T.C.
SELÇUK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

BOSE-EINSTEIN YOĞUŞMASI: BİR YOĞUNLUK FONKSİYONELİ YAKLAŞIMI

HATİCE ZEHRA AKBAŞ
Doktora Tezi
Fizik Anabilim Dalı
Konya 2007

T.C.
SELÇUK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

BOSE-EINSTEIN YOĞUŞMASI: BİR YOĞUNLUK FONKSİYONELİ YAKLAŞIMI

HATİCE ZEHRA AKBAŞ
Doktora Tezi
Fizik Anabilim Dalı
Konya 2007

Bu tez 30/10/2007 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oybirliği/oyçokluğu ile kabul edilmiştir.

Prof. Dr. Ülfet ATAV
Danışman

Prof. Dr. Oğuz DOĞAN
Üye

Doç. Dr. Mevlüt DOĞAN
Üye

Doç. Dr. Ayhan ÖZMEN
Üye

Yrd. Doç. Dr. Atilla GÜLEÇ
Üye

ÖZET

Doktora Tezi

BOSE-EINSTEIN YOĞUŞMASI: BİR YOĞUNLUK FONKSİYONELİ YAKLAŞIMI

HATİCE ZEHRA AKBAŞ
Doktora Tezi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı
Konya 2007

Danışman: Prof. Dr. Ülfet ATAV

2007, 81 Sayfa

Jüri: Prof. Dr. Oğuz DOĞAN
Doç. Dr. Mevlüt DOĞAN
Doç. Dr. Ayhan ÖZMEN
Yrd. Doç. Dr. Atilla GÜLEÇ

Bu çalışmada çok parçacık bozon sistemlerinin taban durum özelliklerini incelemek üzere bir yaklaşım geliştirilmiştir. Bu yaklaşımla, çok parçacık sistemlerinin özelliklerini tanımlamada çok kullanışlı bir temsil olan doğal orbitaller ve bu doğal orbitallere karşılık gelen seviyelerdeki parçacık sayıları elde edilebilmektedir. Geliştirilen yöntem izotropik harmonik bir tuzakta tutulan bozonlardan oluşan bir sistemin özelliklerini belirlemek için kullanılmıştır. Parçacık sayısının 10 ile 3000 ve parçacıklararası etkileşimin genliğini belirleyen s-dalga saçılma uzunluğunun 0 ile $800\,a_{Rb}$ arasındaki değerleri için hesaplamalar yapılmıştır. Elde edilen sonuçlar literatürde bulunan diğer çalışmaların sonuçlarıyla karşılaştırılmıştır. Hesaplamalardan elde edilen sonuçlar değerlendirildiğinde çok parçacık bozon sistemlerinin taban durum özelliklerini tanımlarken sıfır menzilli temas potansiyeli yerine, sonlu menzilli daha gerçekçi potansiyellerin kullanılmasının uygun olacağı sonucuna varılmıştır.

Anahtar Kelimeler: Bose-Einstein yoğuşması, yoğunluk fonksiyonelleri teorisi, doğal orbitaller

ABSTRACT

PhD. Thesis

BOSE-EINSTEIN CONDENSATION: A DENSITY FUNCTIONAL APPROACH

HAT İCE ZEHRA AKBAŞ
Selçuk University
Institute of the Natural and Applied Sciences
Department of Physics

Superviser: Prof. Dr. Ülfet ATAV

2007, 81 Pages

Jury: Prof. Dr. Oğuz DOĞAN
Assoc. Prof. Dr. Mevlüt DOĞAN
Assoc. Prof. Dr. Ayhan ÖZMEN
Assist. Prof. Dr. Atilla GÜLEÇ

In this study, we have developed a new approach to investigate the ground state properties of many particle boson systems. Within this approach one can obtain the natural orbitals, which are very useful in describing the properties of many body systems and the filling factors of these orbitals. The method was applied to determine the properties of a many boson system trapped in an isotropic harmonical trap. Calculations were performed for systems containing 10 to 3000 particles in the trap and with s-wave scatttering length changing in the range 0 to $800\,a_{Rb}$. The results were compared with the results obtained from the literature. Considering the results obtained from the calculations of this study we have concluded that the zero-range contact potential is not sufficient for describing the ground state properties of many body bosonic systems and rather one should use more realistic potentials with finite range.

Key Words: Bose-Einstein condensation, density functional theory, natural orbitals

ÖNSÖZ

Bu çalışma Selçuk Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Anabilim Dalı öğretim üyesi **Prof. Dr. Ülfet ATAV** danışmalığında tamamlanarak Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitü'sü Doktora Tezi olarak sunulmuştur.

Bu tezi hazırlarken anladım ki, fiziksel bir sistemin teorik olarak tanımlanmasında sınır koşullarının ve sürecin tamamen bilinmesi gereklidir. Bununla birlikte çözüm için doğru sınır koşullarının tanımlanmasına ve doğru süreçlerin kullanılmasına ilave olarak tüm bu koşulların bütüncül olarak düşünülmesi sonuca ulaşabilmek için oldukça önemlidir.

Prof. Dr. Ülfet ATAV danışmalığında bir tez hazırlamak hayatımdaki en büyük fırsatlardan biridir. Danışman Hocam **Prof. Dr. Ülfet ATAV,** hem tezin konusunun seçiminde hem de bu konu ile ilgili doğru sınır koşullarının belirlenmesinde ve sürecin tanımlanmasında her zaman bana yol gösterici oldu. Aynı zamanda bu tez çalışmasının her aşamasında hiçbir yardımı benden esirgemedi. Bu tez çalışması süresince danışmanım rehberliğinde fizik bilgim önemli ölçüde arttığı gibi fizik alanındaki bakış açım da oldukça genişledi. Tüm katkılarından ve desteklerinden dolayı saygı değer Hocam **Prof. Dr. Ülfet ATAV'**a sonsuz saygı ve şükranlarımı sunarım.

Bazen eğlenceli bazen sıkıntılı geçen doktora dönemimde, iyi günümde de kötü günümde de her zaman yanımda olan beni cesaretlendiren aileme ve arkadaşlarıma da teşekkürlerimi sunuyorum.

