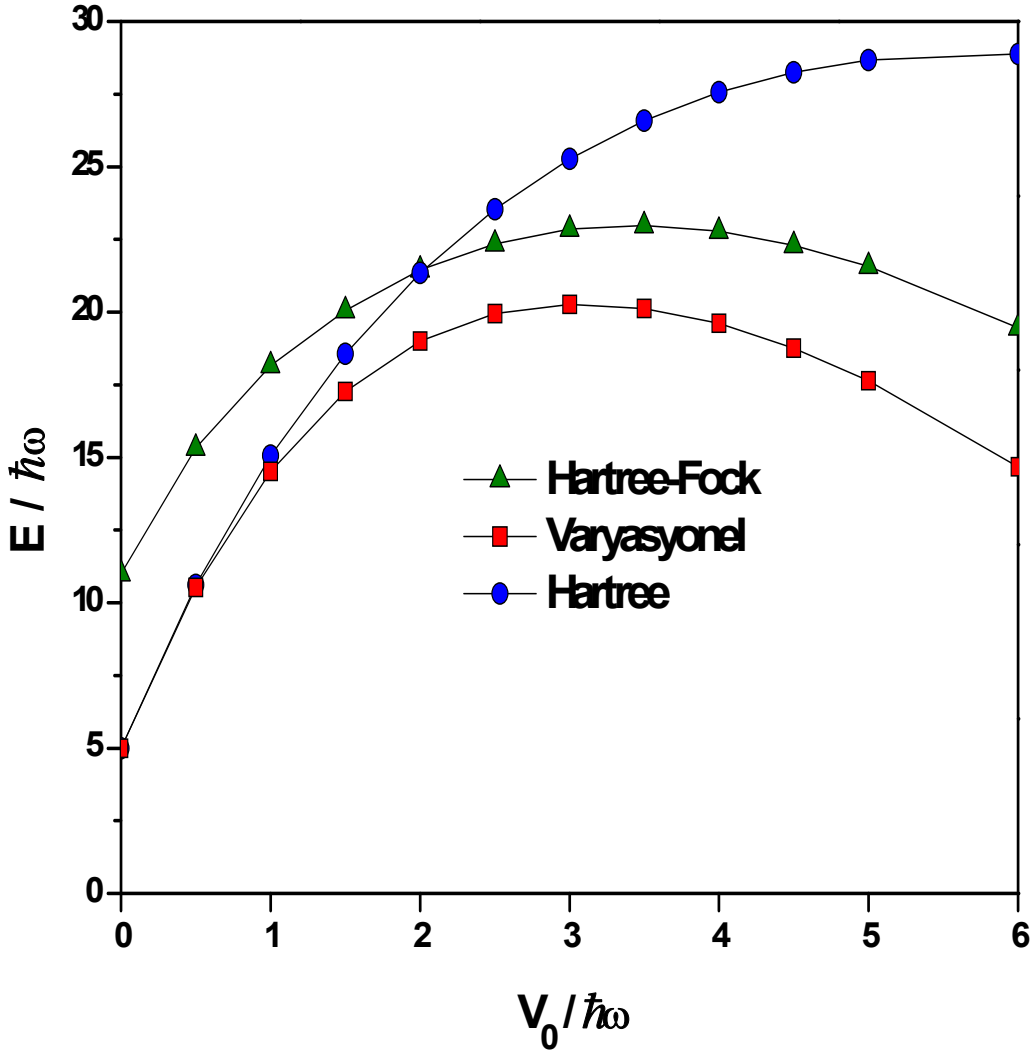
Şekil 4.4 İki parçacığın toplam enerjisinin çiftlenim sabitine göre değişiminin üç farklı yaklaşıklık ile incelenmesi



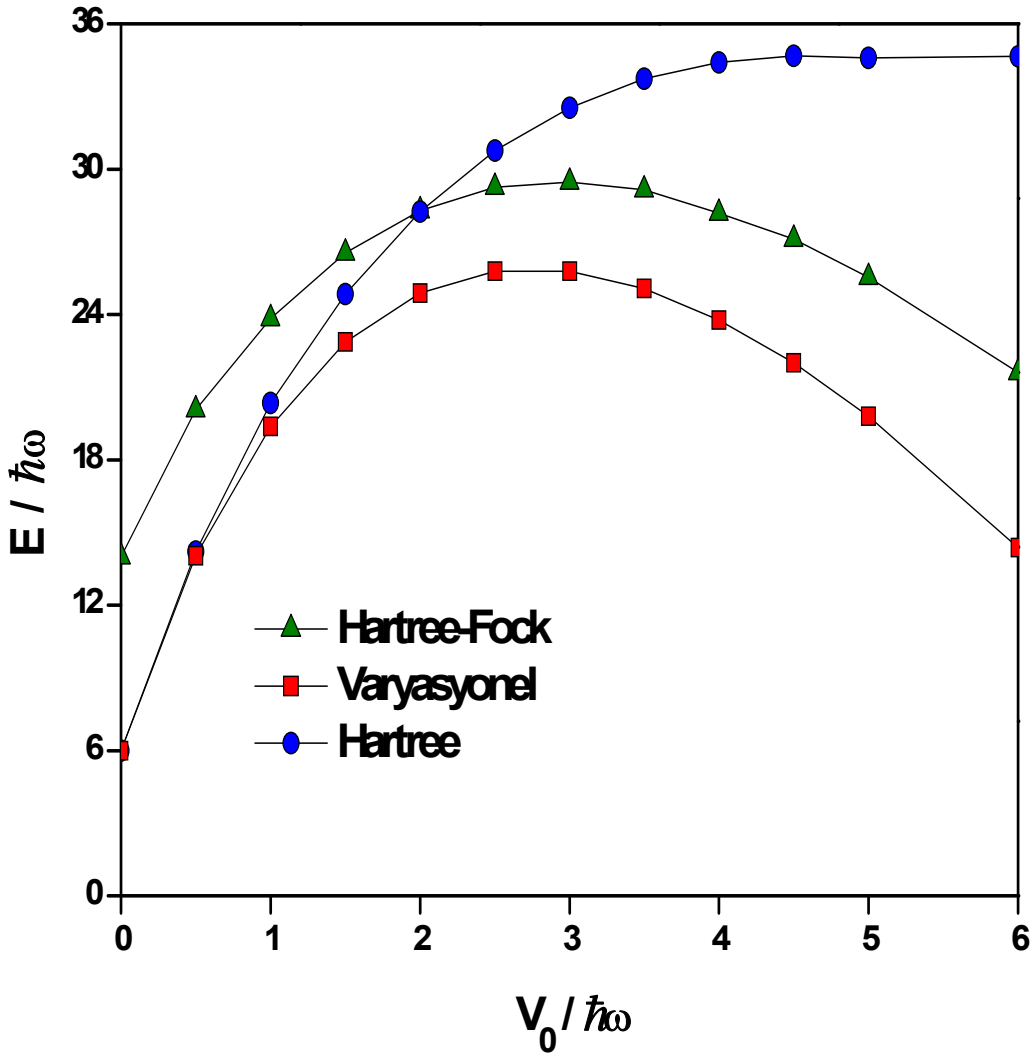
Şekil 4.5 Üç parçacığın toplam enerjisinin çiftlenim sabitine göre değişiminin üç farklı yaklaşıklık ile incelenmesi



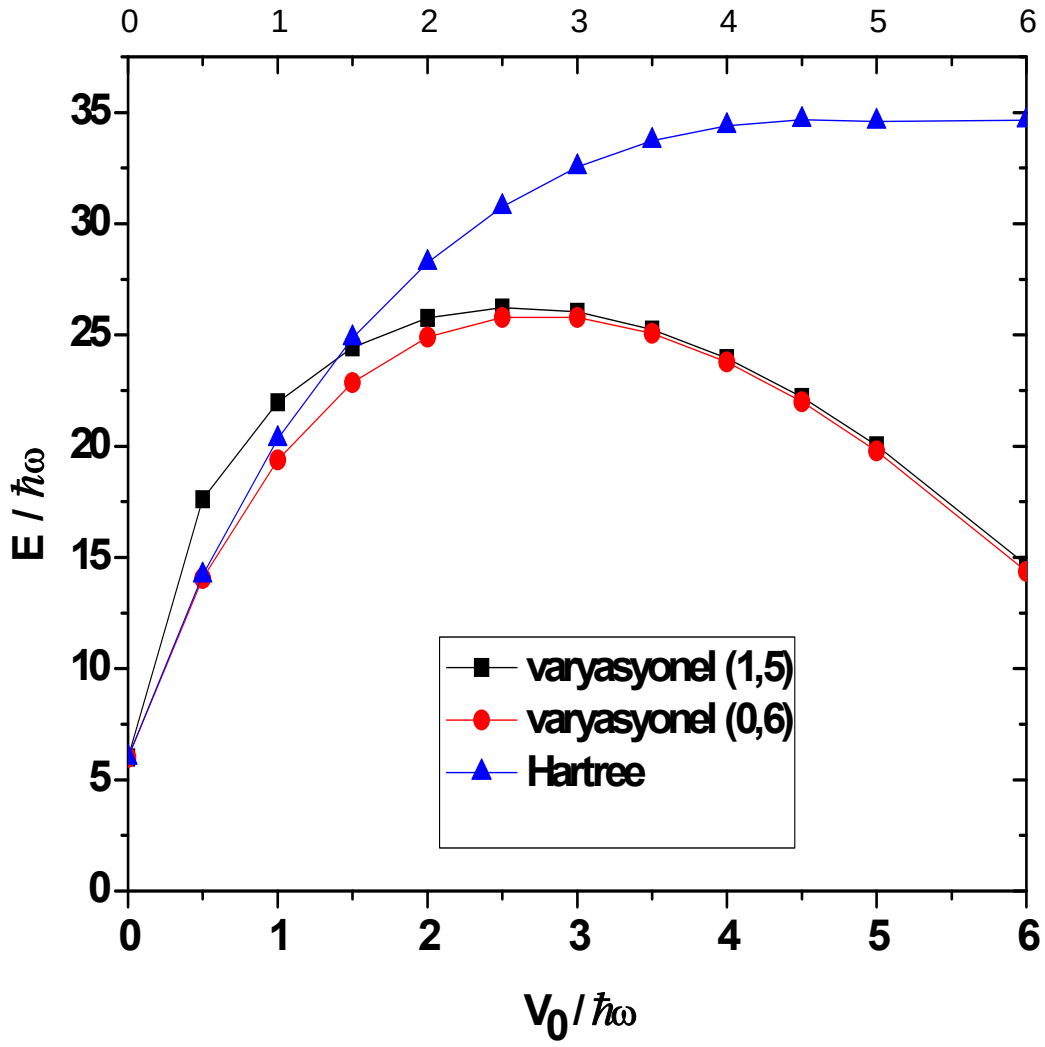
Şekil 4.6 Dört parçacığın toplam enerjisinin çiftlenim sabitine göre değişiminin üç farklı yaklaşıklık ile incelenmesi



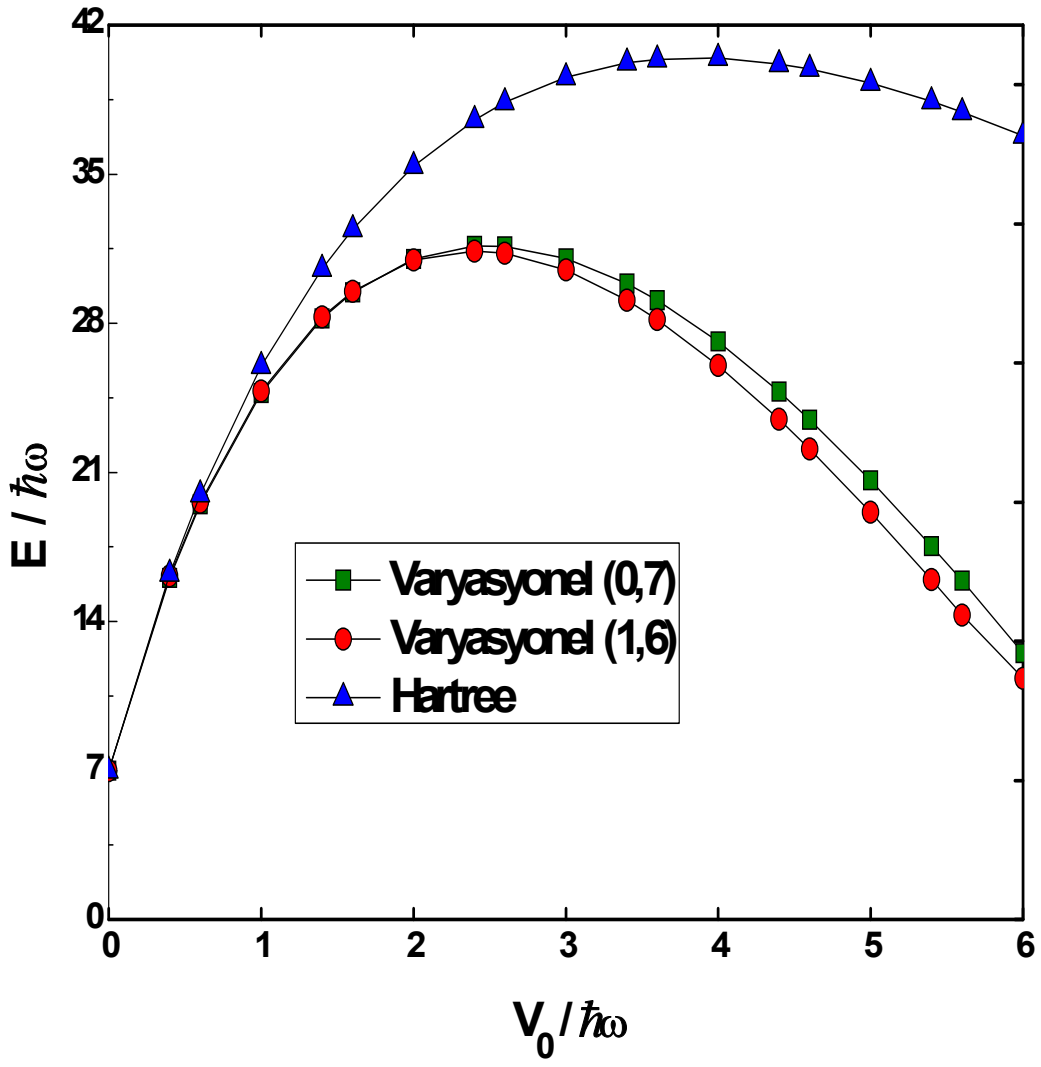
Şekil 4.7 Beş parçacığın toplam enerjisinin çiftlenim sabitine göre değişiminin üç farklı yaklaşıklık ile incelenmesi



Şekil 4.8 Altı parçacığın toplam enerjisinin çiftlenim sabitine göre değişiminin üç farklı yaklaşıklık ile incelenmesi



Şekil 4.9 Altı parçacık için taban durum enerjisinin araştırılması



Şekil 4.10 Yedi parçacık için taban durum enerjisinin araştırılması

4.3 Yoğunluk Dağılımın İncelenmesi ve Tek Parçacık Matrisleri

Bu bölümde, Hartree-Fock ve varyasyon yaklaşıklığı ile tanımlanan dalga fonksiyonları kullanılarak tanımlanan yoğunluk dağılımlarına kullanılan dalga fonksiyonu yaklaşıklığının önemi incelenmiştir.

Çok parçacık sistemini tanımlamada ikinci kuantumlanma formalizmi sıkça kullanılan bir yöntemdir. Bu yaklaşımda sistem alan operatörleri $\psi^+(r)\ ve\ \psi(r)$ kullanılarak tanımlanmıştır. Bu alan operatörleri kullanılarak sistemin özellikleri hakkında birçok bilgi elde edilebilir. Böyle bir sistemin hamiltonyeni,

$$\hat{H} = \int d\vec{r}\,\hat{\psi}^+(\vec{r})\hat{H}_0\hat{\psi}(\vec{r}) + \frac{1}{2}\int d\vec{r}\,d\vec{r}\,'\hat{\psi}^+(\vec{r})\hat{\psi}^+(\vec{r}\,')V(\left|\vec{r}-\vec{r}\,'\right|)\hat{\psi}(\vec{r})\hat{\psi}(\vec{r}\,') \qquad (4.5)$$

burada $\hat{H}_0$ tek parçacık hamiltonyeni, $\hat{\psi}$ alan operatörü, $V(\left|\vec{r}-\vec{r}\,'\right|)$ parçacıklar arası etkileşme potansiyelidir. Alan operatörünü hangi parçacığın dalga fonksiyonu olduğunu bilmediğimiz $\phi_i(\vec{r})$ cinsinden yaratıcı ve yok edici fonksiyonlar yardımıyla

$$\hat{\psi}(\vec{r}) = \sum_i d_i^+\phi_i(\vec{r}) \qquad (4.6)$$

gibi tanımlanır. Tek parçacık yoğunluk matrisi genellikle $\rho(r,r')$ şeklinde gösterilir. Tek parçacık yoğunluk matrisi alan operatörleri cinsinden,

$$\rho(r,r') = \left\langle \hat{\psi}^{+}(r')\hat{\psi}(r) \right\rangle \tag{4.7}$$

olarak tanımlanır. Yoğunluk matrisini yaratıcı ve yok edici fonksiyonları ile ifadesi

$$\rho(r,r') = \left\langle \sum_i d_i^{+}\phi_i(\vec{r}')\sum_j d_j\phi_j(\vec{r}) \right\rangle = \sum_{ij}\phi_i^{+}(\vec{r})\phi_j(\vec{r})\left\langle d_i^{+}d_j \right\rangle \tag{4.8}$$

gibidir. Burada $\left\langle d_i^{+}d_j \right\rangle = n_i\delta_{ij}$ olarak tanımlanırsa yoğunluk matrisi

$$\rho(r,r') = \sum_{ij} n_i\phi_i^{+}(\vec{r})\phi_i(\vec{r}) \tag{4.9}$$

şekline dönüşür. Bu koşulu sağlayan tek parçacık dalga fonksiyonları doğal yörüngeler olarak adlandırılır ve n_i bu yörüngelere yerleşen parçacık sayısını vermektedir. Sistemi tanımlayan enerjisinin beklenen değeri yaratma ve yok etme operatörlerine bağlı olarak bölüm 3 de denklem (3.12) ile verilmiştir.

Çok parçacık dalga fonksiyonunu yaratma ve yok etme operatörlerine bağlı olmadan,

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_0!}} Perm\left[\phi_1(r_1)\ldots\phi_{N_0}(r_{N_0})\right] = \frac{1}{\sqrt{N_0!}}\sum_{p=1}^{N_0!}\phi_{p(1)}(r_1)\phi_{p(2)}(r_2)\ldots\phi_{p(N_0)}(r_{N_0}) \tag{4.10}$$

gibi tanımlanır. Buradaki toplam bütün p nin 1 den N_0 kadar permütasyonlarıdır.