Hatice Zehra AKBAŞ
KONYA 2007

İÇİNDEKİLER

1. GİRİŞ 1

2.1. BOSE-EINSTEIN İSTATİSTİĞİ VE BEC *5*

2.1.1. Serbest Parçacık Modeli *7*

2.1.2. Harmonik Osilatör Modeli *11*

2.2. BİR VE İKİ-BOYUTLU SİSTEMLER *14*

3. DENEYSEL YÖNTEMLER 16

3.1. TUZAKLAR *17*

3.1.1. Manyetik Tuzaklar *17*

3.1.2. Optik Tuzaklar *20*

3.1.3. Magneto-Optik Tuzaklar *21*

3.2. SOĞUTMA YÖNTEMLERİ *23*

3.2.1. Lazerle Soğutma *23*

3.2.2. Buharlaştırarak Soğutma *24*

4. ETKİLEŞEN SİSTEMLERDE BEC 25

4.1. ORTALAMA ALAN TEORİSİ *26*

4.1.1. Bogoliubov Yaklaşımı *26*

4.1.2. Gross-Pitaevskii Teorisi *29*

4.1.3. Hartree-Fock-Bogoliubov Yaklaşımı *32*

4.2. YOĞUNLUK FOKSİYONELLERİ TEORİSİ *33*

4.2.1. Thomas-Fermi Teorisi *35*

4.2.2. Hohenberg-Kohn Teorisi *36*

4.2.3. Kohn-Sham Denklemleri *38*

5. ÇOK PARÇACIK BOZON SİSTEMLERİNİN TEORİSİ: YENİ BİR YAKLAŞIM 43

5.1. İKİNCİ KUANTUMLANMA VE TOPLAM HAMİLTONYEN *43*

5.2. YOĞUNLUK MATRİSLERİ *46*

5.3. TEK PARÇACIK YOĞUNLUK MATRİSİ VE DOĞAL ORBİTALLER *48*

5.4. TABAN DURUM *50*

5.5. BOZON SİSTEMLERİ İÇİN DFT *53*

6. HESAPLAMALAR 55
6.1. TOPLAM ENERJİ *56*
6.2. AÇILIM KATSAYILARI *59*
6.3. SAYISAL HESAPLAMANIN AYRINTILARI *61*

7. SONUÇLAR 65

8. DEĞERLENDİRME 72

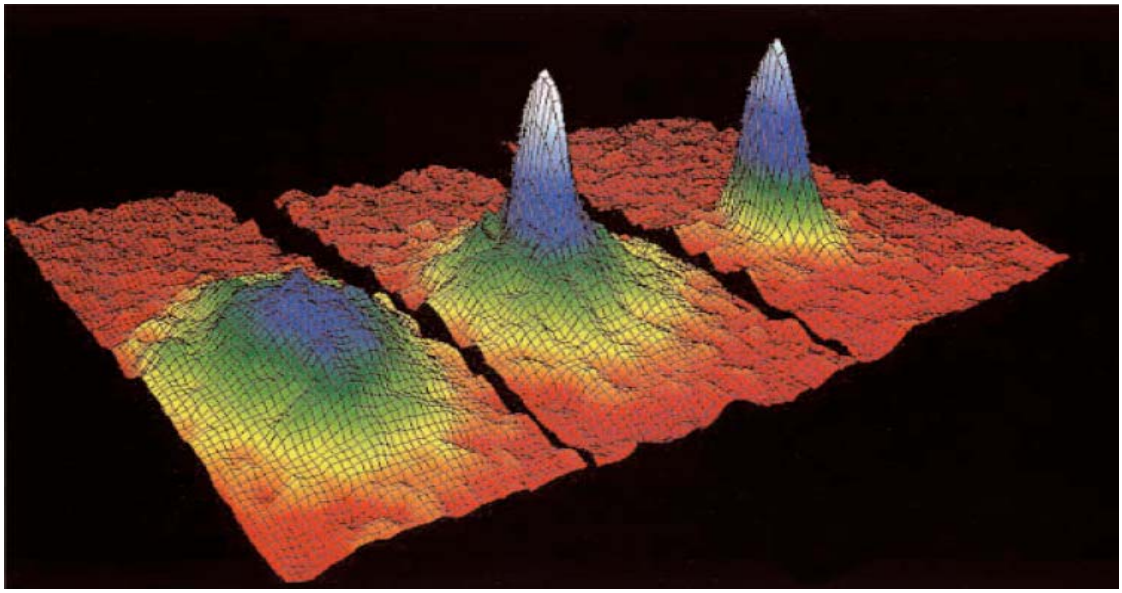
KAYNAKLAR 75

1. GİRİŞ

Bose-Einstein yoğuşması (Bose-Einstein Condensation, BEC) ilk olarak, 1925 yılında Einstein tarafından öne sürüldü. Einstein, Bose'un (1924) fotonlar için yaptığı bir çalışmada geliştirdiği istatistiğin siyah cisim ışımasının istatistik mekaniğini hesapladığını fark etmiştir ve Bose'un fotonlar için kullandığı metotları ayırt edilemez parçacıklar için genelleştirmiştir. Einstein (1925) yaptığı bu çalışmasında etkileşmeyen parçacıklardan oluşan bozon gazının tek bir kuantum durumuna yoğuşabileceğini göstermiştir. Einstein'ın bu hesaplamasından yaklaşık 10 yıl sonra, London'ın (1938) ^{4}He sıvısının düşük sıcaklıktaki süperakışkan davranışın bir BEC davranışı olabileceğini önermesi bu konudaki çalışmalar için önemli bir rol oynamıştır.