Sistemin toplam enerjisi,

$$E = \frac{\langle \psi(r) H \psi(r) \rangle}{\langle \psi(r) \| \psi(r) \rangle} =$$

$$\frac{1}{N_0!} \sum_{p1,p2=1}^{N_0!} \left[\binom{N_0}{1} H_{0,p1(1),p2(2)} \prod_{i=2}^{N_0} S_{p1(i)p2(i)} + \binom{N_0}{2} V_{p1(1)p1(2)p2(1)p2(2)} \prod_{i=3}^{N_0} S_{p1(i)p2(i)} \right] * \left[\sum_{p1=1}^{N_0!} \prod_{i=1}^{N_0} S_{p1(i)i} \right]^{-1} \quad (4.11)$$

ve buradaki matris elemanları,

$$H_{0,ii} = \int d\vec{r} \phi_i^*(\vec{r}) \hat{H}_0 \phi_i(\vec{r}) \quad (4.12)$$

$$V_{ijkl} = \int d\vec{r} d\vec{r}' \phi_i^*(\vec{r}) \phi_j^*(\vec{r}') V(|r - r'|) \phi_k(\vec{r}') \phi_l(\vec{r}) \quad (4.13)$$

şeklinde tanımlanır (Mese vd., 2008). Bu denklemlerde kullanılan örtüşme matrisi denklem (3.32) de tanımlandığı gibi $S_{ij} = \int \phi_i^*(r) \phi_j(r) dr$ ile ifade edilir. Bu ifade yardımıyla yoğunluk dağılımı hesaplanır. Bu çalışmada N_0 parçacıktan oluşan sistemin dalga fonksiyonunu belirlerken iki farklı tek parçacık dalga fonksiyonu tanımlanmış ve bunların sonucunda iki farklı fiziksel sonuç elde edilmiştir.

4.3.1. Wigner Kristali(Molekülü)

İlk olarak 1934 yılında Eugene Wigner tarafından önerilen elektronların katı(kristal) fazına Wigner kristali denmektedir (Wigner, 1934). Eğer elektron yoğunluğu çok düşük ise iki yada üç boyutta aynı şekilde hareket eden elektronlar, hareketsiz, dış etkileri nötürleyerek kristalleşir ve kristal örgü formuna geçerler. Bu durum, düşük yoğunlukta potansiyel enerjinin kinetik enerjiye göre daha etkin olmasının sonucudur. Bu nedenle elektronların uzaysal dağılımı önem kazanmaktadır.

Mutlak sıfır sıcaklıkta aynı şekilde hareket eden elektronları tanımlayan bir parametre vardır buna da Wigner-Seitz yarıçapı denir ve $r_s = a/a_B$ olarak tanımlanır. Burada a parçacıklar arası uzaklık, a_B ise Bohr yarıçapıdır. Kuantum Monte Carlo simülasyonlarına göre üç boyutta r_s=106 (Ceperley, 1980), iki boyutta ise r_s=35 (Tanatar, 1989) dir.

Yüksek manyetik alanda yada düşük yoğunlukta kuantum noktalarda hapsedilen parçacıklar kendiliğinden bazı durumlarda yerelleşebilirler ve bu düzen Wigner kristali olarak da adlandırılır.

Wigner kristali oluşumunu teorik olarak tanımlamak istersek N_0 bozondan oluşan sistemin dalga fonksiyonunu belirlemek için tek parçacık dalga fonksiyonunun genişliğini σ ve konumlarını a_i ile tanımlamak üzere Gaussian formunda,

$$\phi_i(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\sigma} \exp\left[-(\vec{r} - \vec{a}_i)^2 / (2\sigma^2)\right] \tag{4.14}$$

ile tanımlanır. Hesaplamalarda her bir parçacığın dalga fonksiyonun genişliği aynı alınmıştır. Denklemde bulunan σ ve a_i parametreleri parçacık sayısı sabit tutulup toplam enerjinin minimizasyonundan bulunur. Çiftlenim parametresi $V_0 \cong 0$ limitinde bütün parçacıklar için konumu ifade eden a_i parametresi sıfır bulunur. Böylece bütün parçacıklar aynı kuantum durumunda bulunduğu ve tuzağın ortasında bir tane yoğunluk dağılımının temsil ettiği Bose-Einstein yoğuşması gözlenmektedir.

Hesaplamalarda parçacıklar arası çiftlenim sabitinin değeri arttırılırsa yoğunluk dağılımlarından parçacıkların tuzağın merkezi yerine kenarlarda lokalize olduğu görülmüştür. Çiftenim sabitinin değeri arttırıldığında parçacıkların hepsinin aynı seviyede bulunma olasılığı azalmaya başlamasından dolayı etkileşme enerjisi azalır.

Şekil 4.11 da çiftlenim sabitinin yoğunluk dağılımına etkisi incelenmiştir. a) sütununda çiftlenim sabiti $V_0 = 1\hbar w$ için, b) sütununda ise $V_0 = 3\hbar w$ değeri için parçacık sayısı N_0=2,3,4 ve 6 olduğunda yoğunluk dağılımları karşılaştırılmıştır. Çiftlenim sabiti $V_0 = 1\hbar w$ olduğunda, Bose-Eistein yoğuşmasını temsil eden enerji değeri Wigner kristali durumunu temsil eden enerji değerinden küçük olduğundan sistemin bu çiftlenim sabiti değeri civarında parçacıklar arası korelasyonun devam ettiği görülmektedir. Bu nedenle bu çiftlenim sabiti değerinde sistem Bose-Einstein yoğuşması özelliğini sürdürmektedir. Eğer Çiftlenim sabiti $V_0 = 3\,\hbar w$ olursa, sistemi minimum yapan enerji ve dalga fonksiyonları incelendiğinde taban durum yoğunluk dağılımları Şekil 4.10 b) de ki gibi olmaktadır. Dolayısıyla bu çiftlenim sabiti değerinde sistem kristal özelliği göstermektedir.

N_0 parçacıktan oluşan sistemin taban durum enerjisine karşılık sistemin dalga fonksiyonu kullanılarak yoğunluk dağılımları çiftlenim sabitinin $V_0 = 4\hbar w$ değerinde N_0=2,4 ve 6 parçacık için Şekil 4.12, Şekil 4.13 ve Şekil 4.14'in a şıklarında gösterilmiştir. 2,3,4 ve 5 parçacık sonuçlarının literatürdeki çalışmalarla ile uyum içinde olduğu görülmüştür. Yalnız 6 parçacık için Bölüm 4.2 bahsedildiği gibi aynı problemi başka etkileşme potansiyelleri için çözen çalışmalarından farklı sonuç bulunmuştur. Tablo 4.1 de gösterildiği gibi 6 parçacık için genelde (1,5) dağılımı yani 1 parçacık merkezde diğer 5 tanesi onun etrafında dizilmiş bir dağılım bulunmuştur (Saint Jean 2001, Campell 1979, Lai 1999, Bolton 1993, Bedanov 1994 ve Schweigert, 1998). Bu çalışmanın sonuçlarına göre varyasyonel yaklaşım altında logaritmik potansiyel kullanarak (0,6) yani altıgensel (hegzagonal) kirstalleşme elde edilmiştir.

N_0	Bizim sonuçlar (Varyasyon)	M. Saint Jean (deneysel)	Campbell *et al.* (MD)	Ying-Ju *et al.* (MD)	Bolton *et al.* (MC)	Bedanov *et al.* (MC)	Schweigert *et al.* (MD)	Ying-Ju *et al.* (MD)
V(r)	Log(r)	Ln(1/r)	ln(1/*r*)	ln(1/*r*)	1/r	1/r	1/r	1/r
1	1	1	1	1	1	1	1	1
2	2	2	2	2	2	2	2	2
3	3	3	3	3	3	3	3	3
4	4	4	4	4	4	4	4	4
5	5	5	5	5	5	5	5	5
6	(0,6)	(1,5)	(1,5)	(1,5)	(1,5)	(1,5)	(1,5)	(1,5)
7	(1,6)	(1,6)	(1,6)	(1,6)	(1,6)	(1,6)	(1,6)	(1,6)
8	(1,7)	(1,7)	(1,7)	(1,7)	(1,7)	(1,7)	(1,7)	(1,7)
9	(1,8)	(1,8)	(1,8)	(1,8)	(2,7)	(2,7)	(2,7)	(2,7)

Tablo 4.1 Yoğunluk dağılımının parçacık sayına göre değişik etkileşme potansiyelleri için karşılaştırılması

4.3.2. Süper Molekül

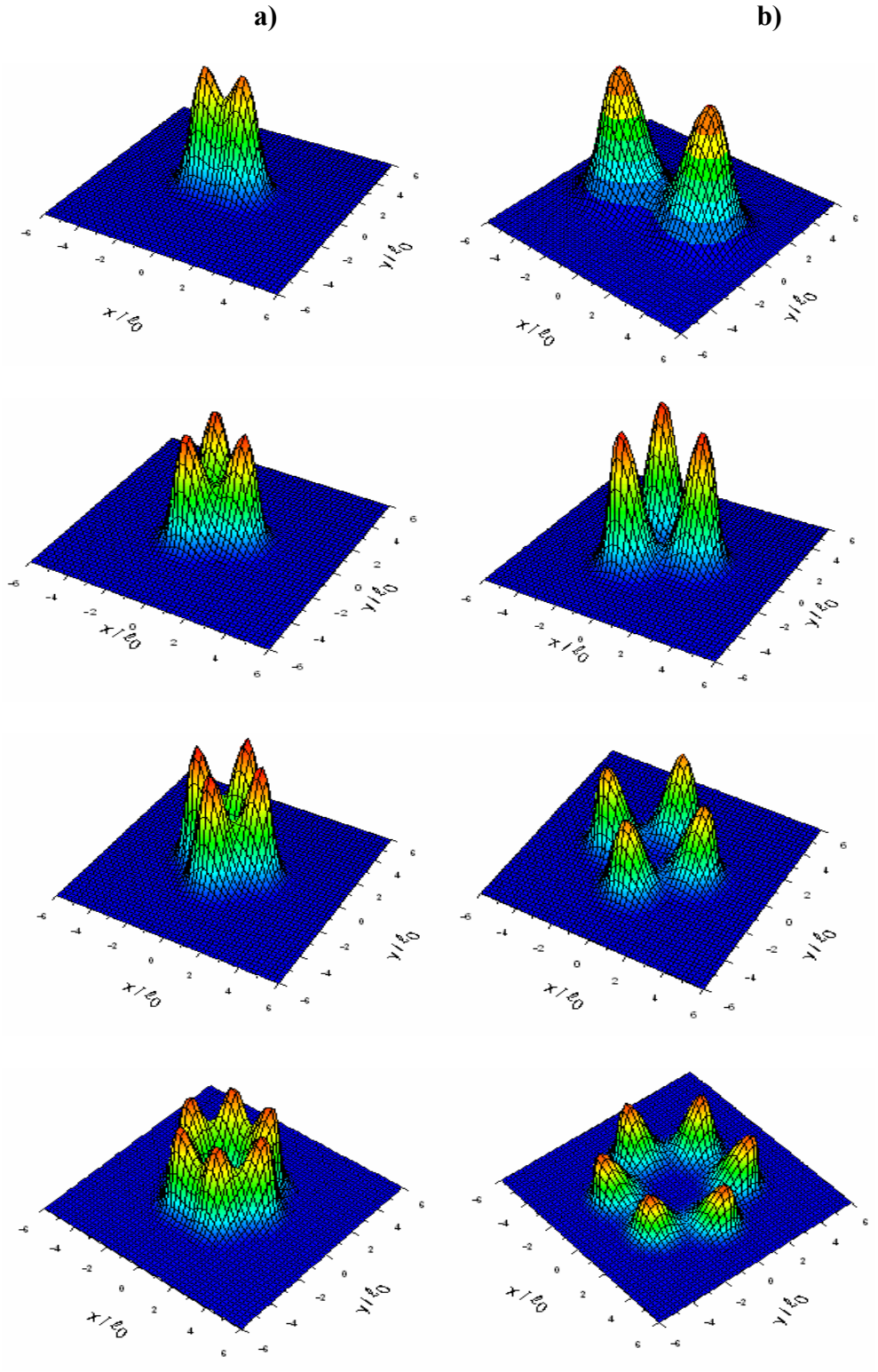
Eun-Seong Kim ve Moses Chan helyum-4 ü çok düşük sıcaklıklara kadar soğutarak maddenin yeni bir hali denilen süper katı yada süper molekülü buldular. Buldukları süper katı hem dirençsiz sıvı gibi süperakışkan hemde bir katı kristalin bütün özelliklerini barındırır (Kim, 2004).

Bu kısımda önce süper molekül özelliklerinin elde edildiği sistemi tanımlayalım. N_0 parçacıktan oluşan sistemin dalga fonksiyonu birbirine ortogonal olan tek parçacık dalga fonksiyonlarında oluşturulmuştur. Bu dalga fonksiyonunu kullanarak çözüm arayan yönteme literatürde Unrestricted Bose-Hartree-Fock(UBHF) yaklaşıklığı denmektedir (Romanovsky vd., 2004). Tek parçacık dalga fonksiyonu harmonik osilatör öz fonksiyon çözümlerini sağlayan $\{\varphi_i\}$ ifadesi kullanılarak şöyle tanımlanır:

$$\hat{\phi}_i(\vec{r}) = \sum_n C_{i,n}\varphi_n(\vec{r}) \tag{4.15}$$

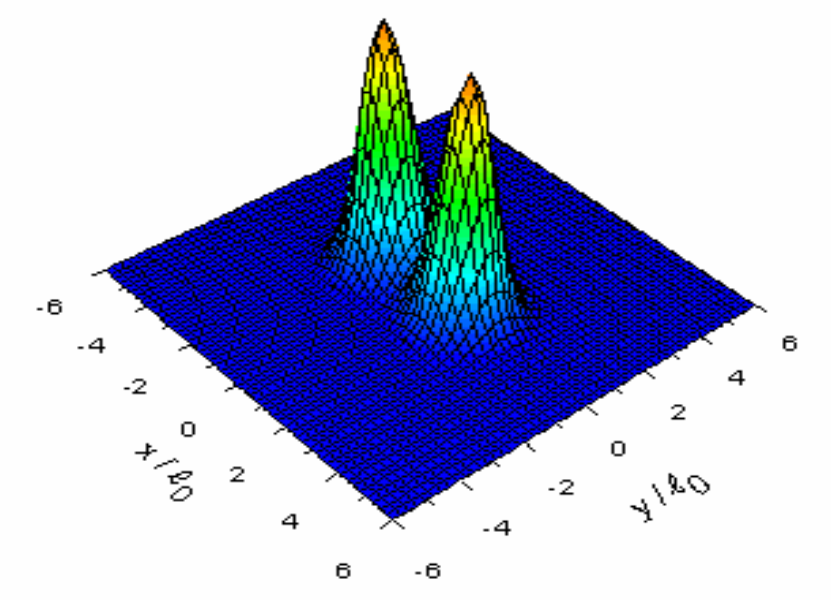
Burada $C_{i,n}$ varyasyon parametresi normalizasyon ve ortogonallik koşullarına bağlı olarak belirlenmektedir. $C_{i,n}$ bulunurken nümerik hesaplamaların uzunluğundan dolayı izinli enerji seviyesi sayısı N_{max}=14 olarak ele alınmış buna karşılık ((N_{max}+1) (N_{max}+2))/2 ifadesi izinli yörünge sayısını vermek üzere minimum enerjiyi bulmak için denklem (4.15)'in girilebilir 120 harmonik osilatör öz durumuna karşılık gelmektedir (Gattobigio vd., 2005). Eğer dalga fonksiyonu denklem(4.15) gibi tanımlanırsa

parçacıklar arası güçlü etkileşme altında dahi korelasyonların hala devam ettiği ve farklı yerlerde lokalize olmadıkları görülmektedir. Bu davranışa süper molekül adı verilmektedir (Mese vd., 2008). Altı parçacık için izinli enerji seviyesi her bir parçacık için bir yörüngeye karşılık gelen N_{max}=6 seçildiğinde dahi yoğunluk dağılımlarından süper molekül özelliğini sürdürdüğü görülmüştür. Şekil 4.12 de çiftlenim sabitinin $V_0 = 4\hbar w$ değeri için yoğunluk fonksiyonları incelendiğinde iki parçacık için varyasyon ve Hartree-fock yöntemleriyle elde edilen sonuçlarda Wigner kristali yapısındadır. Fakat N_0=2 parçacık dışında yoğunluk dağılımlarında önemli farklılıklar doğurduğu Şekil 4.13 ve şekil 4.14'ün a ve b şıklarından görülmektedir.

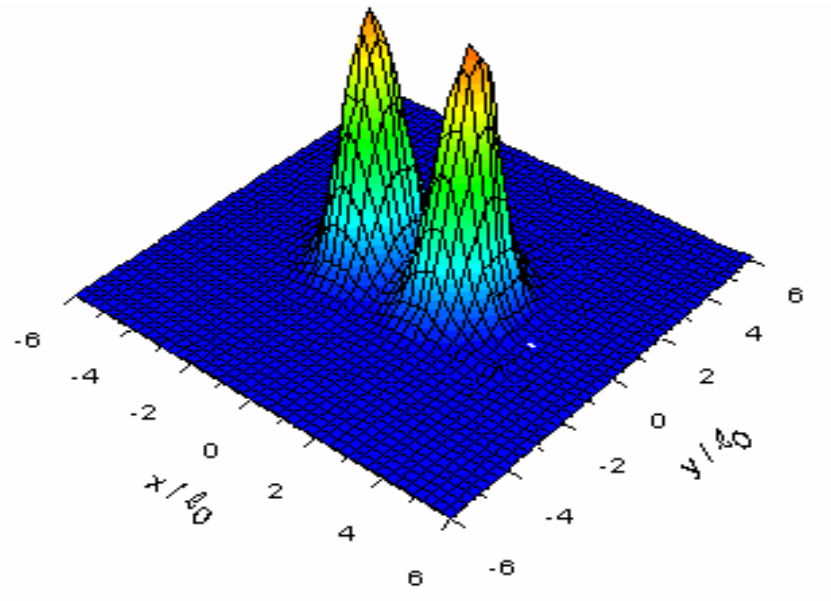


Sekil 4.11 Yoğunluk profilleri çiftlenim sabiti şiddetine göre değişimi, a) sütününda çiftlenim sabiti $V_0 = 1\hbar w$ alınarak yukarıdan aşağıya 2, 3, 4 ve 6 parçacık için, b) sütununda ise çiftlenim sabiti $V_0 = 3\hbar w$ alınarak parçacık sayısı 2, 3, 4 ve 6 için incelenmesi

a)

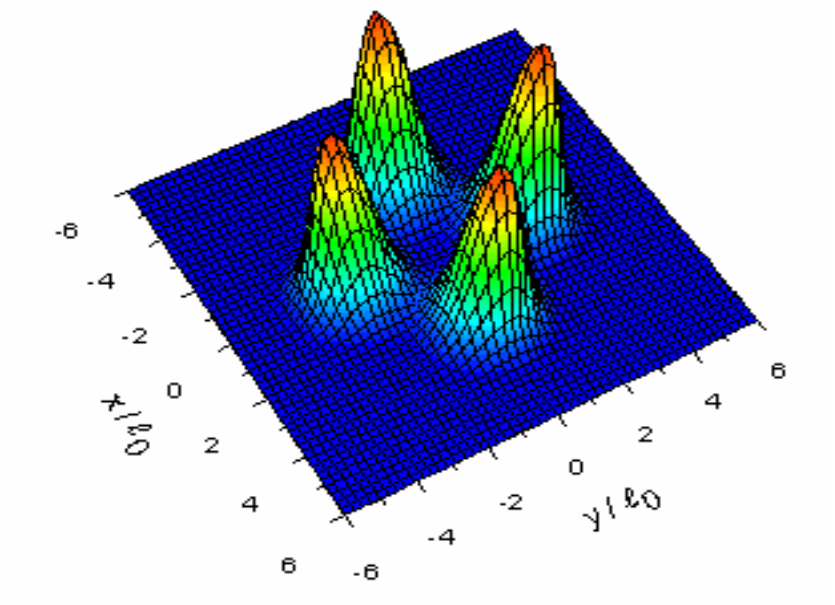


b)

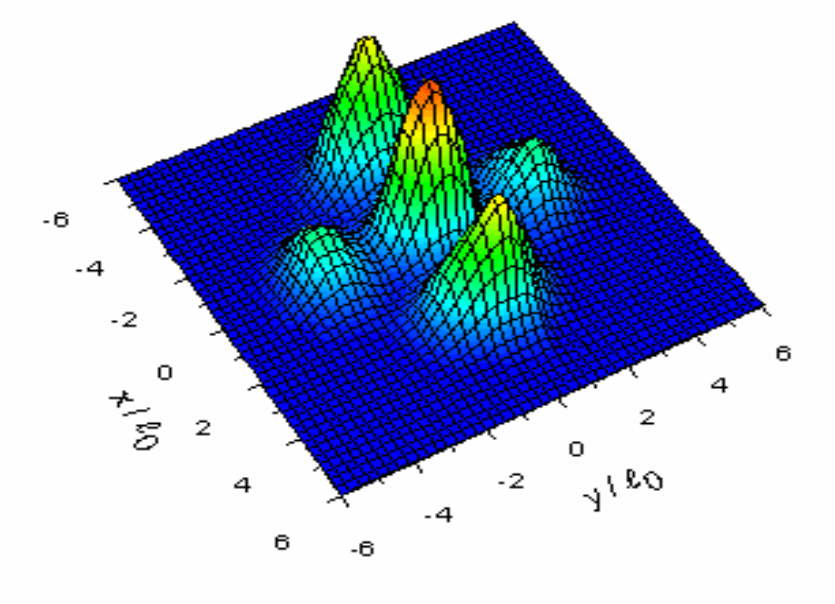


Şekil 4.12 Yoğunluk dağılımının $V_0 = 4\hbar w$ da (x,y) düzleminin fonksiyonu olarak(konumlar manyetik uzunluk biriminde $l_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{mw}}$) izotropik iki boyutlu tuzak içinde logaritmik potansiyelle etkileşen 2 parçacık için gösterilmiştir. a) da Gaussian yaklaşıklığı, b) de ise Unrestricted Bose-Hartree-Fock(UBHF) yaklaşıklığı ele alınarak elde edilen sonuçların gösterilmesi

a)

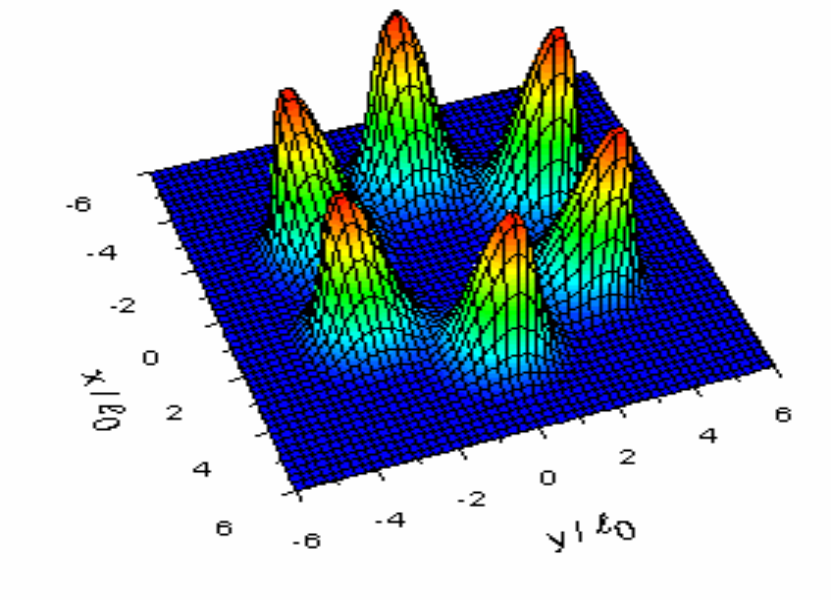


b)

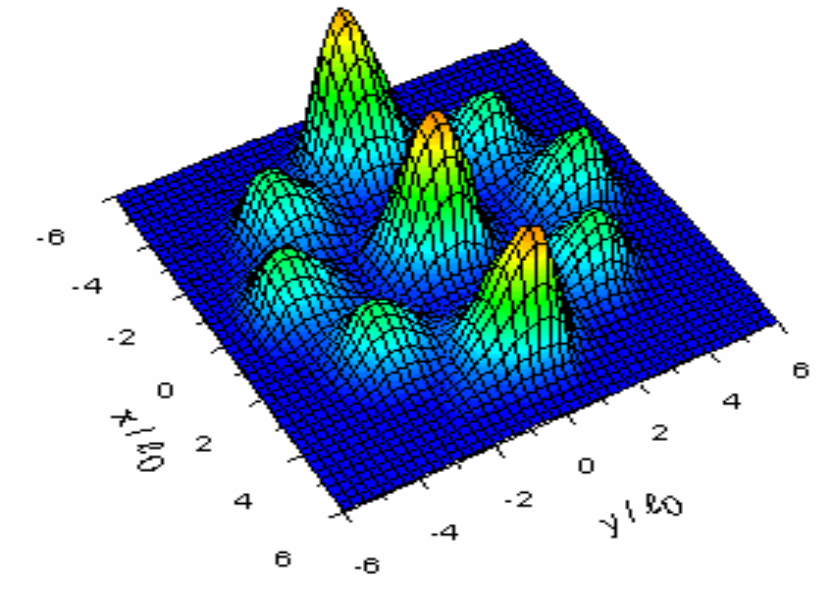


Şekil 4.13 Dört parçacık için yoğunluk dağılımının a) Gaussian yaklaşıklığı b) Hartree-Fock yaklaşıklığı için karşılaştırılması

a)



b)



Şekil 4.14 Altı parçacık için yoğunluk dağılımının a) Gaussian yaklaşıklığı b) Hartree-Fock yaklaşıklığı için karşılaştırılması

BÖLÜM 5: ANİZOTROPİK TUZAK VE VARYASYONEL SONUÇLAR

Bir önceki bölümde izotropik olarak tuzaklanmış N parçacıklı bir sistemi Hartree-Fock ve varyasyon çözüm yöntemleri kullanılarak araştırıldı. Bu bölümde ise anizotropik harmonik tuzağın yoğunluk dağılımına ve eylemsizlik momentine etkisi varyasyonel yaklaşım kullanılarak incelenmiştir. Denklem (4.2) de $w_1 = \sqrt{\alpha} w_2$ yazılırsa anizotropik tuzaklama elde edilir.

Parçacıklar arası etkileşme potansiyeli denklem (4.4) de tanımlanan Bessel fonksiyonu ifadesi olmak üzere anizotropik tuzak altında çok parçacık sistemi

$$\begin{aligned} H &= \sum_{i=1}^{N_0} \left(\frac{P_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m w^2 (\alpha x^2 + y^2) \right) + \sum_{i \neq j} V_{\text{int}} (r_i - r_j) \\ &= \sum_{i=1}^{N_0} H_0(i) + \sum_{i \neq j} V_{\text{int}} (r_i - r_j) \end{aligned} \tag{5.1}$$

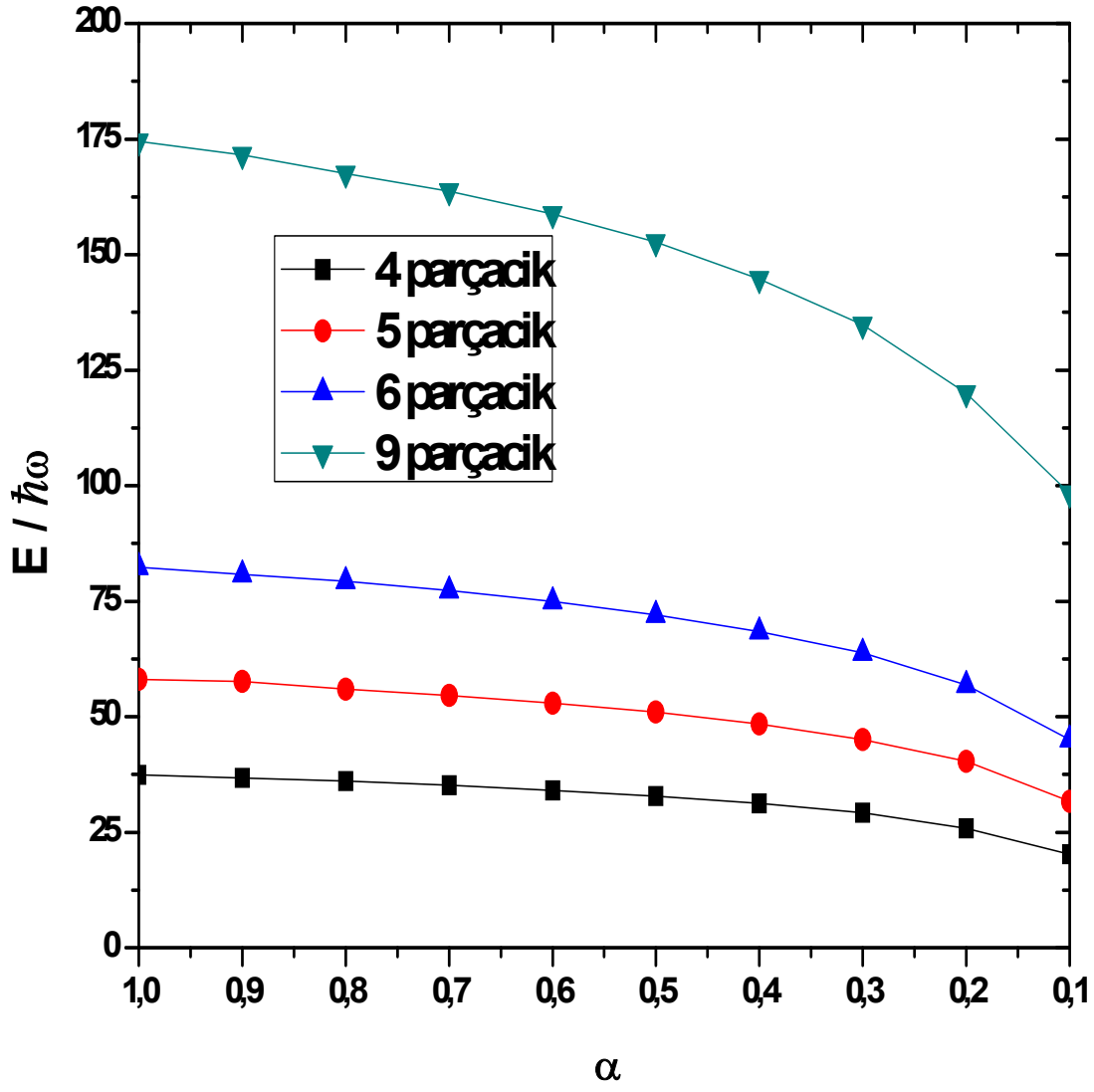
hamilton fonksiyonuyla tanımlanır. Burada α anizotropi parametresi, H_0 bütün tek parçacık etkilerini yani kinetik enerjiyi ve harmonik tuzak potansiyel enerjiyi içermektedir.

Anizotropik tuzak altında sistemin taban durum enerjisini bulmak için tek parçacık dalga fonksiyonunu Denklem (4.14) tanımlanan Gaussian fonksiyonu olarak alıp N_0 parçacık dalga fonksiyonu bozonlar için denklem (3.31) da gösterildiği gibi

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_0!}} \sum_{p=1}^{N_0!} \phi_{p(1)}(r_1) \phi_{p(2)}(r_2) \ldots \phi_{p(N_0)}(r_{N_0}) \tag{5.2}$$

tanımlanmıştır. Anizotropik tuzak parametresi α değeri 1 den 0.1 doğru azaltıldığında yoğunluk dağılımına etkisi incelenmiştir. Anizotropik parametrenin azalması ile enerjinin de azalmaya başladığı çiftlenim sabiti $V_0 = 4\hbar w$ değeri için şekil 5.1 de gösterilmiştir. Özellikle anizotropi parametresi $\alpha = 0.5$ değerinden daha küçük

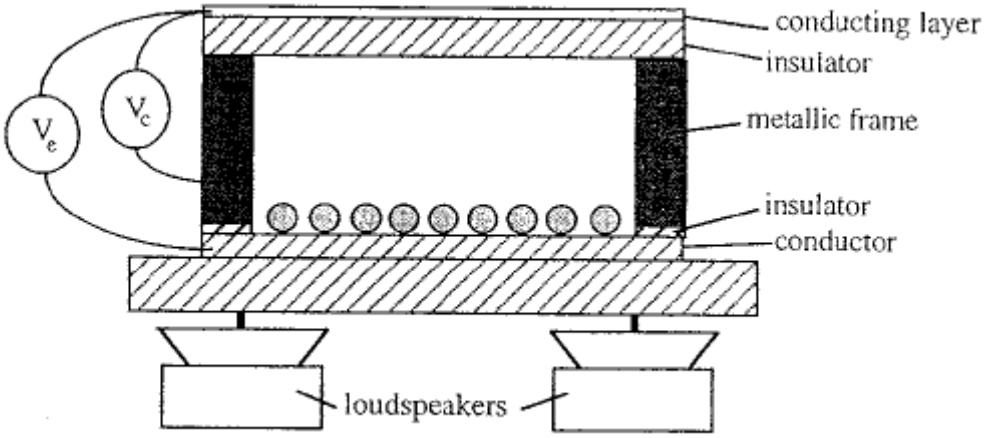
olduğunda tuzak potansiyelinin x doğrultusundaki etkisi azaldığından sistemin enerji değişimindeki etkisi belirgin olarak görülmektedir. Parçacıkları bir arada tutan tuzaklama potansiyeli anizotropi parametresinin küçültülmesi ile bir yöndeki etkisi azalmaya başlayacağından yoğunluk dağılımlarından da görüleceği gibi disk şeklinden (iki boyut) şerit (tek boyut) şekline dönüşmektedir.



Şekil 5.1 Toplam enerjinin anizotropi parametresine bağlı değişimi çiftelim sabiti $V_0 = 4\hbar w$ değerinde parçacık sayısı N_0=4,5,6 ve 9 için değişimi

5.1 Deneysel Düzenek ve Çalışma Prensibi

Bu konuyla ilgili literatürdeki deneysel çalışmaların birinde kullanılan düzenek,



Şekil 5.2 Deneysel Düzenek (J. Phys.: Condens. Matter **14** (2002) 13653–13660)

şeklinde hazırlanmıştır. Bu çalışmada atomik boyuttaki parçacıklar yerine yarıçapı d=0.8mm olan çelik toplar kullanılmıştır. Çelik topları yükleyebilmek için V_e ile gösterilen voltmetreye yaklaşık 1000V uygulanmıştır. Deney boyunca bu potansiyel değeri sabit olarak uygulanmaktadır. 500V değerinden sonra toplar yüklenmeye, aynı yüklü oldukları için aralarındaki itmeden dolayı birbirlerinden uzaklaşmaya başladığı görülmüştür. İkinci potansiyel V_c ise metalik çerçeveye uygulanmakta ve yaklaşık olarak 1000V ile 2000V aralığında uygulanmıştır. Burada metalik çerçeve eliptik bir yapıdadır. Bu metalik çerçeve hesaplamarımızdaki harmonik tuzak görevi görmektedir. Bu metalik çerçeve çelik toplarla aynı yüke sahip olduğu için kenarlardan ortaya doğru itmektedir. Böyle bir yapıdaki N_0 tane çelik toptan oluşan sistemin minimum enerjisini bulmak için, deney düzeneği bir masa üzerine sabitleniyor daha sonra topları titreştirmek için üç tane hoparlör tarafından yüksek frekansta gürültü oluşturulur. Bu işlem statik olarak yüklü çelik topların statik dengeye gelmesini sağlamak için yapılmaktadır. Sistemin gerçekten taban durumda olup olmadığını anlamak için tavlama

işlemi yapılmıştır. Sistem önce ergime sıcaklığına kadar ısıtılıp sonra yavaş yavaş düşük sıcaklıklara kadar soğutulur. Bunu yapmaktaki amaç; çelik topların üzerinde bulunan elektronların dağılımının en kararlı duruma gelmesini sağlamaktır. En yüksek sıcaklık her defasında %10 azaltılarak bu tavlama işlemi birkaç kez tekrarlanır. Bu tavlama işlemlerinden sonra sistemin sabit genlikli bir gürültü ile birkaç dakikadan birkaç saate kadar salınımına izin verilir. Gözlemler sonunda en sık görülen durum taban durum olarak kabul edilir. Böylece atomik boyuttaki etkiler milimetre boyutundaki sistemde tanımlanabilmektedir.