BEC olayı deneysel olarak; lazer soğutma, buharlaştırarak soğutma gibi çok düşük sıcaklıklara ulaşılmasını sağlayacak yeni soğutma tekniklerinin gelişmesinden sonra gözlenebilmiştir. BEC olgusu ilk olarak 1995'te manyetik tuzaklarda hapsedilen ve mikrokelvin mertebesine kadar soğutulan ^{87}Rb'de gözlenmiştir (Anderson ve ark. 1995). Şekil (1.1) Anderson ve arkadaşları tarafından gözlemlenen yoğuşmada bozonların sahip olduğu hız dağılımının şeklini göstermektedir. Hız dağılımından atomların oldukça büyük bir kısmının taban durumda olduğu açıkça görülmektedir. Daha sonra benzer tekniklerle ^{85}Rb (Gardner ve ark. 1995), ^{23}Na (Davis ve ark. 1995) ve ^{7}Li (Bradley ve ark. 1995) alkali atomlarının zayıf etkileşimli seyrek gazları ile yapılan deneylerde, termal olarak dağılmış olan bulutun makroskopik olarak tek bir kuantum durumuna geçtiği açık bir şekilde gözlenmiştir. Sonraki yıllarda ^{1}H (Fried ve ark. 1998), ^{14}K (Modugno ve ark. 2001), yarı kararlı ^{4}He* (Santos ve ark. 2001), ^{133}Cs (Weber ve ark. 2003) ve Li_2 molekülünde (Jochim ve ark. 2003) Bose-Einstein yoğuşması elde edilmiştir.

1995 yılındaki deneyler Bose-Einstein yoğuşması için bir dönüm noktası olmuştur. BEC makroskopik ölçekte kuantum mekaniksel özellikleri gösteren tek olgudur. Alkali atomlarla yapılan deneyler, kuantum istatistik mekaniğinin teorik öngörülerinin karşılığı olması nedeniyle oldukça önemlidir. Bu deneyler parçacıkların kuantum davranışlarının makroskopik boyutta araştırılmasını sağlayan eşsiz bir fırsattır. Bu nedenle bozon sistemlerine ve BEC olayına olan ilgi son yıllarda oldukça artmıştır (Pethick ve Smith 2002, Dalfovo ve ark. 1999, DuBois ve Glyde 2003).



Şekil 1.1. Anderson ve ark. (1995) tarafından yapılan deneyde Rubidyum atomlarının hız dağılımının görüntüsü. Soldaki şekil yoğuşma sıcaklığının hemen üstündeki gazın görüntüsü, ortadaki şekil yoğuşmanın henüz başladığı andaki görüntü ve sağdaki şekil buharlaştırarak soğutma yapıldıktan sonra yaklaşık olarak tüm parçacıkların (pure condensate) yoğuşmaya katıldığı durumda elde edilen görüntüdür. Kırmızı renk en az, beyaz renk en fazla olmak üzere, renkler herbir hız dağılımındaki atomların sayısını gösterir (Cornell 1996).

Etkileşimli bozon gazının davranışı ile ilgili öncü teorik çalışmalar 1947 yılında Bogoliubov (1947) tarafından başlatılmıştır. Bogoliubov düşük yoğunluklu, zayıf etkileşimli ve uyarılmış durumdaki atomların sayısının ihmal edilebilir olduğu durum için bir pertürbasyon açılımı geliştirmiştir. Löwdin (1955) ve Penrose ve Onsager (1956) Bose-Einstein yoğuşmasını tek-parçacık yoğunluk matrisinin (OBDM) öz değer ve öz vektörleri (doğal orbitaller) cinsinden formüle etmişlerdir. Bu formülasyonla yoğuşan sistemin özellikleri keyfi bir yoğunluk ve herhangi bir yoğuşma oranı için doğrudan elde edilebilir (DuBois ve Glayd 2003).

Homojen olmayan etkileşimli bozon gazının incelenmesinde genellikle Gross-Pitaevski (GP) denklemi olarak bilinen denklem kullanılır. Bu denklem, Gross (1961) ve Pitaevskii (1961) tarafından birbirinden bağımsız olarak ve farklı teknikler kullanılarak zayıf etkileşimli ve seyrek bozon gazlarını tanımlamak için türetilmiştir.

GP denklemi düşük yoğunluklarda yoğuşmanın ortalama-alan tanımlamasını oldukça iyi verir. GP denklemi zayıf etkileşimli ve uyarılmış durumdaki parçacıkların sayısının ihmal edilebilecek kadar az olduğu sistemlerde bozon gazı için deneysel verilere uygun sonuçlar verir. Bununla birlikte bu teori, parçacıklar arasındaki etkileşimin güçlü olduğu durumlarda önemli derecede zayıflar. Tuzaklanmış bozon gazının daha yüksek yoğunluklardaki özelliklerini belirlemek için Monte-Carlo (MC) simülasyonu gibi doğrudan yaklaşımlar kullanılabilir (Nunes 1999, DuBois ve Glyde 2001).

Etkileşimli gazlar için oldukça yeni ve alternatif bir yaklaşım da yoğunluk fonksiyonelleri teorisidir (DFT). Bu yöntem elektronik sistemlerin taban durum özelliklerinin hesaplanmasında yaygın olarak kullanılan yöntemlerden birisidir. Bu yöndeki ilk teşebbüsler Thomas (Thomas 1926) ve Fermi (Fermi, 1928) tarafında yapılan yaklaşımlardır. Ancak, modern DFT teorisinin temelleri, Hohenberg ve Kohn (1964) tarafından verilen bir teoremle atılmış ve bu teoremin pratik uygulanabilirliği Kohn-Sham denklemleri (Kohn ve Sham 1965) ile sağlanmıştır. Hohenberg, Kohn ve Sham DFT'nin, etkileşimli parçacıkları içeren sistemlerin parçacık yoğunluğunun tek parçacık teorisinden elde edilebileceğini ve sistemin bütün taban durum özelliklerinin bu parçacık yoğunluğuna bağlı olarak belirlenebileceğini göstermişlerdir. Sadece parçacık yoğunluğunun uzaysal dağılımı ile ilgilendiği için DFT yaklaşımı son derece güçlü bir yöntemdir.