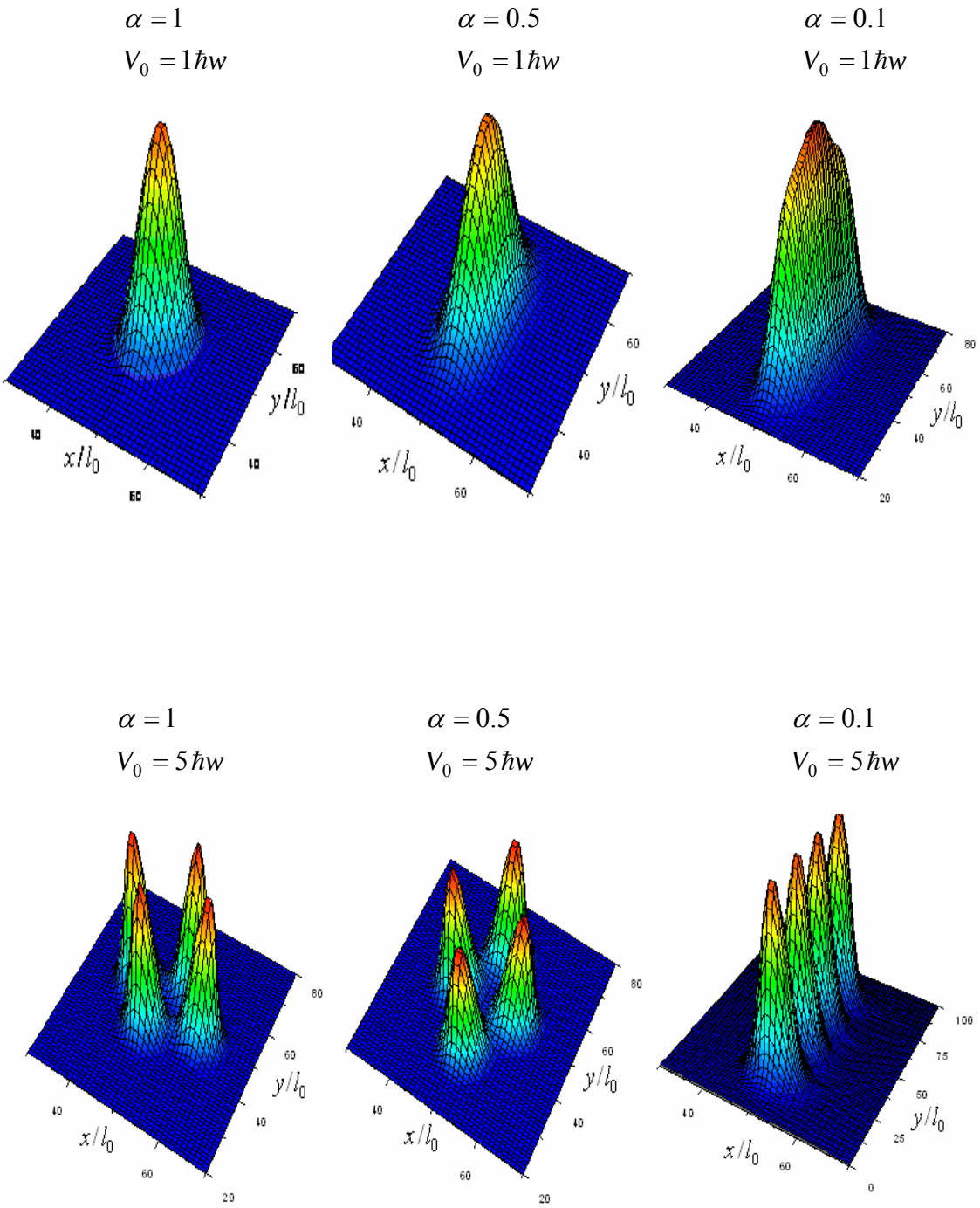
5.2 Yoğunluk Dağılımının İncelenmesi

Bölüm 4.3.1 de Wigner kristali incelenirken tek parçacık dalga fonksiyonu Gaussian formunda ele alınmış ve sistemin dalga fonksiyonu simetri özelliği göz önünde bulundurularak belirlenmişti. Tek parçacık dalga fonksiyonunda bulunan parçacıkların konumlarını belirten a_x *ve* a_y parametreleri ve Gaussian dalga fonksiyonunun genişliğini gösteren σ parametresi tamamen sayısal olarak elde edilip sistemin taban durumu dalga fonksiyonu belirlenmiştir. Yoğunluk dağılımı bozonlar için denklem (2.36) de tanımlandığı gibi,

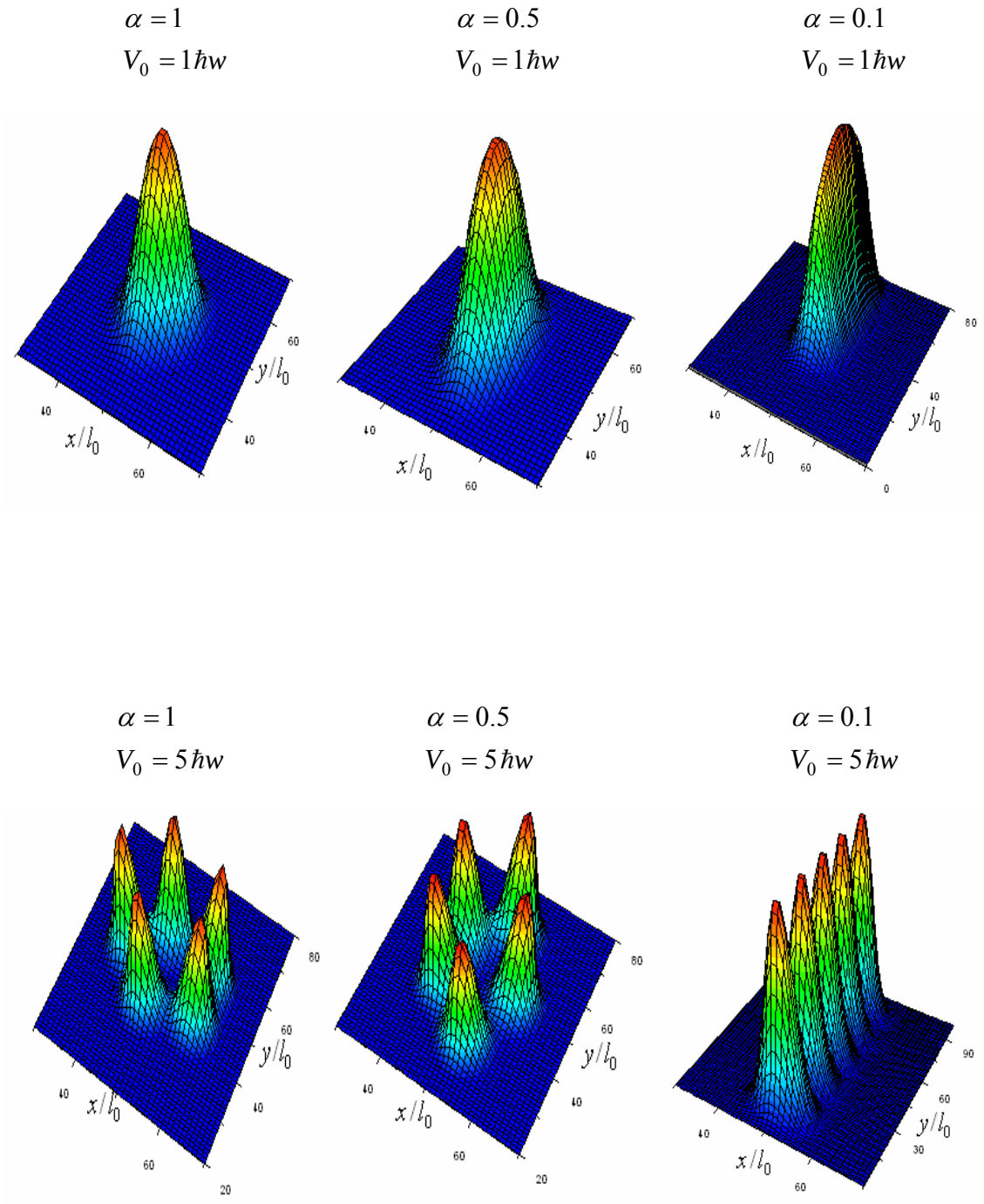
$$n(r) = N_0 \left|\psi_N(r)\right|^2 \tag{5.3}$$

ifadesinden hesaplanır. Böylece Bessel fonksiyonu ile tanımlanan etkileşme potansiyel altında Şekil 5.3, Şekil 5.4, Şekil 5.5 ve Şekil 5.6 da sırasıyla parçacık sayısı N_0=4, 5, 6 ve 9 için yoğunluk dağılımları bazı çiftlenim sabiti değerleri için anizotropi

parametresine göre incelenmiştir. Şekil 5.3 'ün için ilk satırda 4 parçacık için çiftlenim sabiti $V_0 = 1\hbar w$ alındığında anizotropi parametresi $\alpha = 1, 0.5 ve\ 0.1$ değerlerilerine, ikinci satırda ise çiftlenim sabitinin $V_0 = 5\ \hbar w$ değerinde aynı anizotropi parametreleri için yoğunluk dağılımları incelenmiştir. İlk satırdan görüleceği gibi anizotropi parametresi değeri azaltıldığında, yoğunluk dağılımlarından görüldüğü gibi, küçük çiftlenim sabiti değerinde Bose-Einstein Yoğuşması özelliği göstermektedir. Ancak çiftenim sabiti $V_0 = 1\ \hbar w$ değeri için anizotropi parametresinin küçük değerlerinde ($\alpha = 0.1$) sistemin BEY özelliğini hızla kaybetmektedir. İkinci satırda ise çiftlenim sabitinin $V_0 = 5\ \hbar w$ değerinde anizotropi parametresi küçültülürse yoğunluk dağılımının iki boyuttu dağılımdan tek boyutlu dağılıma geçiş yaptığı tespit edilir. Benzer davranışlar Şekil 5.4, Şekil 5.5 ve Şekil 5.6 da sırasıyla parçacık sayısı N_0=5, 6 ve 9 için gözlenmiştir. Böylece anizotropik tuzağın yoğunluk dağılımına etkisi belirgin olarak elde edilmiştir. Bir önceki bölümde logaritmik etkileşme potansiyeli için bulunan sonuçlar bu bölümde Bessel fonksiyonu kullanılarak elde edilen sonuçlarla uyum içindedir. Bir sonraki kısımda tüm anizotropi değerleri için yoğunluk dağılımları incelenmiş, deneysel ve teorik çalışmalarla karşılaştırılmıştır.



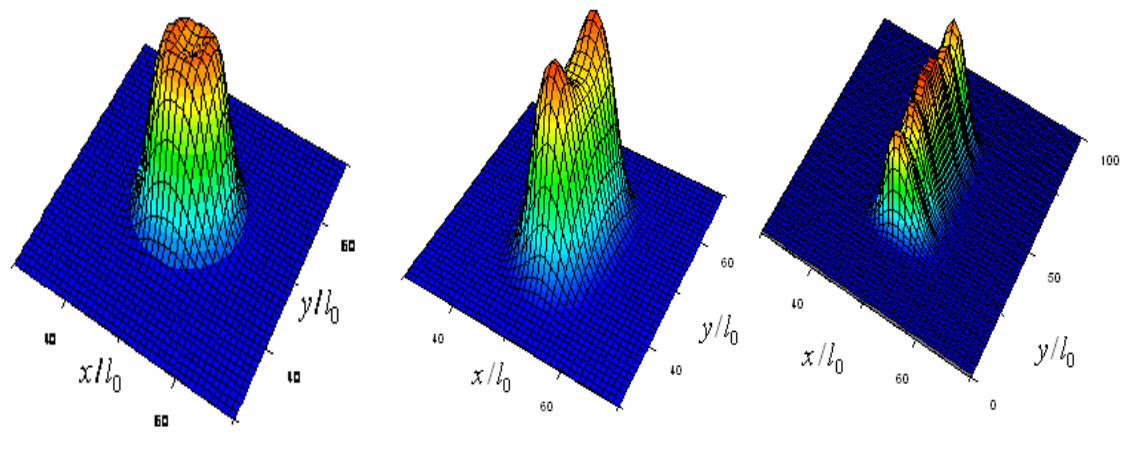
Şekil 5.3 Dört parçacık için yoğunluk dağılımlarının anizotropi parametresi $\alpha = 1, 0.5, 0.1$ ve çiftlenim sabitinin $V_0 = 1\hbar w$ ve $V_0 = 5\hbar w$ değerlerinde karşılaştırılması



Şekil 5.4 Beş parçacık için yoğunluk dağılımlarının anizotropi parametresi $\alpha = 1, 0.5, 0.1$ ve çiftlenim sabitinin $V_0 = 1\hbar w$ ve $V_0 = 5\hbar w$ değerlerinde karşılaştırılması

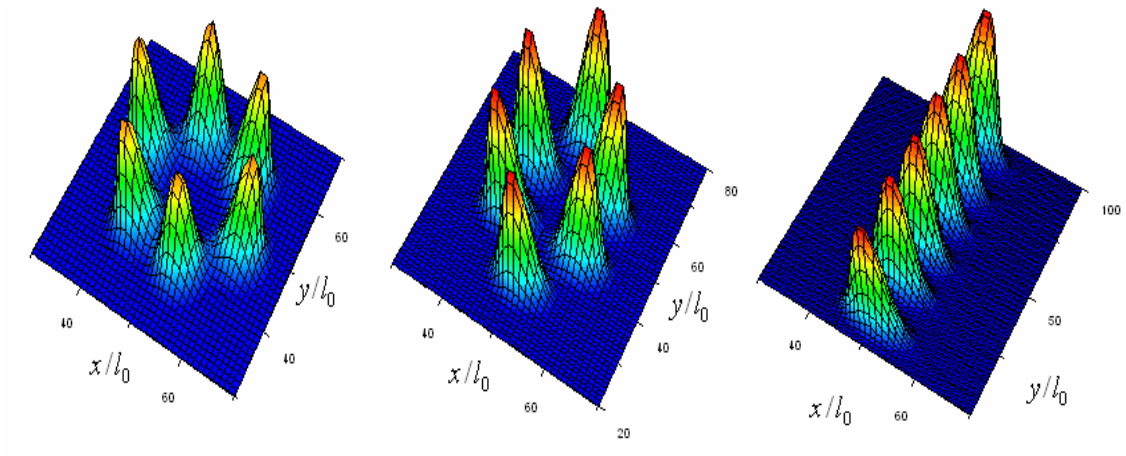
$\alpha = 1$ $\alpha = 0.5$ $\alpha = 0.1$

$V_0 = 1\hbar w$ $V_0 = 1\hbar w$ $V_0 = 1\hbar w$

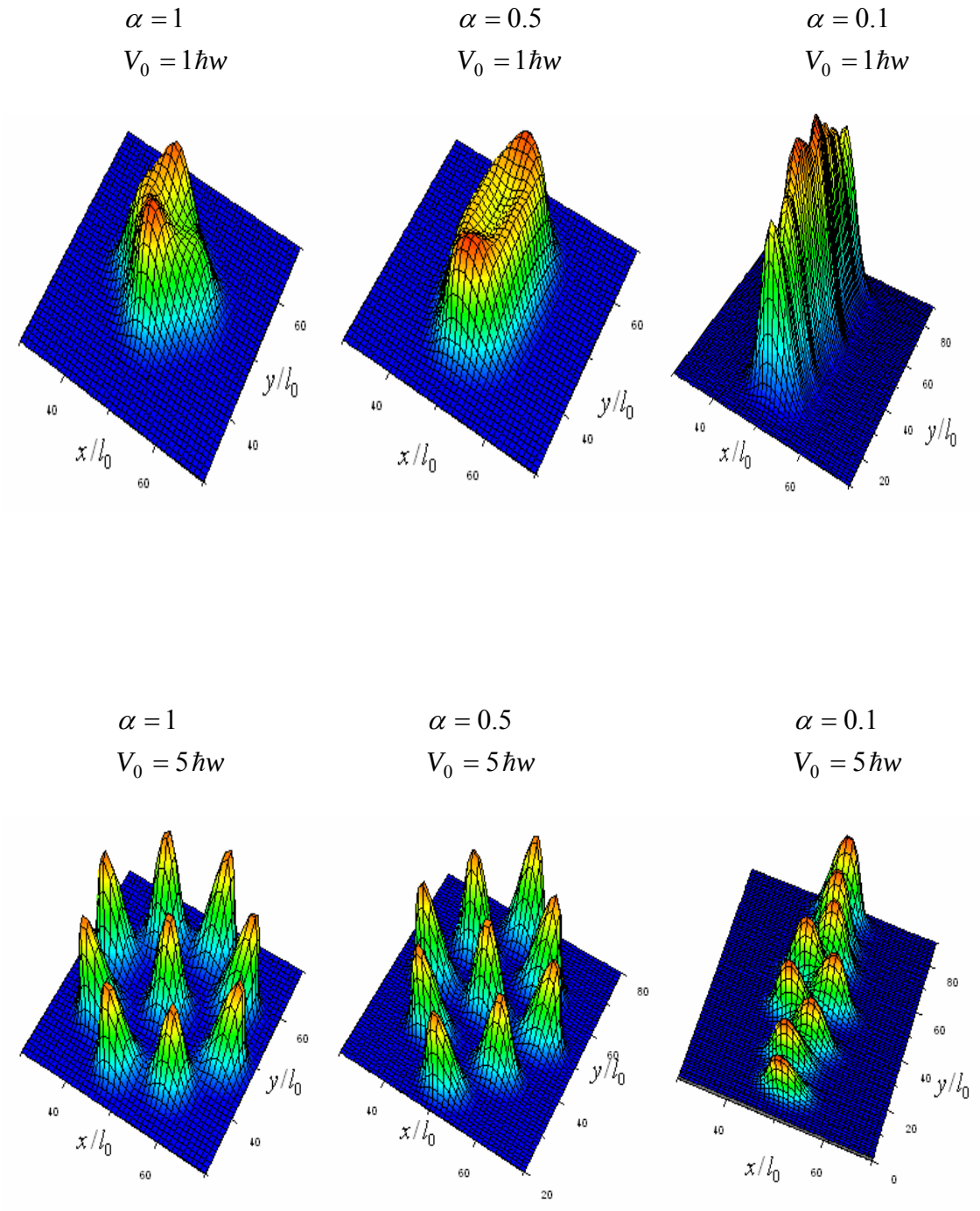


$\alpha = 1$ $\alpha = 0.5$ $\alpha = 0.1$

$V_0 = 5\hbar w$ $V_0 = 5\hbar w$ $V_0 = 5\hbar w$



Şekil 5.5 Altı parçacık için yoğunluk dağılımlarının anizotropi parametresi $\alpha = 1, 0.5, 0.1$ ve çiftlenim sabitinin $V_0 = 1\hbar w$ ve $V_0 = 5\hbar w$ değerlerinde karşılaştırılması



Şekil 5.6 Dokuz parçacık için yoğunluk dağılımlarının anizotropi parametresi $\alpha = 1, 0.5, 0.1$ ve çiftlenim sabitinin $V_0 = 1\hbar w$ ve $V_0 = 5\hbar w$ değerlerinde karşılaştırılması

5.3 Sonuçların Bazı Deneysel ve Teorik Çalışmalarla Karşılaştırılması

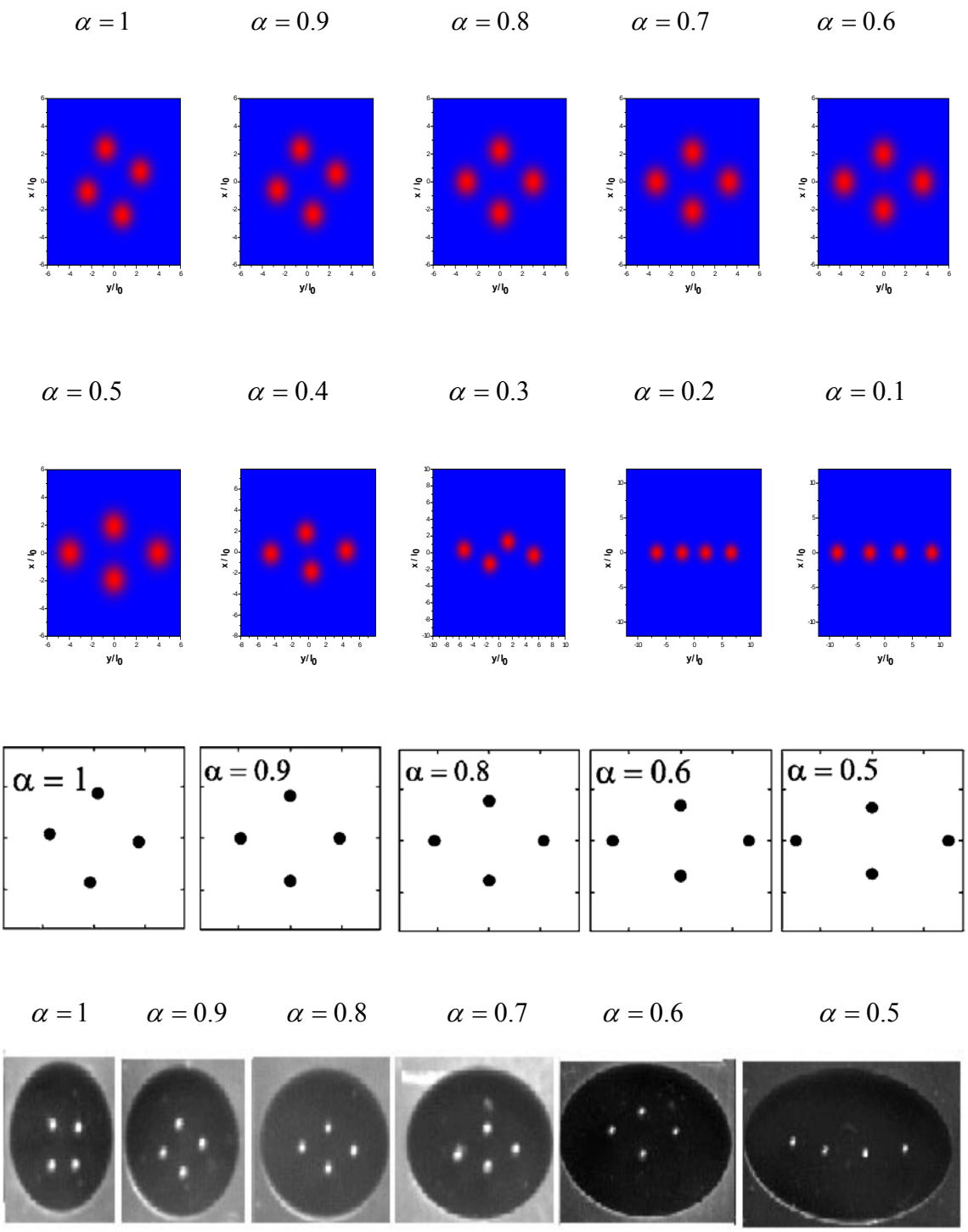
Bu tezde ele alınan yapıya benzer sistem klasik Newton yasalarını kullanarak Monte Carlo simülasyon yaklaşıklığı yöntemi ile Apolinario ve arkadaşları tarafından incelenmiştir (Apolinario vd., 2005). Bu çalışmada parçacıklar arası etkileşme potansiyeli olarak logaritmik potansiyel kullanılmıştır. Altı parçacık için anizotropi parametresi $\alpha = 1$ ve dokuz parçacık için $\alpha = 1, 0.9, 0.8 \; ve \; 0.7$ değerlerinde bulduğumuz sonuçlar Apolinario ve arkadaşları tarafından elde edilen sonuçlardan farklıdır. Ancak, dokuz parçacık için bulduğumuz sonuçlar deneysel çalışma ile daha fazla uyum göstermektedir (Jean, 2002).

Tablo 4.1 de gösterildiği gibi izotropik durumda ($\alpha = 1$) 4, 5 parçacık için Şekil 5.7 ve Şekil. 5.8 de benzer sonuçlar elde edilmiştir. Beş parçacığa kadar yoğunluk dağılımının (0,N) şeklinde olduğunu görülmüş bu dağılım şekline de tek kabuk dağılımı denilmektedir.

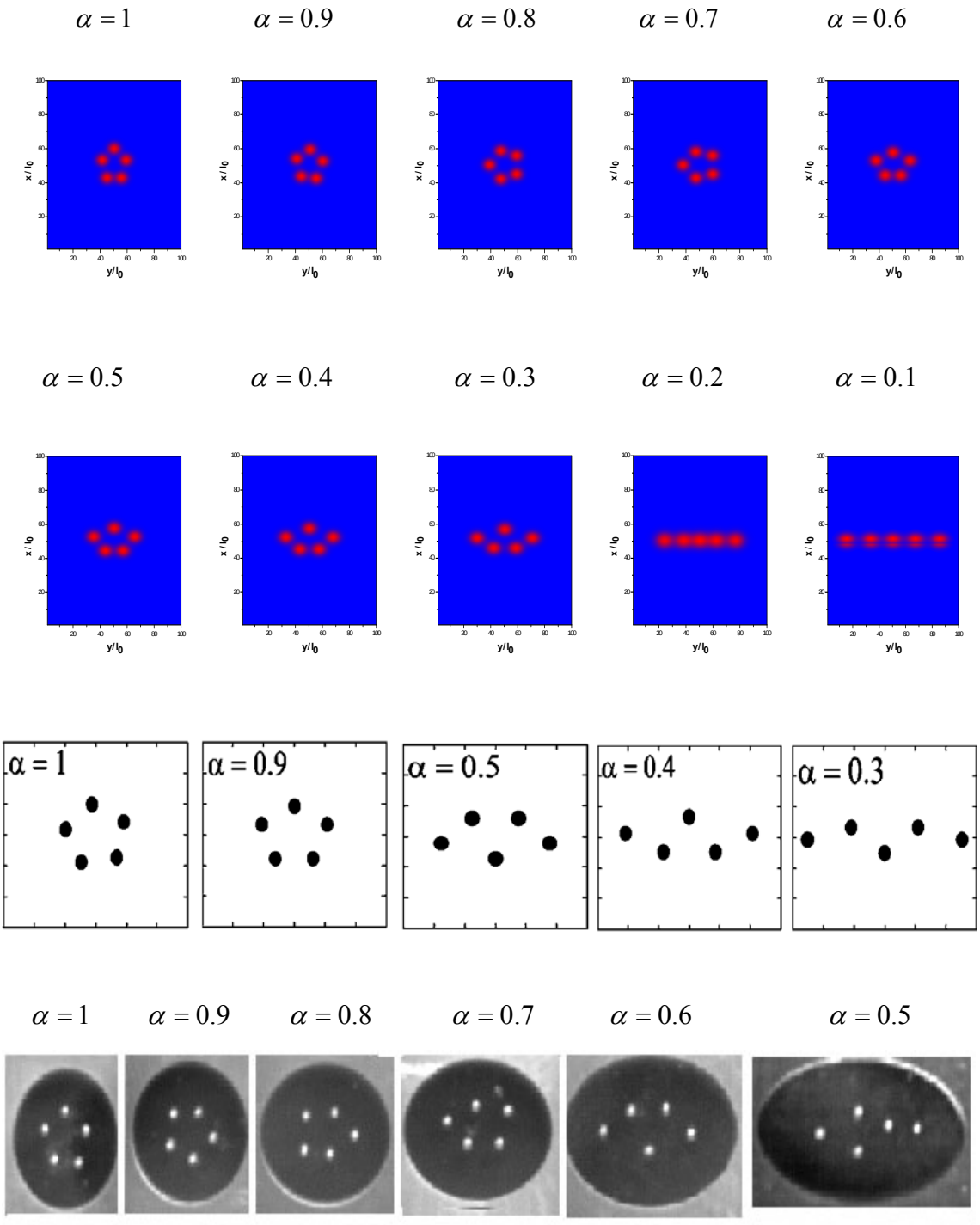
Şekil 5.9 de gösterildiği gibi altı parçacık için önceki bölümde elde edilen sonuçlara benzer şekilde izotropik durum için (1,5) dağılımı yerine (0,6) dağılımı elde edilmiştir. Benzer teorik ve deneysel çalışmalar (Apolinario vd., 2005, Romanovsky et al., 2004 ve Jean, 2002) (0,6) dağılımının taban durumu temsil etmediğini bu durumun yarı kararlı durum(metastable) olduğunu söylemişlerdir. Şekil 4.9 da gösterildiği gibi Gaussian dalga fonksiyonu yaklaşıklığı ile elde edilen sonuçlar gösteriyor ki; (0,6) dağılımının enerjisi (1,5) dağılımına göre daha düşük olmaktadır. Bu yüzden (0,6) dağılımını taban durum olarak bulunmaktadır. Etkileşme potansiyeli Bessel fonksiyonu olarak ele alındığında da yoğunluk dağılımında çift kabuk davranışı (1,N-1) ilk olarak yedi parçacıkta görülmüştür.

Dokuz parçacık için bulunan sonuçlar Şekil 5.10 dan görüleceği gibi daha karmaşıktır. Anizotropi parametresi 1 ile 0.1 arasında değiştiğinde yoğunluk dağılımının nasıl değiştiği ilk iki satırda gösterilmiştir. Üçüncü satırda teorik çalışma sonuçları (Apolinario vd., 2005) ve dördüncü satırda ise deneysel sonuçlar (Jean, 2002) gösterilmiştir. Anizotropi parametresi 1 den 0.1 e doğru azaltılmaya başlandığında ilk 9 parçacıkta ortaya çıkan yoğunluk dağılımında bir faz geçişinin olduğu yani (1,8)

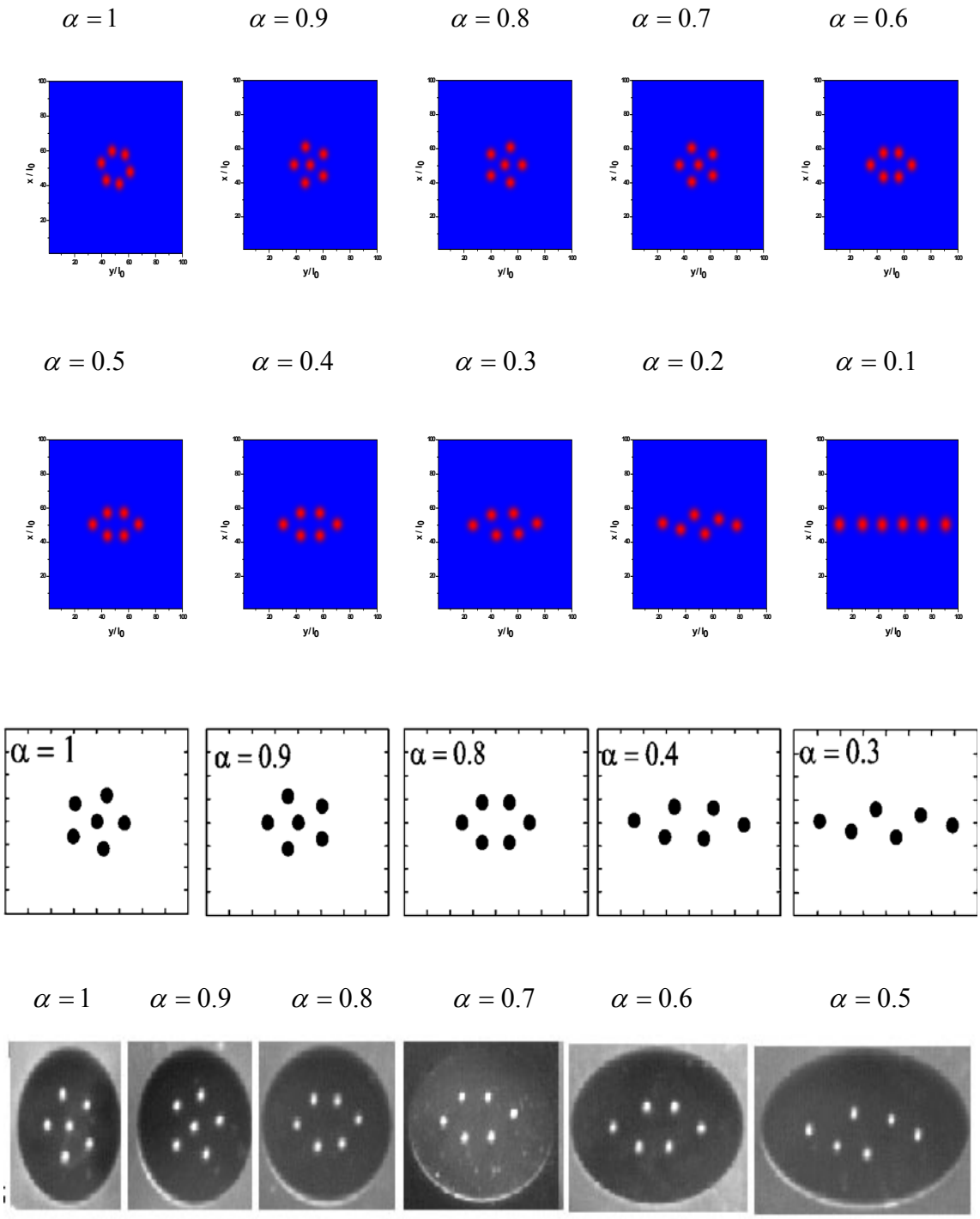
dağılımından (2,7) dağılımına geçiş yapıp tekrar başlangıçtaki (1,8) dağılımına geri geçiş yaptığı görülmüştür. Anizotropi parametresi $\alpha = 0.9$ olarak ele alındığında bulduğumuz (2,7) dağılım sonuçları literatürdeki deneysel çalışma ile uyum içindedir. Kong ve arkadaşları bu dağılım farklılığına sebep tuzak potansiyelinin $V \approx r^n$ tanım formuna bağlı olup olmadığını araştırmışlardır. Tuzak potansiyelinin kuvveti n<2.2 ise 9 parçacık için taban durum dağılımının (2,7) şeklinde olduğunu eğer n>2.2 ise (1,8) şeklinde olduğunu göstermişlerdir (Kong vd., 2001). Tuzak potansiyelinin kuvvetini artırmak tuzağın genişliğini azaltmaktadır. Bunun sonucunda anizotropik tuzağın parçacıkların dağılımına etkisi daha iyi anlaşılmaktadır.



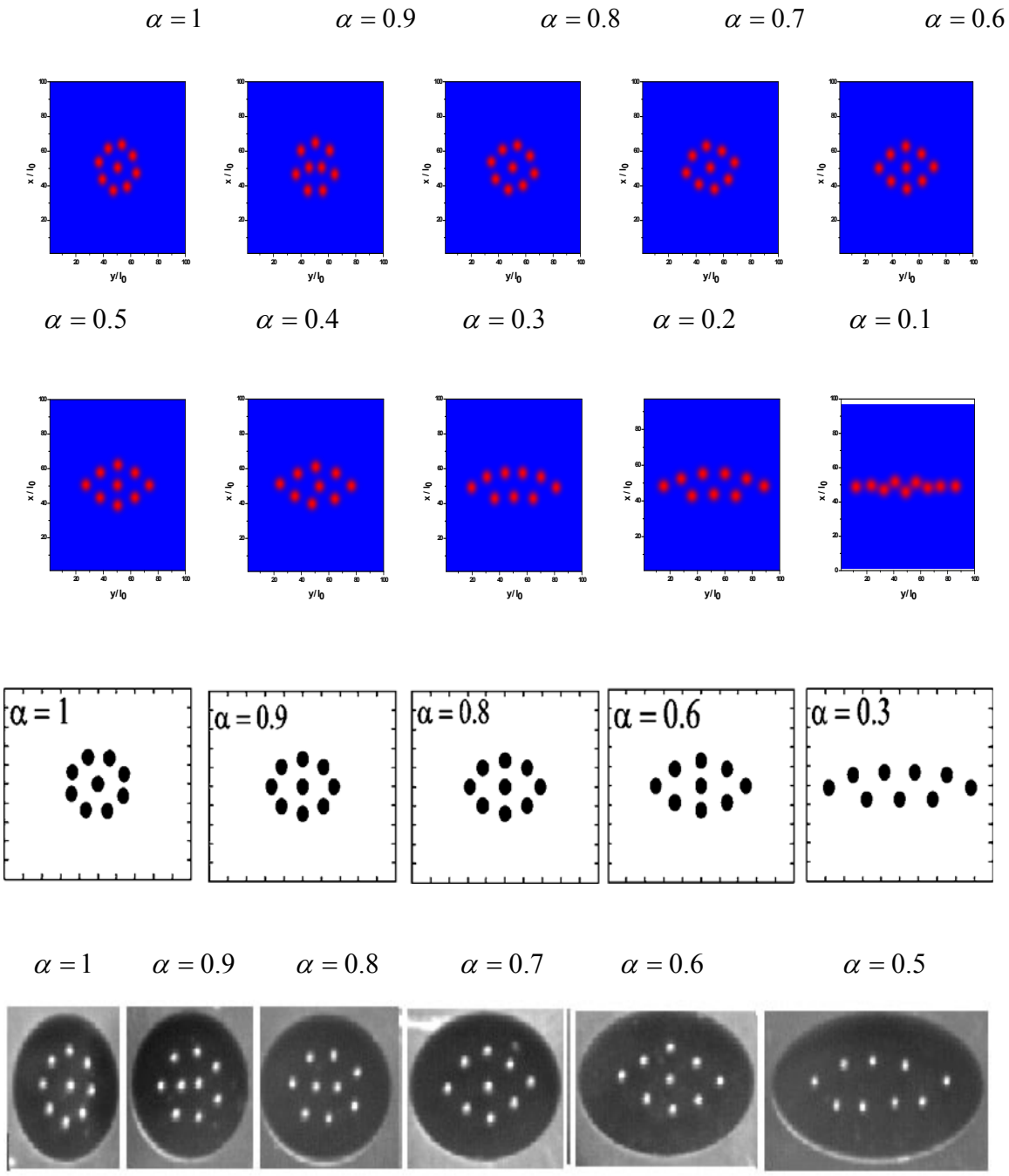
Şekil 5.7 Dört parçacık için yoğunluk dağılımın çiftlenim sabiti $V_0 = 5\hbar w$ değerinde anizotropi parametresine göre değişiminin diğer teorik ve deneysel sonuçlarla karşılaştırılması



Şekil 5.8 Beş parçacık için yoğunluk dağılımın çiftlenim sabiti $V_0 = 5\hbar w$ değerinde anizotropi parametresine göre değişiminin diğer teorik ve deneysel sonuçlarla karşılaştırılması