DFT başlangıçta fermiyonlar için geliştirilmiş bir teori olmakla birlikte, yapılan çalışmalar etkileşimli bozon gazları için de güçlü bir yaklaşım sağladığını göstermiştir (Nunes 1999, Kim ve Zubarev 2003, Davoudi ve ark. 2003). Ancak, şu ana kadar çok parçacık bozon sistemleri için kullanılan DFT yaklaşımlarında taban durum özellikleri incelenirken sistemdeki bütün bozonların hepsinin en düşük enerjili tek parçacık durumunda yer aldığı, yani sistemin tamamen yoğuşmaya uğradığı kabul edilmiştir. Fakat, hem deneysel sonuçlar (Burt ve ark. 1997, Söding ve ark. 1999, Schuster ve ark. 2001, Köhl ve ark. 2004, Xu ve ark. 2006) hem de teorik hesaplamalar (DuBois ve Glyde 2003, Sakhel ve ark. 2002, Dziarmaga ve ark. 2002, Dziarmaga ve Sacha 2003, Wüster ve ark. 2007) etkileşen bozon sistemlerinde parçacıkların önemli bir kısmının daha yüksek enerjili tek parçacık seviyelerine uyarıldığını ve en düşük enerjili durumdaki parçacık sayısının azaldığını

göstermektedir. En düşük enerjili seviyede bulunan parçacık sayısındaki bu azalma yoğuşmanın zayıflaması (condensate depletion) olarak adlandırılır. Bazı etkileşen sistemler için Varyasyonel Monte Carlo (VMC) ve Difüzyon Monte Carlo (DMC) hesaplamaları kullanılarak seviyelerde bulunan parçacık sayıları elde edilmiştir. Ancak, bildiğimiz kadarıyla çok parçacık bozon sistemleri için her bir enerji seviyesinde bulunan parçacık sayılarını belirlemeye yönelik analitik kapalı bir yaklaşım şimdiye kadar geliştirilmemiştir. VMC ve DMC hesaplamalarının kullanılması ise çok uzun hesaplama süreleri gerektirdiği için çok pratik değildir.

Bu çalışmada bizim temel hedefimiz parçacıklar arasında etkileşimler bulunan çok parçacık bozon sistemlerinde, sistemi tanımlayan tek parçacık enerji seviyelerine karşılık gelen dalga fonksiyonlarını ve bu seviyelerde yer alan parçacık sayılarını belirlemeye yönelik kapalı bir yaklaşım üretmektir. Bu doğrultuda, ileriki bölümlerde Kohn-Sham denklemlerine benzer bir denklemler takımı oluşturulacak buna ek olarak her bir seviyedeki parçacık sayısını belirlemek üzere tamamlayıcı bir denklemler takımı türetilecektir.

Bu denklemler takımı, parçacıklar arasındaki etkileşimlerin bir temas (contact) potansiyeli ile idealize edildiği etkileşen sistemlere uygulanacaktır. Elde edilen sonuçlar çerçevesinde, etkileşen bozon sistemlerinin tanımlanmasında temas potansiyelinin kullanılmasının sistemin tanımlanmasında yeterliliği tartışmaya açılacaktır.

Tezin geri kalanı aşağıdaki gibi düzenlenmiştir: Bölüm 2'de ideal bozon gazlarının incelenmesinde kullanılan teorik yaklaşımlar sunulmuştur. Bölüm 3'de BEC olayının gözlendiği deneysel yöntemler kısaca açıklanmıştır. Bölüm 4'te T=0 sıcaklığındaki etkileşen bozonları içeren bir sistemin BEC olayının incelenmesinde yaygın olarak kullanılan standart matematiksel yaklaşımlar tartışılmıştır. Bölüm 5'te çok parçacık bozon sistemleri için yoğunluk matrisleri ve doğal orbitaller tanımlanmıştır. Bölüm 6'da harmonik bir potansiyelde tuzaklanmış çok parçacık bozon sistemlerinin taban durum özelliklerini incelemek üzere bir yaklaşım geliştirilmiştir. Bölüm 7'de hesaplamalar literatürle karşılaştırılmış ve elde edilen bazı fiziksel sonuçlar incelenmiştir. Bölüm 8'de elde edilen sonuçlarla ilgili bir değerlendirme yapılarak gelecekte planlanan çalışma tartışılmıştır.

2. İDEAL BOZON GAZLARINDA BEC

Bu bölümde ideal (etkileşmeyen) bozon gazlarının genel özellikleri ve kuantum istatistik mekanik yönetemlerinin çok parçacıklı ideal bozon sistemlerine uygulanması ele alınacaktır.

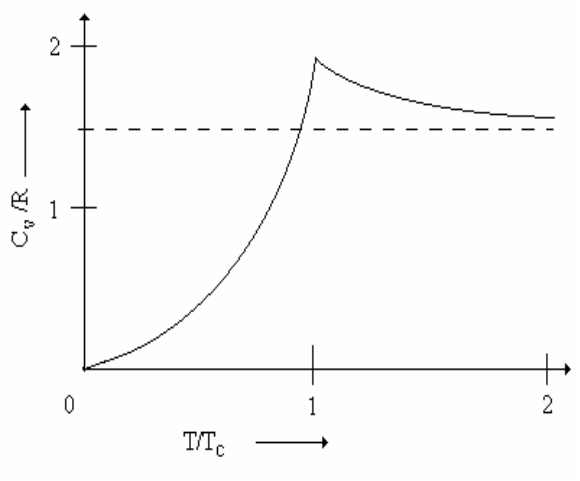
2.1. BOSE-EINSTEIN İSTATİSTİĞİ VE BEC

Kuantum mekaniğinde bir sistemin durumu sistemin dalga fonksiyonu ile tanımlanır. Dalga fonksiyonunun genliğinin karesi sistemin belirli bir durumda bulunma olasılığı ile orantılıdır. Tüm yapısal özellikleri (kütle, elektrik yükü vs.) aynı olan parçacıklar birbirinden ayırt edilemeyeceklerinden iki parçacığın yer değiştirmesi sistemin fiziksel gözlenebilirlerini değiştirmemelidir. Bu temel prensip sebebiyle, kuantum mekaniğinde ayırt edilemez parçacıklardan oluşan bir sistemi tanımlayan dalga fonksiyonlarının parçacıkların birbirleri ile yer değiştirmesi karşısında ya simetrik, ya da anti-simetrik davranış göstermeleri gerekir. Bu nedenle parçacıklar iki grupta incelenebilir:

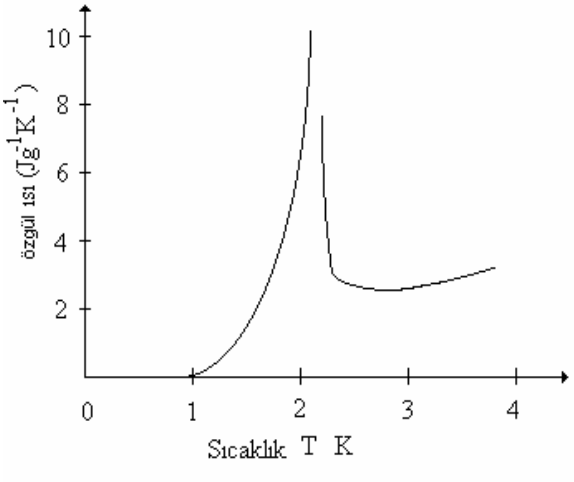
1- Spinleri yarım tam sayı olan parçacıklar fermiyon olarak adlandırılırlar. Örneğin elektron, proton ve nötronun spini 1/2'dir. Bu tür parçacıkların dalga fonksiyonları anti-simetriktir ve Fermi-Dirac istatistiğine uyarlar.

2- Spinleri tam sayı olan parçacıklar bozon olarak adlandırılırlar. Örneğin fotonun spini 1, π-mezonun spini 0'dır. Bu tür parçacıkların dalga fonksiyonları simetriktir ve Bose-Einstein istatistiğine uyarlar.

Yüksek sıcaklıklarda fermiyonların ve bozonların gözlenebilir davranışları arasındaki fark belirgin değildir. Fakat yeterince düşük sıcaklıklara inildiğinde oldukça farklı istatistiksel davranışlar gösterirler. Anti-simetrik dalga fonksiyonunun bir sonucu olarak fermiyonlar, Pauli dışarlama ilkesine uyarak, aynı kuantum durumunda en fazla bir parçacık olacak şekilde yerleşirler. Buna karşın, simetrik dalga fonksiyonuna sahip olan bozonlar, aynı kuantum durumunda herhangi bir sınırlama olmaksızın bulunabilirler.



Şekil 2.1. Sıcaklığın fonksiyonu olarak bozon gazının sabit hacimdeki hesaplanan molar ısı kapasitesi



Şekil 2.2. Doymuş gazı ile bileşik ^{4}He sıvısının ölçülen özgül ısısı

Bose tarafından geliştirilen istatistik ifade, parçacıklar arasında etkileşimin bulunmadığı durumda kritik sıcaklığın altına inildiğinde bir faz geçişi olacağını ve sıcaklığa bağlı olarak parçacıkların büyük bir kısmının taban duruma yerleşeceğini göstermiştir. T=0 °K sıcaklığında bütün parçacıklar taban durumda bulunur. Düşük sıcaklıklarda meydana gelen bu faz değişimi buharın yoğuşmasını andırdığından Bose-Einstein yoğuşması olarak isimlendirilmiştir. Faz geçişinde parçacıkların bireysel özelliklerini kaybettiği ve tüm parçacıkların aynı tek-parçacık kuantum durumunda bulunabildiği düşünülmektedir. Bu durumda seyrek alkali gazlarda gözlenen BEC olayında atomlar bireysel hareketlerini kaybederler ve herhangi bir atomun hareketi diğerlerinden ayrılamaz. Bu nedenle yoğuşmada tüm atomların hareketi ayrı ayrı değil, sanki tüm atomları içeren tek bir büyük atomun hareketi gibi göz önüne alınabilir (Penckwitt 2003).

İdeal bir Bose-Einstein gazı için hesaplanan değerler kullanılarak çizilen Şekil (2.1) ve ^{4}He sıvısı için deneysel değerlerden elde edilen Şekil (2.2) arasındaki benzerlik nedeniyle, London (1938) düşük sıcaklıktaki ^{4}He sıvısının süper akışkan davranışının bir BEC olabileceğini kabul etmiştir. ^{4}He sıvısının lamda geçiş noktasını buna göre hesaplamış (T_c=3,13 °K) ve deneysel verilere oldukça yakın (T_c=2,17 °K)

bir değer elde etmiştir. Süperakışkan ^{4}He sıvısının düşük sıcaklıklardaki davranışı Bose-Einstein yoğuşmasına uygun bir örnektir.

London tarafından ilk olarak önerilen süperakışkanlık ve BEC arasındaki bu benzerlik BEC için gözlenebilir ilk olgu olması nedeniyle oldukça önemli olmasına rağmen çok açık değildir. Bunun nedeni ^{4}He atomları arasındaki etkileşmenin ihmal edilemeyecek kadar büyük olmasıdır. Penrose ve Onsager (1956), ^{4}He atomları arasındaki etkileşmeleri de göz önüne alarak, ^{4}He sıvısından oluşan bir sistem için Bose-Einstein yoğuşmasının matematiksel ifadesini elde etmişlerdir. Sıfır sıcaklıkta yapmış oldukları bu çalışmada süperakışkan sıvı helyumun oldukça küçük bir kısmının (yaklaşık %8) taban durumda bulunabileceğini göstermişlerdir. Yani süperakışkan sıvı helyumda oldukça az sayıda parçacık taban durumu işgal etmektedir ve bu nedenle ^{4}He sıvısındaki yoğuşma açık bir şekilde gözlenememektedir. Modern ölçümlerde bile T=0 için yoğuşma miktarı %7.25 olarak elde edilmektedir (Glyde ve ark. 2000, Sokol 1996). Bununla birlikte ^{4}He sıvısında gözlenen süperakışkanlık BEC olayının gelişmesinde önemli bir rol oynamıştır.