Şekil 5.9 Altı parçacık için yoğunluk dağılımın çiftlenim sabiti $V_0 = 5\hbar w$ değerinde anizotropi parametresine göre değişiminin diğer teorik ve deneysel sonuçlarla karşılaştırılması



Şekil 5.10 Dokuz parçacık için yoğunluk dağılımın çiftlenim sabiti $V_0 = 5\hbar w$ değerinde anizotropi parametresine göre değişiminin diğer teorik ve deneysel sonuçlarla karşılaştırılması

5.4 Eylemsizlik Momenti

Eylemsizlik momenti veya atalet momenti dönme hareketi yapan bir cismin dönme eylemsizliğidir. Başka bir deyişle eylemsizlik momenti yüzey şeklini değiştirmeye çalışan kuvvete gösterdiği tepkidir ve en genel olarak

$$I = \int \rho r^2 d^2\vec{r} \tag{5.4}$$

ile tanımlanır (Goldstein, 1980). Burada, bir enerji durumunda bulunma olasılığı ρ ve N_0 parçacık sayısı, ψ_{N0} Denklem (4.10) tanımlanan çok parçacık dalga fonksiyonu olmak üzere

$$\rho = N_0 \sum_i \left|\psi_{N_0}\right|^2 \tag{5.5}$$

dir. Böylece x ve y doğrultusundaki eylemsizlik momentleri sırasıyla,

$$\begin{aligned} I_x &= \int \rho x^2 dxdy \\ I_y &= \int \rho y^2 dxdy \end{aligned} \tag{5.6}$$

yazılabilir (Marion, 1995). Yukarıdaki denklemde değişkenler yerine koyulursa,

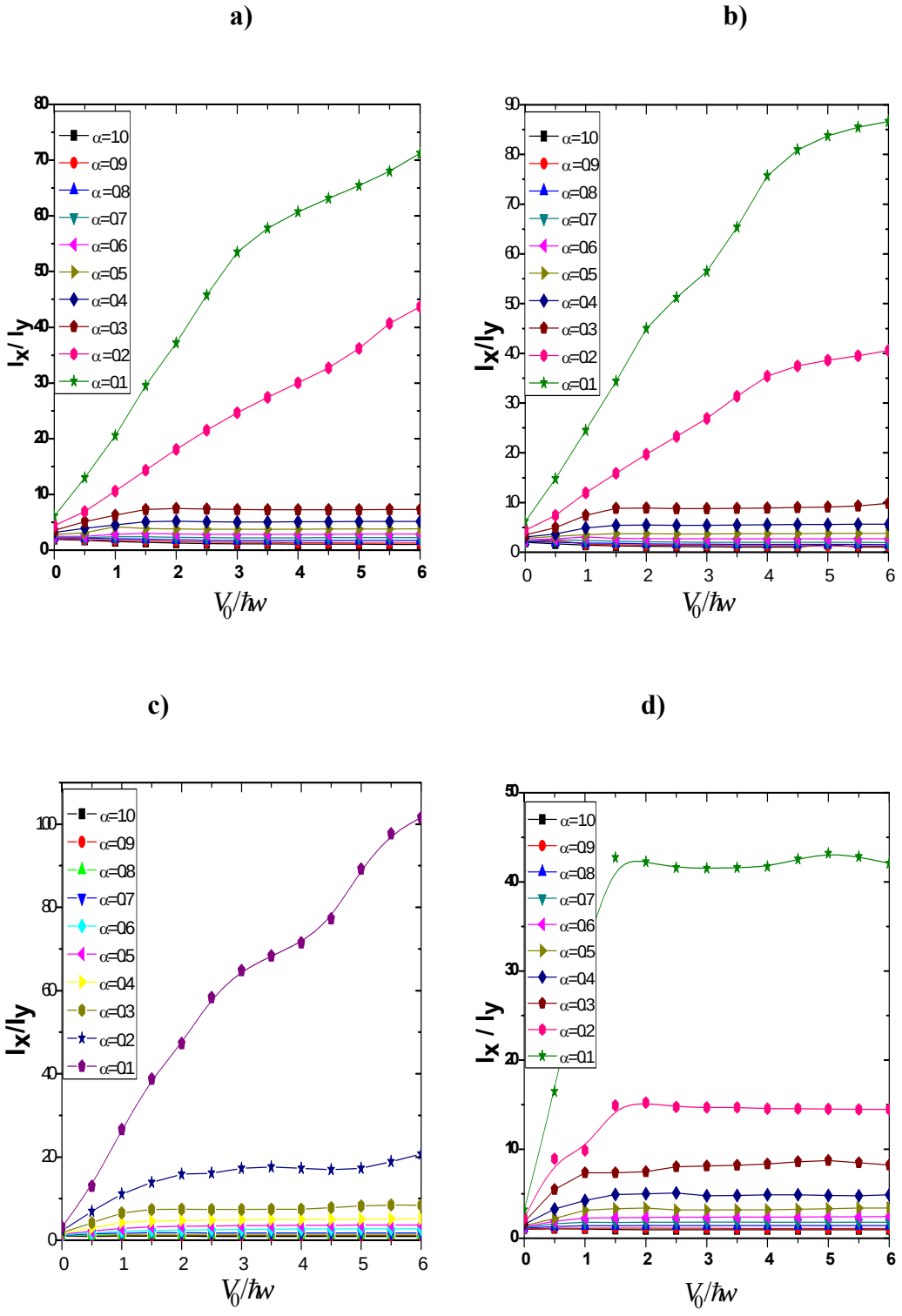
$$\begin{aligned} I_x^{N0} &= \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} x^2 \frac{1}{\pi\sigma^2}\exp\left[-\frac{1}{\sigma^2}\left((x-a_x(i))^2+(y-a_y(i))^2\right)\right]dxdy = \frac{N_0\sigma^2}{2} + \sum_i^{N0} a_x^2(i) \\ I_y^{N0} &= \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} y^2 \frac{1}{\pi\sigma^2}\exp\left[-\frac{1}{\sigma^2}\left((x-a_x(i))^2+(y-a_y(i))^2\right)\right]dxdy = \frac{N_0\sigma^2}{2} + \sum_i^{N0} a_y^2(i) \\ I_{xy}^{N0} &= \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} xy \frac{1}{\pi\sigma^2}\exp\left[-\frac{1}{\sigma^2}\left((x-a_x(i))^2+(y-a_y(i))^2\right)\right]dxdy = \sum_i^{N0} a_x(i)a_y(i) \end{aligned} \tag{5.7}$$

bulunur. Bu ifadeler parçacıkların harmonik tuzak geometrisinin değişimi altında eylemsizlik momentlerini analitik olarak bulmamızı sağlar. Eylemsizlik momentinin bileşenlerinin değişimine bakarak bozonların anizotropik tuzak etkisi altında nasıl bir dağılım gösterdiğini anlaşılabilmektedir. Denklem (5.7) de bulunan ve parçacıkların konumunu belirleyen $a_x(i)$ ve $a_y(i)$ katsayıları ile Gaussianın genişliğini gösteren σ parametresi tamamen nümerik olarak hiçbir sınırlama yapmadan IMSL Kütüphanesi altında bulunan N değişkenli bir fonksiyonu mimimize eden değerleri bulmaya yarayan DUMPOL algoritması kullanılarak bulunmuştur. Elde edilen bu katsayılar denklem (5.7) ifadesinde yerine konulup eylemsizlik momenti bileşenleri analitik olarak belirlenebilmektedir.

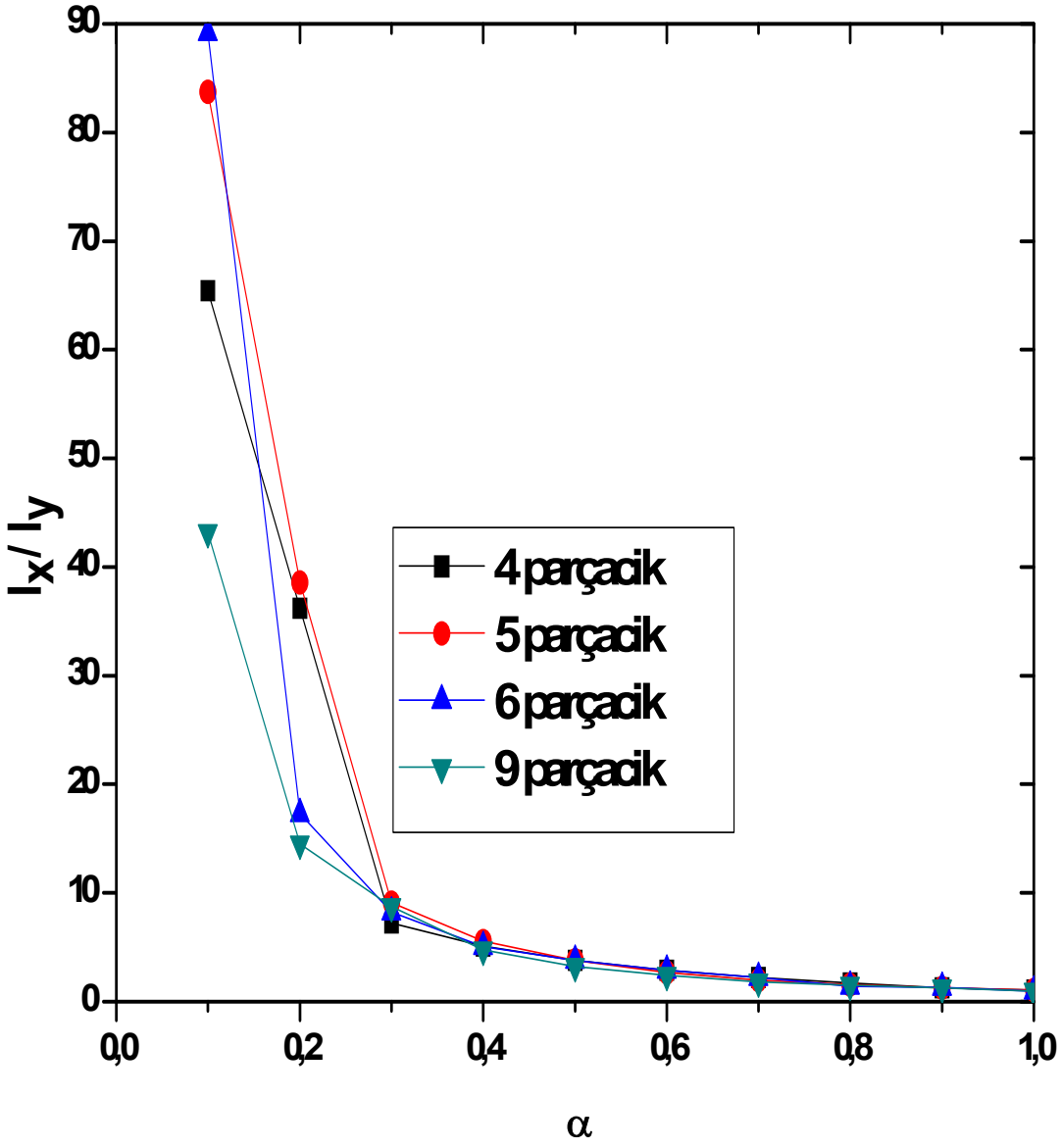
Şekil 5.11 de N_0=4, 5, 6 ve 9 parçacık için eylemsizlik momentinin x ve y bileşenlerinin oranının çiftlenim sabitine göre değişimi anizotropi parametresi ($\alpha = 1, 0.9, ..., 0, 1$) için incelenmiştir. Eğer anizotropi parametresi küçük ise ($\alpha = 0.2,\ 0.1$) x yönündeki tuzak potansiyeli etkisi azalmakta sistem y doğrultusunda bir boyuta tuzaklanmış gibi davranmaktadır. Çünkü x doğrultusundaki tuzak etkisinin azaltılması bu doğrultudaki eylemsizlik momentini arttırır. Bu nedenle küçük anizotropi değerlerinde I_x/I_y oranı diğer anizotropi değerlerine göre çok büyüktür.

Şekil 5.12 de ise yine x yönündeki eylemsizlik momentinin y yönündeki eylemsizlik momentine oranının sabit çiftlenim sabiti için($V_0 = 5\hbar w$) farklı anizotropi değerlerinde parçacık sayısına bağlı değişimi incelenmiştir. Küçük anizotropi değerleri için ($\alpha = 0.2,\ 0.1$) I_x/I_y oranındaki değişim parçacık sayısıyla orantılı olarak değişmemektedir. Bu oran, anizotropi parametresi $\alpha = 0.1$ olduğunda 9 parçacık için en küçük olmasının sebebi sistem tam olarak tek boyutta tuzaklanmış gibi davranış göstermemesidir. Bu nedenle 9 parçacık için I_x, parçacık sayısı N_0=4, 5 ve 6 ya göre daha düşük olmaktadır. Anizotropi parametresinin daha büyük değerleri için eylemsizlik momentlerinin oranı I_x/I_y çiftlenim sabiti $V_0 = 5\hbar w$ olarak alındığında neredeyse aynı olduğu Şekil 5.12 de görülmektedir. Eylemsizlik momentlerin oranındaki değişimin en fazla olduğu anizotropi parametresi $\alpha = 0.2,\ 0.1$ değerlerini daha iyi irdeleyebilmek için Şekil 5.13 de yoğunluk değişimleri a) sütununda $\alpha = 0.2$, b) sütunun da ise $\alpha = 0.1$ alınarak parçacık sayısı N_0=4, 5, 6, ve 9 için gösterilmiştir.

Parçacık sayısı 4 ve 5 olduğunda $\alpha = 0.2$ *ve* 0.1 değerlerinde yoğunluk dağılımlarından görüldüğü gibi her iki değer için sistem sanki tek boyutta tuzaklanmış gibi davranmaktadır. Bu nedenle $\alpha = 0.2$ *ve* 0.1 değerleri için N_0=4 ve 5 olduğunda eylemsizlik momentlerin (I_x / I_y) oranı anizotropi parametresinin diğer değerlerindeki oranlarından çok büyük olduğu Şekil 5.11 a ve b görülmektedir. Şekil 5.11 c ve d de ise parçacık sayısı 6 ve 9 için sistemin sanki tek boyutta tuzaklanmış gibi davranışı sadece anizotropi parametresi $\alpha = 0.1$ olduğunda görüldüğünden bu değerde I_x / I_y oranı diğer değerlerin oranından çok büyük olmaktadır. Parçacık sayısı azaltılırsa (N_0=4 veya 5) sistemin daha çabuk tek boyutta tuzaklandığı Şekil 5.13 deki yoğunluk dağılımlarından anlaşılmaktadır. Bu nedenle parçacık sayısı az olduğunda eylemsizlik momentlerindeki I_x / I_y oranı $\alpha = 0.2$ *ve* 0.1 değerlerinde çok büyük olmaktadır.

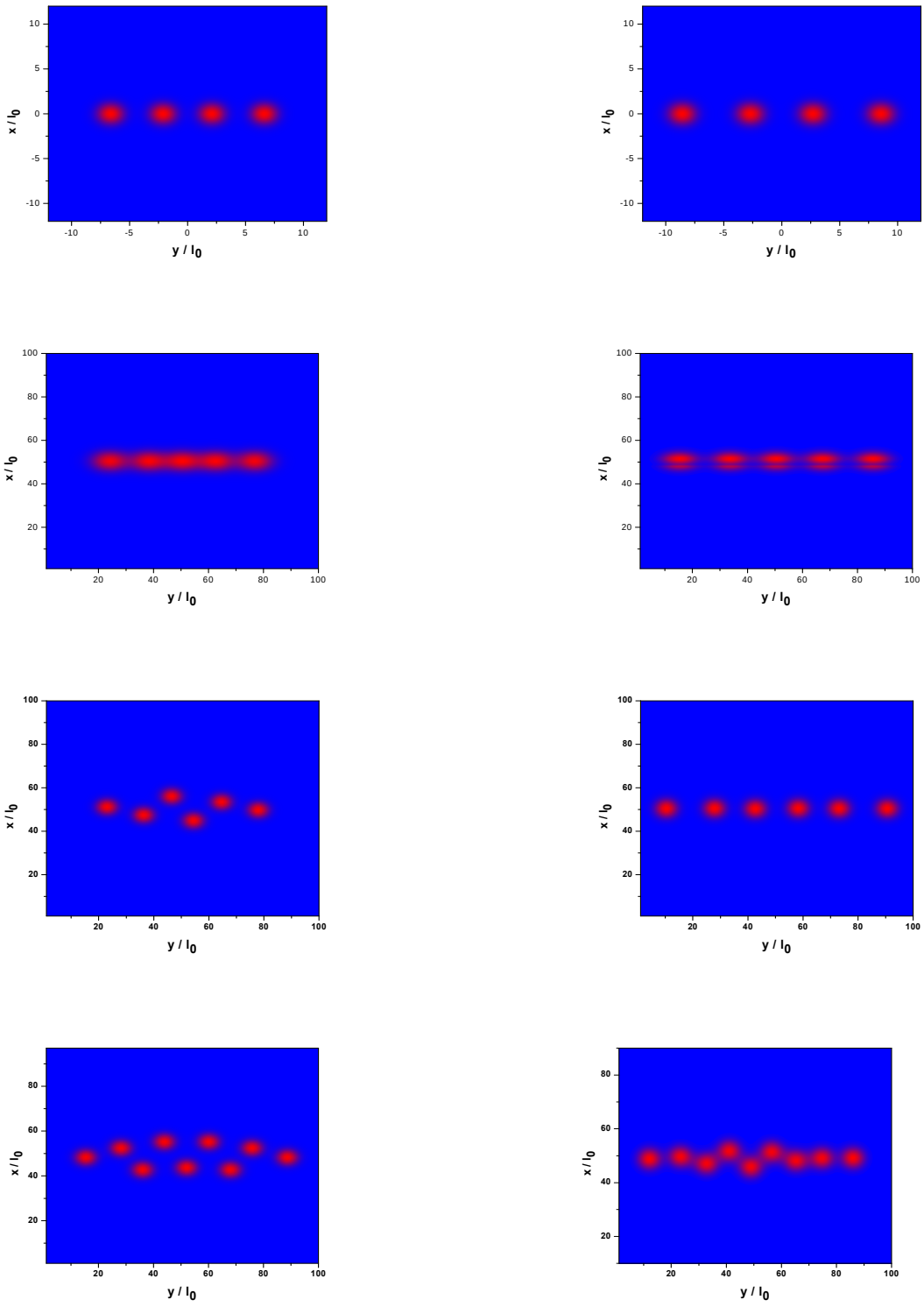


Şekil 5.11. Eylemsizlik momentinin x ve y bileşenlerinin (I_x/I_y) oranının çiftlenim parametresine göre değişimi anizotropi parametresinin $\alpha = 1, 0.9, \ldots\ldots, 0.1$ değerlerinde, a) dört parçacık, b) beş parçacık, c) altı parçacık ve d) dokuz parçacık için incelenmesi



Şekil 5.12. Eylemsizlik momentinin x ve y bileşenlerinin oranının (I_x/I_y) anizotropi parametresine göre değişimi N_0=4, 5, 6 ve 9 parçacık için çiftlenim sabiti $V_0 = 5\hbar w$ değerinde karşılaştırılması

$\alpha = 0.2$ $\alpha = 0.1$



Şekil 5.13 Yoğunluk dağılımının çiftlenim sabiti $V_0 = 5\hbar w$ değerinde parçacık sayısı N_0=4, 5, 6 ve 9 olduğunda a sütununda anizotropi parametresi $\alpha = 0{,}2$, b sütununda ise $\alpha = 0.1$ için değişiminin incelenmesi

5.5 Faz Geçişinin Nümerik Olarak Belirlenmesi

Bir bozonik sistemde N_0 toplam parçacık sayısını N ise bir enerji durumunda bulunan parçacık sayısını göstersin. Çiftlenim sabitinin küçük olduğu durumlarda $(V_0 \approx 0)$ $\frac{N}{N_0} \cong 1$ olmaktadır. Bu durumda sistem BEY fazındadır. Çiftlenim sabiti artmaya başladığında N değerinin azalmaya başladığı ve büyük çiftenim sabiti değerlerinde yaklaşık $N/N_0 \to 1/N_0$ e eşit olur. N=1 sonucu her yörüngede bir parçacık bulunduğunu, böylelikle Wigner kristalizasyonunun gözlendiğini belirtir (Wigner, 1934). Şekil 5.14 (a,b,c ve d) de 4, 5, 6 ve 9 parçacık için $\alpha = 1, 0.9, ...0.1$ değeri için N/N_0 oranının çiftlenim sabitine göre değişimi gösterilmiştir. Şekil 5.15 de ise anizotropi parametresi $\alpha = 1 \; ve \; 0.5$ alındığında parçacık sayısı kaç alınırsa alınsın çiftlenim sabiti arttırıldığında $N/N_0 \to 1/N_0$ yaklaşıklığı kapalı eğri içinde gösterilmiştir. Eğer anizotropi parametresi $\alpha = 1$ yerine $\alpha = 0.5$ seçilirse daha küçük çiftlenim sabiti değerinde ($V_0 \cong 5\hbar w$ yerine yaklaşık $V_0 \cong 3\hbar w$) $N/N_0 \to 1/N_0$ oranına ulaşıldığı görülmüştür. Burada anizotropik tuzak etkisi bir yönde azaltılmakta, bu nedenle parçacıklar daha düşük bir çiftlenim sabiti değeri ile kristal özelliği göstermeye başlamaktadır. Böylece sistemde faz geçişi gerçekleşmektedir.