2.1.1. Serbest Parçacık Modeli

Büyük kanonik dağılıma göre T sıcaklığında ε_i enerji seviyesindeki parçacıkların sayısı aşağıdaki şekilde verilir.

$$N_i(\varepsilon) = \frac{1}{\exp((\varepsilon - \mu)/k_B T) - 1} \tag{2.1}$$

burada k_B Boltzman sabiti ve μ kimyasal potansiyeldir. Sistemin toplam parçacık sayısı seviyelerdeki parçacık sayısının toplamıdır.

$$N = \sum_i N_i(\varepsilon) \tag{2.2}$$

Sistem yeterince büyük seçildiğinde enerji seviyeleri birbirine oldukça yakın olacağından Denk. (2.2)'deki toplam integral olarak ifade edilebilir.

$$N = N_0 + \int \frac{g(\varepsilon)}{\exp((\varepsilon-\mu)/k_B T)-1} d\varepsilon \\ = N_0 + N_{ex} \tag{2.3}$$

v hacim olmak üzere, 3-boyutta serbest parçacık modeli için durum yoğunluğu $g(\varepsilon)$ aşağıdaki şekilde tanımlanır.

$$g(\varepsilon) = \frac{v}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\sqrt{\varepsilon} \tag{2.4}$$

Enerji sıfır olduğunda Denk.(2.4) ifadesi sıfır olacağından Denk.(2.3) ile verilen integral sıfır enerjili taban durumda bulunan parçacıkların sayısını içermez. Bu nedenle enerjinin sıfır olduğu duruma karşılık gelen N_0 terimi integralden ayrı olarak göz önüne alınır. Yoğuşma, T_c kritik sıcaklığının altında oluşacağından, T_c sıcaklığındaki parçacık sayısı uyarılmış durumdaki parçacıkların sayısının üst sınırını verir ve μ=0 alınarak bulunabilir. Bu durumda uyarılmış durumlardaki parçacık sayısı için,

$$N_{ex} = \int \frac{g(\varepsilon)}{\exp(\varepsilon/k_B T)-1} d\varepsilon = \frac{v}{4\pi^2}\left(\frac{2mk_B T}{\hbar^2}\right)^{3/2}\int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{\exp(x)-1}dx \\ = 2.612\ v\left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \tag{2.5}$$

ifadesi elde edilir. Burada integrali almak için gama ve Riemann zeta fonksiyonları kullanılmıştır:

$$\int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{\exp(x)-1}dx = \Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\ \zeta\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}\ \ 2.612 \tag{2.6}$$

Sistemin sıcaklığı azaldığında uyarılmış durumdaki parçacıkları sayısı azalırken taban durumdaki parçacıkların sayısı artmaya başlar. Sıcaklık Denk.(2.5)'te verilen uyarılmış durumlardaki parçacık sayısının toplam parçacık sayısına eşitlenmesiyle, yani $N_{ex}(T_c) = N$ şartıyla belirlenen T_c kritik sıcaklığının altına inerse parçacıkların çok büyük bir kısmı taban durumda bulunur yani Bose-Einstein yoğuşması oluşur. Kritik sıcaklık yukarıda verilen şart kullanılarak belirlenebilir:

$$T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B}\left(\frac{N}{2.612\ v}\right)^{2/3} \tag{2.7}$$

Denk. (2.5) ve Denk. (2.7) kullanılarak taban durumdaki parçacıkların sayısının (N_0) ve uyarılmış durumdaki parçacıkların sayısının (N_{ex}), toplam parçacık sayısına oranı sıcaklığın bir fonksiyonu olarak hesaplanabilir.

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} \tag{2.8}$$

$$\frac{N_{ex}}{N} = \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} \tag{2.9}$$

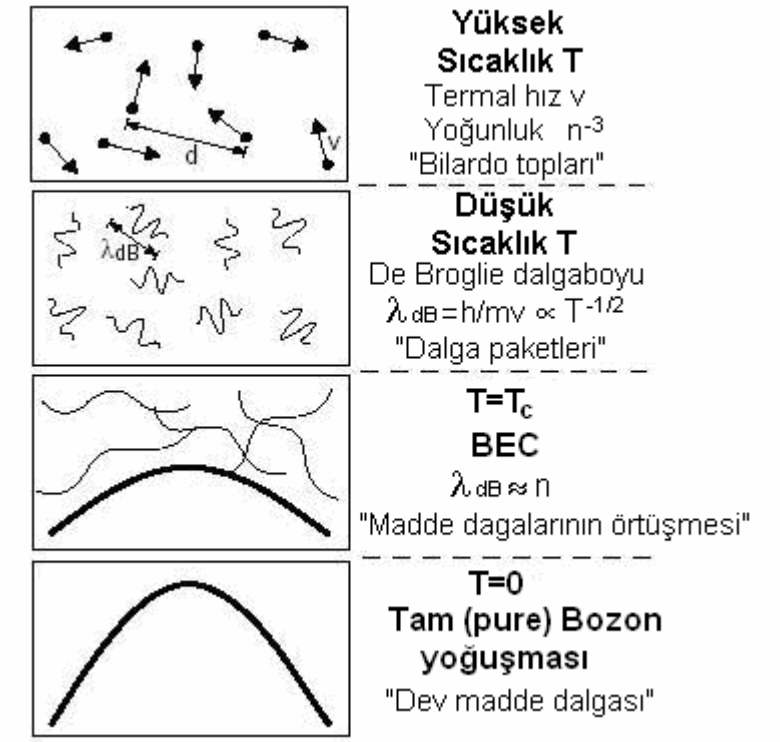
$T>T_c$ için taban durumdaki parçacıkların sayısı ihmal edilecek kadar az sayıda iken, T azalarak T_c'nin altına indiğinde taban durumdaki parçacıkların sayısı hızla artar. Taban durumda parçacıkların enerjileri sıfırdır. Bunlar enerjileri olmadığı için basınca katkıda bulunmaz, momentum taşımadıkları için viskoziteye de katkıları yoktur. Sıfır enerjili taban durumda parçacıkların yoğuştuğu bu süreç Bose-Einstein yoğuşması olarak bilinir. $T<T_c$ için sadece uyarılmış durumlarda bulunan parçacıkların (N_{ex}) enerjisi vardır.

Denk. (2.7)'de $n = N / v$ alınırsa kritik sıcaklık için,

$$n\lambda_{dB}^3 = n\hbar^3\left(\frac{2\pi}{mk_BT}\right)^{3/2} \tag{2.10}$$

elde edilir. Burada, λ_{dB} parçacıkların ortalama termal dalga boyu olarak da tanımlanan de Broglie dalga boyudur. $n\lambda_{dB}^3$ ifadesi sistemin ne kadar yoğun olduğunu tanımlamakta kullanılabilecek uygun bir parametredir. $n\lambda_{dB}^3$ bir mertebesine yaklaştığında sistem klasik davranışından uzaklaşır ve kuantum etkileri gözlenmeye başlar. Denk (2.10) kullanılarak λ_{dB} elde edilebilir:

$$\lambda_{dB} = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_BT}\right)^{1/2} \tag{2.11}$$



Şekil 2.3. Bose-Einstein yoğuşması için şematik bir gösterim. Yüksek sıcaklıklarda zayıf etkileşimli bir gaz 'bilardo topları'ndan oluşan bir sistem gibi davranır. Düşük sıcaklıklarda, atomlar basitçe λ_{dB} genişliğinde dalga paketleri olarak göz önüne alınırlar. BEC geçiş sıcaklığında, λ_{dB} atomlar arasındaki uzaklıkla karşılaştırılabilir büyüklüktedir. Sıcaklık sıfıra yaklaştığında, termal bulut ortadan kaybolur ve tam (pure) bozon yoğuşması kalır.

Yüksek sıcaklıklarda λ_{dB} oldukça küçük olduğundan, atomların birbirleri ile etkileşmeleri ihmal edilebilecek kadar küçüktür ve gaz klasik bir davranış sergiler. Şekil (2.3)'te şematik olarak gösterildiği gibi, atomlar arasındaki etkileşimlerin zayıf olduğu seyrek gaz limitinde sistemdeki atomlar 'bilardo topları' gibi düşünülebilir. Düşük sıcaklıklarda de Broglie dalga boyu λ_{dB} artmaya başlar ve gazdaki atomlar λ_{dB} mertebesinde genişliği olan 'dalga paketleri' olarak göz önüne alınabilir. T_c kritik sıcaklıklığında atomlar arasındaki uzaklık λ_{dB} dalga boyu ile karşılaştırılabilir büyüklüktedir ve bu sıcaklıkta atomik dalga paketleri üst üste binmeye başlar. T_c sıcaklıklığında bozonlarda bir faz geçişi gözlenir ve BEC oluşmaya başlar. Sıcaklık

sıfıra yaklaştığında uyarılmış atomlardan oluşan termal bulut ortadan kaybolur ve tüm atomlar aynı kuantum durumuna yerleşir. Bu durumda sistem büyük tek bir madde dalgası ile temsil edilebilir.

2.1.2. Harmonik Osilatör Modeli

Alkali atomlarla yapılan BEC deneylerinde bozon gazı, genellikle bir tuzakta tutulur. Tuzağın merkezindeki sınırlayıcı potansiyeli tanımlamak için harmonik osilatör potansiyel modeli kullanmak genellikle iyi bir yaklaşımdır. Bu nedenle Bose-Einstein yoğuşmasının hesaplanmasında sıklıkla başvurulan yöntemlerden birisi 3-boyutlu harmonik-osilatör potansiyelinin kullanıldığı modeldir. Etkileşimsiz bozonlar için dışarıdan uygulanan bir anizotropik harmonik-osilatör potansiyeli,

$$V = \frac{m}{2}(\omega_1^2 x^2 + \omega_2^2 y^2 + \omega_3^2 z^2) \tag{2.12}$$

şeklinde tanımlanır. Burada, ω_i 'ler her bir doğrultudaki salınım frekanslarıdır.

Parçacık-parçacık etkileşimleri ihmal edildiğinde, çok parçacık hamiltonyeni tek parçacık hamiltonyenlerinin toplamı şeklinde yazılabilir. Bir anizotropik harmonik osilatör potansiyelinde tuzaklanmış ideal bozon gazının enerji öz değerleri aşağıdaki şekildedir.

$$\varepsilon(n_1, n_2, n_3) = \left(n_1 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_1 + \left(n_2 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_2 + \left(n_3 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_3 \tag{2.13}$$

Burada n_i sıfıra eşit, ya da sıfırdan büyük tüm tamsayı değerlerini alabilir.

Uyarılmış seviyelerde bulunan parçacıkların sayısı Bose-Einstein dağılımı kullanılarak bulunabilir.

$$N_{ex} = \int_0^\infty \frac{g(\varepsilon)}{\exp((\varepsilon - \mu)/k_B T) - 1} d\varepsilon \tag{2.14}$$

Burada $g(\varepsilon)$ durum yoğunluğudur ve 3-boyutta tuzaklanmış bir sistem için,

$$g(\varepsilon) = \frac{\varepsilon^2}{2\hbar^3 \omega_1 \omega_2 \omega_3} \tag{2.15}$$

şeklindedir. Burada yoğunluğun enerji ile orantılı olduğu açıkça görülmektedir. T_c geçiş sıcaklığı için $\mu=0$ alınırsa toplam parçacık sayısı uyarılmış parçacık sayısı olarak alınabilir.

$$N = N_{ex}(T_c, \mu = 0) = \int_0^\infty \frac{g(\varepsilon)}{\exp(\varepsilon / k_B T_c) - 1} d\varepsilon \tag{2.16}$$

Denk. (2.15) ifadesi ile tanımlanan durum yoğunluğu Denk. (2.16)'de yerine konulursa ve $x = \varepsilon / k_B T_c$ boyutsuz değişkeni tanımlanırsa toplam parçacık sayısı için;

$$\mathrm{N} = \mathrm{C}_3 (\mathrm{k_B T_c})^3 \int_0^\infty \frac{\mathrm{x}^2}{\exp(\mathrm{x}) - 1} \mathrm{dx} = \mathrm{C}_3 \Gamma(3) \zeta(3) (\mathrm{k_B T_c})^3 \tag{2.17}$$

elde edilir. Burada $\Gamma(3)$ gama fonksiyonu ve $\zeta(3)$ Riemann zeta fonksiyonudur. C_3 katsayısı 3-boyutlu harmonik bir osilatör için aşağıdaki şekilde verilir.