Bose Einstein yoğuşmasından kristal faza geçişini gösteren kritik çiftlenim sabiti iki yöntemle hesaplanmıştır. İlk yöntemde her bir enerji özdurumunda bulunan parçacık sayısı toplam parçacık sayısına bölünerek çiftlenim sabitine göre değişim bulunur. Elde edilen fonksiyonun ikinci türevi ya da eğrilik ekstrapolasyonu kritik çiftlenim sabiti değerini belirler.

N/N_0 çiftlenim sabitine göre değişimi;

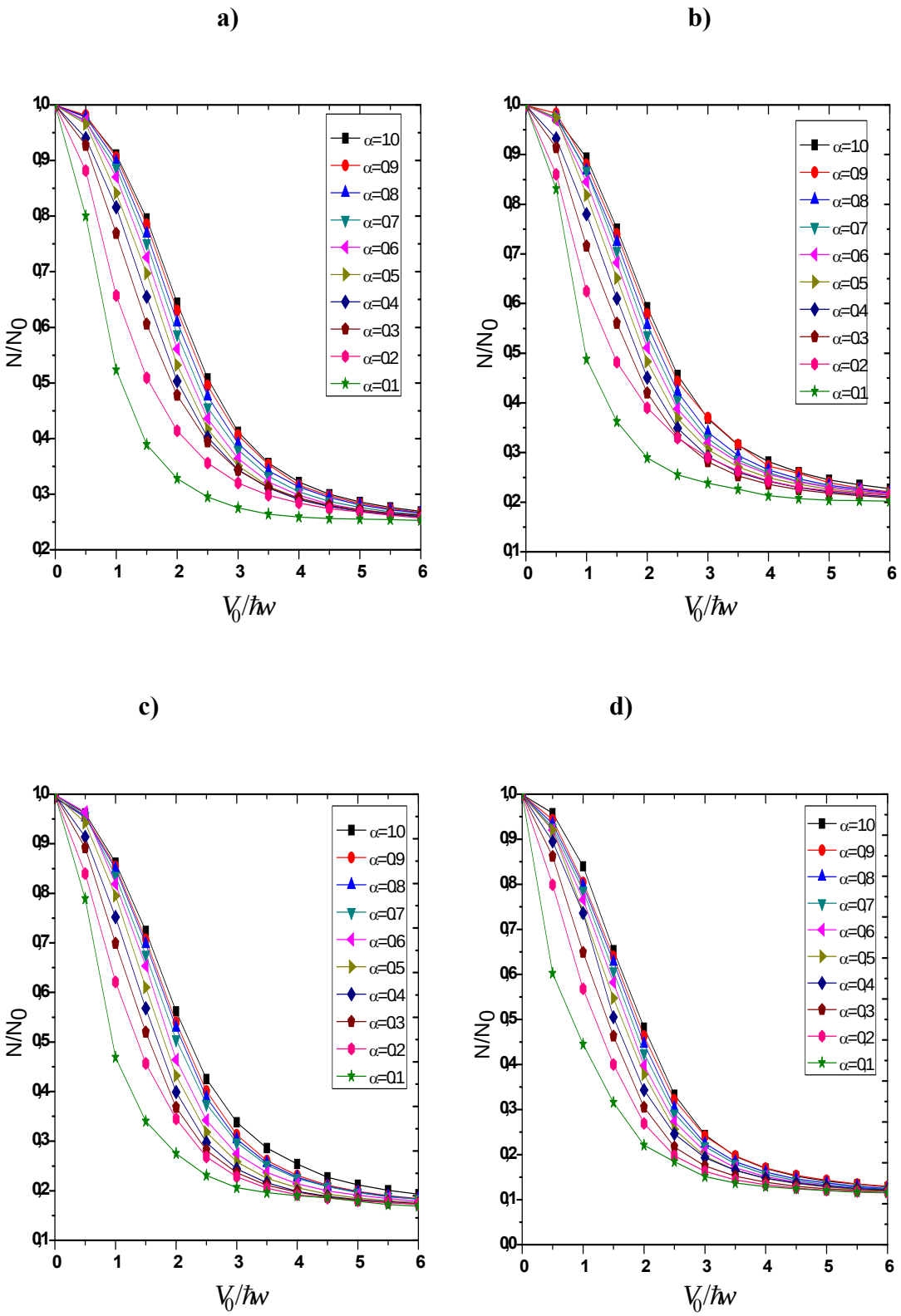
$$y(x) = P1 + P2 * \exp(-P3 * x^{P4}) \tag{5.8}$$

fonksiyonuyla gösterilebilir. Burada P1,P2,P3 ve P4 fit parametreleridir. P1 parametresi büyük çiftlenim sabiti değerlerinde yaklaşık olarak $P1 = 1/N_0$ değerini vermektedir. Bu fonksiyonun N/N_0 oranının çiftlenim sabitine göre değişimini sağladığı Şekil 5.16 da N_0=4, 6 ve 9 parçacık için fit parametreleri ile birlikte gösterilmiştir. A sütununda anizotropi parametresi $\alpha = 1$, b sütununda ise $\alpha = 0.5$ alınmıştır. Bir fonksiyonda her noktanın eğimi, o noktadan gecen teğetin eğimine eşit ise maksimum veya minimum noktada fonksiyona teğet geçen doğrunun eğimi sıfır olmalıdır. Öyleyse bu fonksiyonun ikinci türevi alınıp sıfıra eşitlenirse kritik çiftenim sabiti değeri,

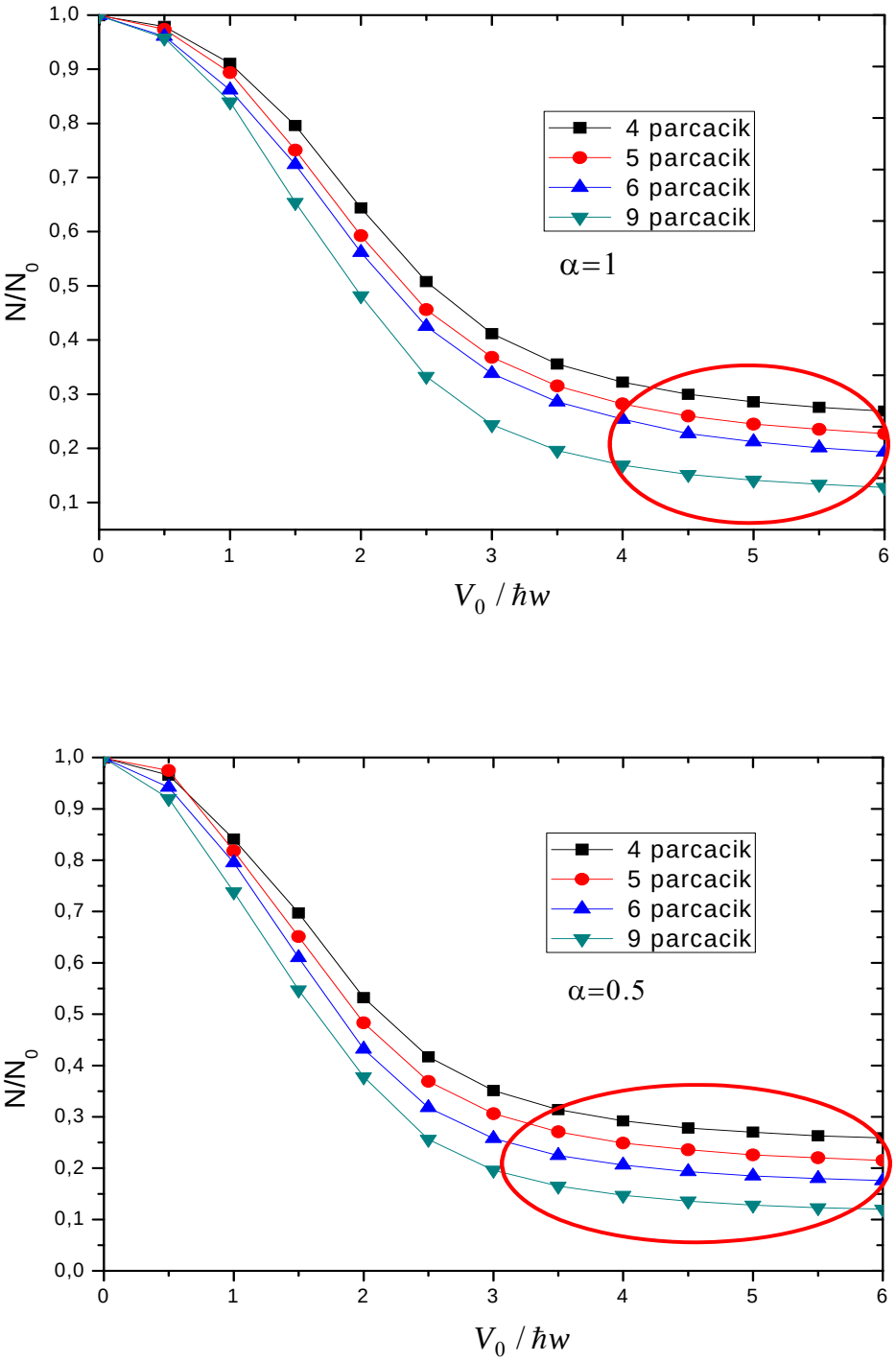
$$V_{kritik} = \left(\frac{P4 - 1}{P3 * P4} \right)^{1/P4} \tag{5.9}$$

olarak tanımlanabilir. Bu kiritik çiftlenim sabiti değerinden büyük değerlerde Bose-Einstein yoğuşması yok olmaya Wigner kristali oluşmaya başlamaktadır. Böylece N/N_0 oranının çiftenim sabitine göre değişimi bir exporansiyel (x^n) fonksiyon gibi değiştiği ve n değerinin anizotropi parametresi ve parçacık sayına göre değişiklik gösterdiği P4 değerinden görülmektedir.

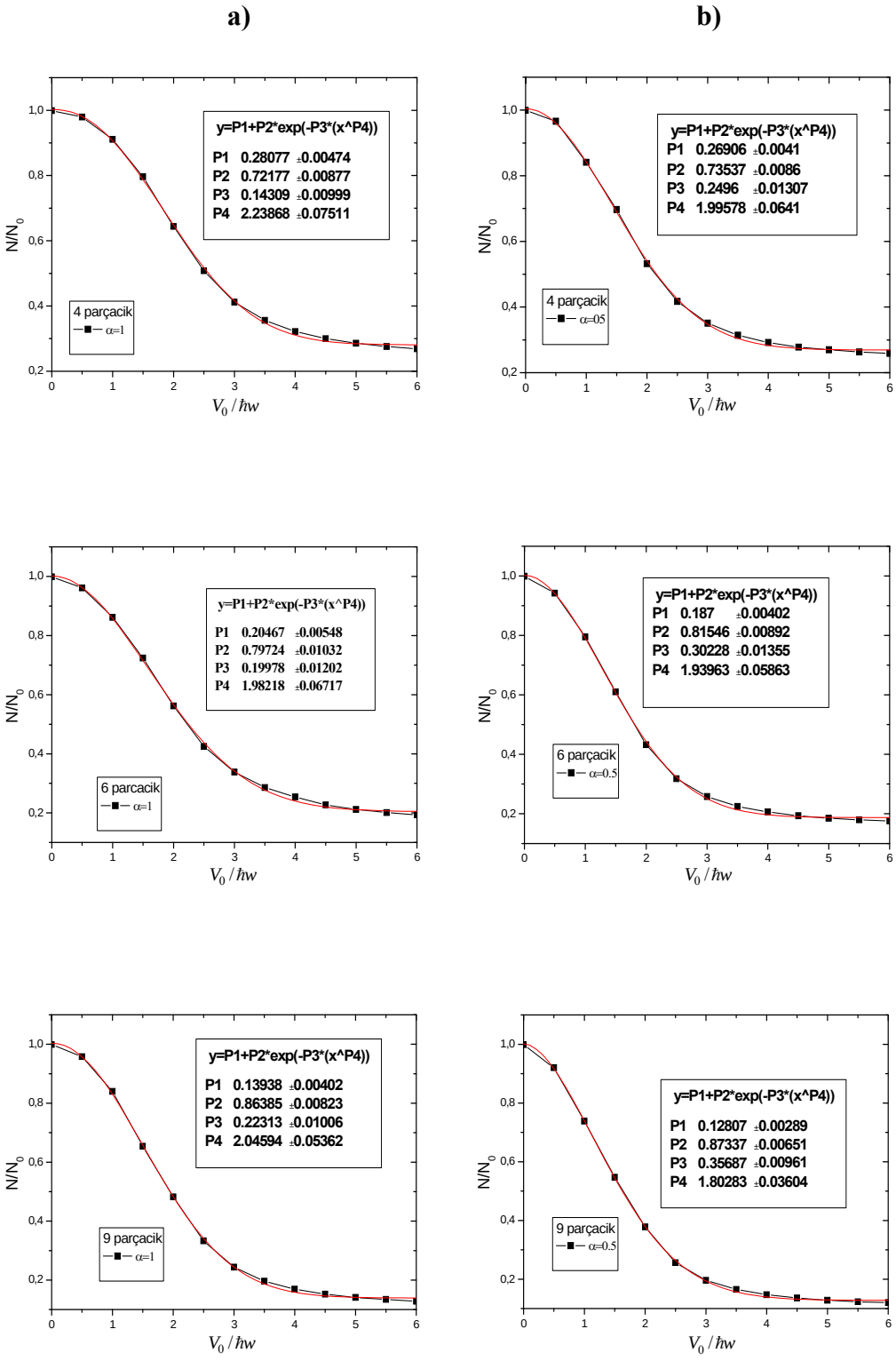
İkinci yöntemde bozonların her bir kuantum öz durumunda bulunma olasılığı ayrı ayrı hesaplanır. Bütün parçacıkların aynı kuantum durumunda bulunduğu seviyeden bir parçacığın bir başka seviyeye geçişinden kritik çiftlenim sabiti değeri belirlenir. Başka bir deyişle, $N = N_0 - 1$ durumunda BEY bozunuma uğrar. Çünkü bu koşulda bir bozon başka bir öz durumda bulunmaya başlamış demektir. Denklem (3.3)'den her bir enerji öz durumunda bulunan parçacık sayısı hesaplanabilmektedir. Şekil 5.17 de her iki yöntemle bulunan kritik çiftlenim sabiti değerleri farklı anizotropi parametresi değerlerinde 4, 5, 6 ve 9 parçacık için gösterilmiştir. Bu iki yöntemle bulunan kritik çiftlenim sabiti değerleri hemen hemen birbirlerine yakın çıkmakta ve benzer bir karakter göstermektedir. Anizotropi parametresi azaltıldığında kritik çiftlenim sabiti değerinin parçacık sayısından bağımsız olarak eksponansiyel olarak azaldığı belirlenmiştir.



Şekil 5.14. N/N_0 oranının çiftlenim sabitine göre değişiminin anizotropi parametresi $\alpha = 1, 0.9, \ldots\ldots, 0.1$ değerlerinde, a) 4 parçacık, b) 5 parçacık, c) 6 parçacık ve d) 9 parçacık için incelenmesi

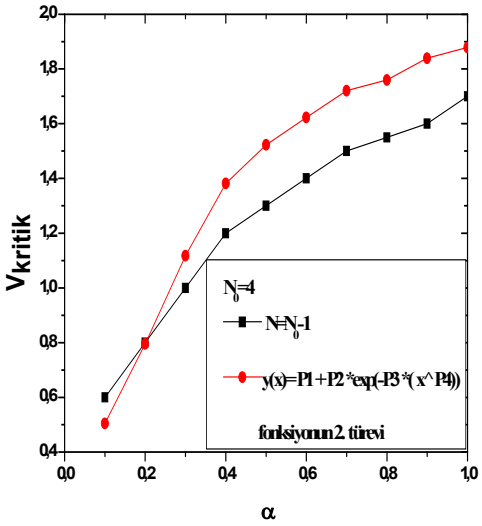


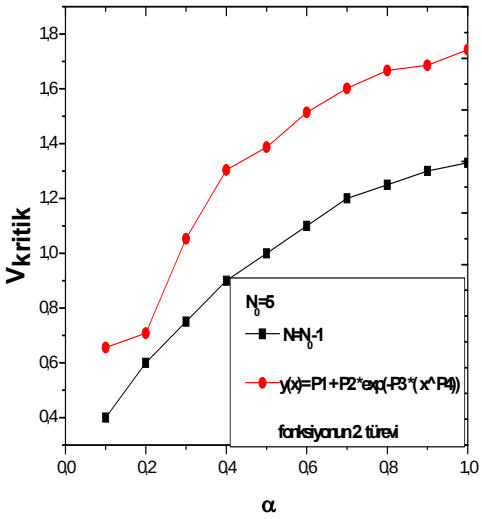
Şekil 5.15. N/N_0 oranının çiftlenim parametresine göre değişimi anizotropi parametresi $\alpha = 1$ *ve* 0.5 alındığında 4, 5, 6 ve 9 parçacık için incelenmesi



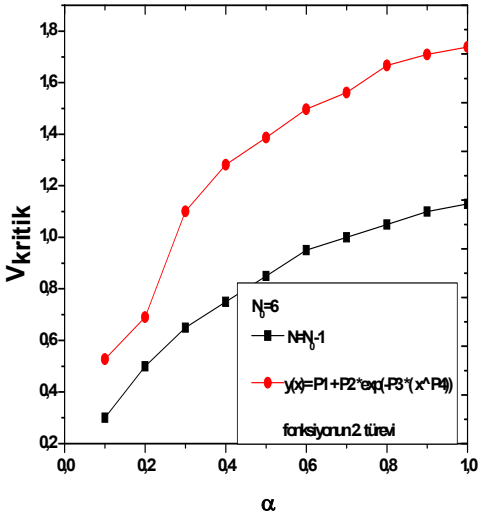
Şekil 5.16 N/N_0 oranının çiftlenim sabitine göre değişimi ve fonksiyona göre fit eğrisi, a sütununda anizotropi parametresi $\alpha = 1$, b sütununda ise $\alpha = 0.5$ olduğunda parçacık sayısı 4,6 ve 9 için değişiminin incelenmesi

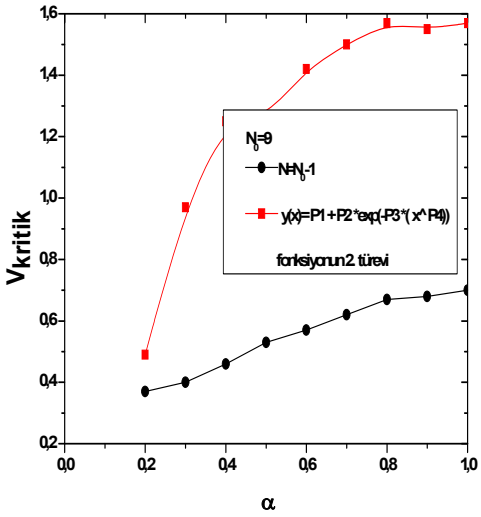
a) b)





c) d)





Şekil 5.17 Kritik çiftlenim sabitinin iki farklı yaklaşım altında anizotropi parametresine göre değiştiği sırasıyla N_0=4, 5, 6 ve 9 parçacık için karşılaştırılması

6. SONUÇLAR VE DEĞERLENDİRME

Bose-Einstein Yoğuşmasının kristal faza geçişi teorik olarak çeşitli yöntemlerle incelenmiştir. Bu çalışmada iki boyutlu sistemler için uygun olduğu bilinen logaritmik etkileşme potansiyeli kullanılarak elde edilen sonuçlar Coulomb ve Delta-Dirac fonksiyonlarının kullanıldığı çalışmaların sonuçları ile karşılaştırılmıştır. Bu bağlamda harmonik tuzak içinde bulunan bir bozonik sistemin taban durum enerjilerinin ve yoğunluk dağılımlarının parçacık sayısına bağlı olarak değişimi Hartree, Hartree-Fock ve varyasyonel yöntemler kullanarak elde edilmiştir. Üç yöntemin karşılaştırılmasında küçük çiftlenim sabitleri için Hartree ve varyasyonel sonuçların Hartree-Fock yönteminden daha düşük enerjide sistemi minimize ettiği ve sistemin bu durumda Bose-Einstein Yoğuşması formunda olduğunu belirtmektedir. Çiftlenim sabitinin büyük değerlerinde sistem kristalize olmaktadır. Bu durumdaki fiziksel çözümler ise Hartree-Fock ve varyasyonel yöntemler tarafından sağlanmaktadır. Dolayısıyla Wigner kristallerinin oluşumunun Hartree-Fock ve varyasyonel yöntemlerle incelenmesi gerektiği açıktır. Ancak yoğunluk fonksiyonları incelendiğinde iki yöntem arasında N_0=2 parçacık sayısı dışında önemli farklılıklar doğmaktadır. Hartree-fock yönteminde parçacıklar arasındaki bağdaşmanın sürdüğü süper molekül fazı görülürken, varyasyonel yöntemle Wigner kristalleşmesi açık olarak belirlenmektedir. Altı parçacık için varyasyonel yöntemle bulunan sonuçlar literatürdeki benzer yöntemle yapılan çalışmalarla karşılaştırıldığında yoğunluk dağılımları farklı bulunmuştur. Bunun nedeni Coulomb veya kısa erimli temas potansiyellerinin kullanılmasıdır. İki boyutta etkileşen sistemler için logaritmik potansiyel kullanmak daha gerçekçidir. Bununla birlikte varyasyonel yöntemle bozonlar için gaussian dalga fonksiyonları öngörülmekte ve bu fonksyionların konumları başlangıç koşullarında belirlenmektedir. Hartree-Fock yönteminde ise hiçbir sınırlayıcı koşul bulunmamaktadır. Önceki çalışmalarla karşılaştırma yapabilmek açısından varyasyonel sonuçlar kullanılmıştır. Çünkü süper molekül tanımının elde edildiği bir çalışma bu alanda bulunmamaktadır.

İkinci aşamada ise, anisotropik tuzak içerinde bulunan bozonlar arasındaki etkileşme potansiyeli Bessel fonksiyonu ($K_0(r)$) kullanılarak anizotropi parametresi ve çiftlenim sabitine göre değişimi incelenmiştir. Yoğunluk dağılımları incelendiğinde

anizotropi parametresi (α) 1'den 0.1'e doğru azaltıldığında sistemin yoğunluk dağılımı iki boyuttan tek boyuta doğru değişim gösterdiği görülmüştür. Bu değişimin daha iyi anlaşılması için x ve y doğrultusundaki eylemsizlik momentleri hesaplanmıştır. Ayrıca sayısal olarak elde edilen parçacıkların konumları ve dalga fonksiyonlarının genişliğini kullanarak x ve y yönündeki eylemsizlik moment hesapları için analitik ifadeler türetilmiştir. Anizotropi parametresi $\alpha = 0.2$ *ve* 0.1 olduğunda eylemsizlik momentinin x bileşeni çok büyük olduğu görülmüştür. Bu nedenle bozonik sistemin y ekseni doğrultusunda lokalize olduğu görülmüştür.

Son olarak her bir enerji durumundaki parçacık sayısı hesaplanarak anizotropi parametresine göre değişimi bulunmuştur. Bu değişimin 2. türevi alınarak Bose Einstein Yoğuşmasından kristal faza geçişi sağlayan kritik çiftlenim sabiti değeri hesaplanmıştır. Anizotropi parametresi küçüldüğünde buna paralel olarak kritik çiftlenim sabiti değeri de küçüldüğü görülmüştür. Bu nedenle eğer anizotropi parametresi küçükse sistemin daha düşük çiftlenim sabiti değerinde Bose Einstein yoğuşmasından kristal faza geçişinin kriterleri belirlenmiştir.

Sonuç olarak, bu tez izotropik ve anizotropik olarak tuzaklanmış birkaç bozonlu bir sistemde Bose Einstein Yoğuşmasının yapısındaki bozulmanın anlaşılması ve yeni bir kuantum fazının ortaya çıkışının nedenlerini açıklanmasına yönelik bir katkı olarak değerlendirilebilir. Elde edilen sonuçların gelecekte bozonik sistemlerin diğer fiziksel özelliklerinin irdelenmesinde, örneğin manyetik alan etkisinin araştırılmasına aydınlatıcı olabileceği düşünülmektedir.

KAYNAKLAR

Anderson et al., 1995 Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor, Science, Vol.269, Iss.5221, P.198.

Apolinario S. W. S., Partoens B., and Peeters F. M., 2005, Structure and spectrum of anisotropically confined two-dimensional clusters with logarithmic interaction, Phy. Rev. E 72, 046122.

Aydıner E., 2005, Bose-Einstein Yoğuşması, Türk Fizik Vakfı Dergisi, Sayı:17.

Bedanov V. and Peeters F. M., 1994, Ordering and phase transitions of charged particles in a classical finite two-dimensional system, Phys. Rev. B, 49 2667.

Bergeman T. 1997, Hartree-Fock Calculations of Bose-Einstein Condensation of ^{7}Li Atoms in a Harmonic Trap for $T>0$. Physical Rev. A 55, 3658–3669.

Blakie P.B., and Davis, M.J., 2004, The Projected Gross-Pitaevskii Equation for harmonically confined Bose gases, cond-mat/0410496 1, 1-11.

Bogoliubov N., 1947, On the Theory of Superfluidity, J. Phys. USSR, 11(1): 23

Bolton F., Rössler, U., 1993, Classical model of a Wigner crystal in a quantum dot, Superlattices and Microstructures 13 139.

Born M, Oppenheimer R., 1925, On the Quantum Theory of Molecules ,Ann. Phys,

Bose S. N., 1924, Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese, Zeitschrift für Physik 26:178-181 .

Campbell L. J. and Ziff R. M., 1979, Vortex patterns and energies in a rotating superfluid, Phys. Rev. B, 20 1886.

Capelle K., 2003, A bird's-eye view of density-functional theory, cond-mat/0211443 2, 1–32.

Ceperley D. M. and Alder B. J., 1980, Ground State of the Electron Gas by a Stochastic Method, Phys. Rev. Lett. 45**,** 566.

Ceperley D.M., 1995, Path Integrals in the Theory of Condensed Helium, Reviews of Modern Physics 67, 279–355.

Christopher Gies and D. A. W. Hutchinson, 2004, Coherence properties of the two-dimensional Bose-Einstein condensate, Phys. Rev. A 70, 043606**.**

Christopher Gies, 2004, Hartree-Fock-Bogoliubov treatment of the two-dimensional trapped Bose gas, Master of Science , at the university of Otago, Dunedin, New Zealand.

Dalfovo F., and Stringari, S., 1996, Bosons in Anisotropic Traps: Ground State and Vortices, Physical Review A 53, 2477–2485.

Davoudi B. et al., 2001, Ground-state properties of the two-dimensional charged Bose gas, 63, 104505.

DuBois J.L., 2002, Bose-Einstein Condansation in Traps: A Quantum Monte Carlo Study, PhD Thesis, Faculty of The University of Delaware, USA.

DuBois J.L., and Glyde, H.R., 2001, Bose-Einstein Condensates in Trapped Bosons: A Variational Monte Carlo Analysis, Physical Review A 63, 023602, 1–10.

DuBois, J.L., and Glyde, H.R., 2003, Natural Orbitals and Bose-Einstein Condensates in Traps: A Diffusion Monte Carlo Analysis, Physical Review A 68, 033602, 1–12.

Einstein A., 1925, "Quantentheorie des einatomigen idealen Gases". Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften **1**: 3.

Esry B.D., Greene, Burke C.H., and Bohn J.P., 1997, Hartree-Fock Theory for Double Condensates, Physical Review Letters 78, 3594–3597.

Eugene Wigner, 1934, On the interaction of electrons in Metals, Physical Review 46, 1002-1011.

Fermi E., 1927, A Statistical Method for Determining Some Properties of the Atom, Rend. Accad., 6: 602-7.

Franco Dalfovo and Stefano Giorgini, 1999, Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases, Reviews of Mod. Phys., Vol.3 p.463.

Gattobigio M. et al., 2005, Ground-state densities and pair correlation functions in parabolic quantum dots, Phys. Rev. B 72, 045306.

Giorgini S., Boronat J., and Casulleras J., 1999, Ground State of a Homogeneous Bose Gas: A Diffusion Monte Carlo Calculation, Physical Review A 60, 5129–5132.

Girardeau M., 1960 "Relationship between Systems of Impenetrable Bosons and Fermions in One Dimension.," Journal of Mathematical Physics 1, 516.

Goldstein H., 1980, Classical Mechanics, Second Edition, Addison-Wesley.

Griffin A., 1996, Conserving And Gapless Approximations For an Inhomogeneous Bose Gas at Finite Temperatures, Physical Review B 53, 9341–9347.

Gross E.P., 1961, Structure of a Quantized Vortex in Boson Systems, Nuova Cimento 20, 454.

Hänsch T.W., and A.L. Schawlow, 1975, Cooling of gases by laser radiation Opt. Comm. 13, 68.

Hartree D. R., 1928, The Wave Mechanics of an Atom with a Non-Coulomb Central Field, Proc. Cambridge Philos. Soc., 24, 89-110

Hatice Zehra Akbaş, 2007 Bose-Eistein Yoğuşması: Bir Yoğunluk Fonksiyoneli Yaklaşımı, doktora tezi Konya.

Hohenberg P., Kohn, W., 1964, Inhomegeneous electron gas, Physical Review 136: B864-B871.

Holzmann M., Krauth W., and Naraschewski M., 1999, Precision Monte Carlo Test of the Hartree-Fock Approximation for a Trapped Bose Gas, Physical Review A 59, 2956–2961.

Kalos and et al.,1974, Helium at zero temperature with hard-sphere and other forces, Phys. Rev. A 9, 2178–2195

Karaoğlu B., 2003, İstatistik Mekaniğe Giriş, Seyir Ders Kitapları

Ketterle W.,1999, Experimental Studies of Bose-Einstein Condensation, Physics Today,Vol.52, Iss.12, p.30.

Kim E. and Chan M H W., 2004, Probable observation of a supersolid helium phase, Nature 427 225.

Kim Y.E., and Zubarev A.L., 2003, Density-Functional Theory of Bosons in a Trap, Physical Review A 67, 015602, 1–5.

Kinoshita T., Wenger T., and Weiss D. S., 2004 "Observation of a One-Dimensional Tonks-Girardeau Gas.," Science 305, 1125.

Kohn W., and Sham L.J., 1965, Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects, Physical Review 140, A 1133–1138.

Kong M., Partoens B., and Peeters F. M., 2001, Transition Between Ground State and Metastable States in Classical 2D Atoms, arxiv:cond.-mat/ 0106395v1

Landau L., 1941, "Theory of the Superfluidity of Helium II". Physical Review 60: 356–35

Levine I. N., 2000, Quantum Chemistry, Prentice-Hall, Inc. New Jersey.

Lieb E. H. and Liniger W., 1963 "Exact Analysis of an interacting Bose Gas. I. General Solution and the Ground State.," Physical Review 130, 1605.

Marion J.B.; Thornton S.T., 1995, Classical Dynamics of Systems and Particles Fourth Edition, Thomson.

McMillan W. L. and Rowell J. M., 1964, Lead Phonon Spectrum Calculated from Superconducting Density of States, Phys. Rev. Lett. 14, 108–112.

Mese A.I. et al., 2008. Coulomb crystallites from harmonically confined charged bosons in two dimensions, J. Phys.: Condens. Matter 20, 335222.

Moerdijk A.A, 1994, Prospects for Bose-Einstein Condensation in Atomic Li-7 and Na-23, Phys.Rew.Lett., vol.73, Iss.4, p.518.

Nelson D R and Seung H S., 1989, Theory of Melted Flux Liquids, Phys. Rev. B 39 9153.

Olivier Sgwarth, 2004, Gross-Pitaevskii equation in atomic Bose-Einstein condensates, Bayreuth.

Paredes B., et al., 2004, "Tonks-Girardeau gas of ultracold atoms in an optical lattice.," Nature 305, 277.

Pethick C.J. and H. Smith, 2002, Bose–Einstein Condensation in Dilute Gases, Cambridge University Pres.

Pitaevskii L.P., 1961, Vortex Lines in an Imperfect Bose Gas, Soviet Physıcs JETP, 13, 451–454.

Rapaport D.C., 1995, The Art of Molecular Dynamics Simulation, Cabridge University Pres, Cambridge

Rieger T. et al., 2007, Trapping of Neutral Rubidium with a Macroscopic Three-Phase Electric Trap, PRL 99**,** 063001

Romanovsky I. et al., 2004, Crystalline Boson İn Harmonic Traps: Beyond the Gross-Pitaevskii Mean Field , Phys.Rew.Lett. Vol.93, p.230405.

Safak H., et al., 2003, Efficiency of genetic algorithm and determination of ground state energy of impurity in a spherical quantum dot, International Journal of Modern Physics C 14: 775-784.

Saint Jean M. and Guthmann C., 2002 Macroscopic two-dimensional Wigner asymmetric islands, J. Phys.: Condens. Matter 14 13653–13660

Saint Jean M., Even C. and Guthmann C., 2001, Macroscopic 2D Wigner islands, Europhys. Lett., 55 (1), 45–51.

Schweigert V. A., Peeters F. M. and Singha Deo P., 1998, Vortex Phase Diagram for Mesoscopic Superconducting Disks, Phys. Rev. Lett., 81 2783.

Tanatar B. and Ceperley D. M., 1989, Ground state of the two-dimensional electron gas, Phys. Rev. B 39, 5005–5016**.**

Thomas L. H., 1927, The calculation of atomic fields, Proc. Cam. Phil. Soc., 23: 542-550.

TOSI M. P., (March, 2003) "Introduction to the theory of Bose-Einstein Condensation", Scuola Normale Superiore di Pisa.

wlap.physics.lsa.umich.edu/umich/phys/satmorn/2002/20021123/real/sld003.htm

Yannouleas C. and Uzi Landman, 2005, Electron and boson clusters in confined geometries:Symmetry breaking in quantum dots and harmonic traps , PNAS Early Edition.

Ying-Ju Lai and Lin I., 1999, Packings and defects of strongly coupled two-dimensional Coulomb clusters: Numerical simulation, Phys. Rev. E, 60 4743.

ÖZGEÇMİŞ

28 Aralık 1981 tarihinde Manisa'da doğdum. İlköğretimi Manisa Pelitalan Köyü İlkokulu'nda, ortaöğrenimimi Manisa Şehitler Ortaokulu'nda ve lise öğrenimimi Manisa Yabancı Dil Ağrılıklı Lise de tamamladım. Eylül 1997 'de Trakya Üniversitesi Fizik Bölümü'nde lisans eğitimime başladım ve Haziran 2001'da mezun oldum. Eylül 2001 tarihinde Trakya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsünde Fizik Anabilim Dalı'nda yüksek lisans öğrenimime başladım ve Haziran 2004'de mezun oldum. Aynı yıl doktora eğitimime başladım.

Halen, Eylül 2001 tarihinde atanmış olduğum Trakya Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Dekanlığı kadrosuna bağlı Araştırma Görevlisi olarak görev yapmaktayım.