$$C_3 = \frac{1}{2\hbar^3 \omega_1 \omega_2 \omega_3} \tag{2.18}$$

Buradan kritik sıcaklık değeri,

$$\mathrm{k_B T_c} = \left(\frac{\mathrm{N}}{\mathrm{C}_3 \Gamma(3) \zeta(3)} \right)^{1/3} \tag{2.19}$$

olarak bulunur. 3-boyutlu harmonik osilatör potansiyeli için Denk. (2.19) kullanılarak geçiş sıcaklığı için

$$k_B T_c = \frac{\hbar \varpi N^{1/3}}{[\zeta(3)]^{1/3}} \approx 0.94 \hbar \varpi N^{1/3} \tag{2.20}$$

ifadesi elde edilir. Burada ϖ aşağıdaki şekilde tanımlanmıştır:

$$\varpi = (\omega_1\, \omega_2\, \omega_3)^{1/3} \tag{2.21}$$

Uyarılmış durumlardaki toplam parçacık sayısı μ=0 alınarak bulunabilir:

$$N_{ex} = C_3 \int \frac{\varepsilon^2}{\exp(\varepsilon / k_B T) - 1} d\varepsilon = C_3 \Gamma(3)\zeta(3)(k_B T)^3 \tag{2.22}$$

Bu integral Gama ve Riemann zeta fonksiyonları kullanılarak hesaplanabilir. Denk (2.22) ve Denk (2.20) birlikte değerlendirildiğinde herhangi bir T sıcaklığındaki uyarılmış parçacıkların sayısı N_{ex} için elde edilen ifade oldukça kullanışlıdır:

$$N_{ex} = N\left(\frac{T}{T_c}\right)^3 \tag{2.23}$$

Burada yoğuşan parçacıkların sayısı

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^3 \tag{2.24}$$

olarak bulunur. $T>T_c$ için taban durumdaki parçacıkların sayısı ihmal edilir. T azalarak T_c'nin altına indiğinde taban durumdaki parçacıkların sayısı hızla artar. Taban durumdaki parçacıkların enerjileri ($n_1 = n_2 = n_3 = 0$) alınarak bulunur. $T<T_c$ için sadece uyarılmış parçacıkların (N_{ex}) enerjisi vardır.

Etkileşimlerin dikkate alınmadığı ideal gaz için, harmonik osilatör modeli kritik sıcaklık değerlerinin hesaplanmasında deneycilere yol göstermiştir. JILA ve MIT araştırma enstitülerindeki gruplar tarafından yapılan ilk deneylerde kritik sıcaklıklar için benzeri sonuçlar bulunmuştur. Ancak deneysel ve teorik çalışmaların daha iyi karşılaştırılabilmesi için iki temel etki göz önüne alınmalıdır: 1- Gerçekte oldukça sınırlı sayıda parçacık kullanılmaktadır, 2- Parçacıklar birbirleriyle etkileşmektedirler. Bunların da dikkate alındığı çalışmalar son yıllarda oldukça artmıştır.

2.2. BİR VE İKİ-BOYUTLU SİSTEMLER

Buraya kadar 3-boyutlu sistemlerde ideal bozon gazının özellikleri tartışıldı. Çok fazla serbestlik derecesi içermesi nedeniyle 3-boyutlu sistemlerin fiziksel özelliklerinin matematiksel olarak hesaplanması ancak belirli yaklaşımlar altında yapılabilir ve bilgisayarda oldukça fazla zaman alır. 1 ve 2- boyutlu sistemler çok daha az serbestlik derecesi içermesi nedeniyle hesaplamalarda büyük kolaylık sağlar. 1 ve 2-boyutlu bozon gazından oluşan sistemlerin incelenmesi kolay hesaplama yapılabilen bir çok durumun göz önüne alınabilmesine imkan verirken aynı zamanda boyutun öneminin anlaşılmasını da sağlar.

Termal dalgalanmalar yoğuşmayı kararsızlaştırdığı için sonlu sıcaklıklardaki homojen gazlarda 1 ve 2-boyutlu sistemlerde BEC olayı gözlenmez. Bu sistemlerde BEC olayının olmaması etkileşimli homojen bozon gazından oluşan sistemler için kanıtlanmıştır (Hohenberg, 1967). Homojen olmayan 1-boyutlu harmonik osilatör durumunda Denk.(2.22) ile verilen integral logaritmiktir. Yani $N\omega_{1D}$'nin sonlu kalabilmesi için 1-boyutlu BEC için kritik sıcaklığın sıfıra gitmesi gerekir. Denk.(2.22) kullanılarak, harmonik bir potansiyel içinde bulunan 1-boyutlu ideal bozon gazı için kritik sıcaklık değeri,

$$k_B T_{1D} = \hbar \varpi_{1D} \frac{N}{\ln(2N)} \qquad (2.25)$$

elde edilir. Burada $\varpi_{1D} = \omega_1$ olarak verilmiştir. Termodinamik limitte bir yoğuşma gözlenememesine rağmen büyük N değerlerinde parçacıkların çoğunluğu taban durumda bulunmaktadır (Ketterle ve van Druten 1996).

Tek boyutta yoğuşmanın deneysel olarak gözlenebilmesi için, 3-boyutlu bir tuzak bir yönde yeterince uzatılır. Böylece 1-boyutlu olarak göz önüne alınabilen bir tuzak oluşturulur (Lieb ve ark. 2003). N'nin büyük değerlerinde, sıcaklık kritik sıcaklık olan T_{1D}'nin altına indiği zaman eksene bağlı değişkenler donmuş olacağından BEC olayı makroskopik olarak gözlenir (Mullin 1996).

Harmonik tuzaktaki bir sistemde termal dalgalanmaların etkisi durum yoğunluğunun gösterdiği farklı davranış tarafından bastırılır. Bu nedenle Harmonik

potansiyelde tuzaklanmış 2-boyutlu bozon gazında sıfırdan farklı sıcaklıklarda da yoğuşma gözlenebilir. Harmonik potansiyeldeki bir gazın durum yoğunluğu iki boyutlu bir sistem için $g(\varepsilon) \propto \varepsilon$ olur. Denk. (2.22)'de μ=0 alınırsa kritik sıcaklık için integral değeri,

$$k_B T_{2D} = \hbar \varpi_{2D} \left(\frac{N}{\zeta(2)} \right)^{1/2} \tag{2.26}$$

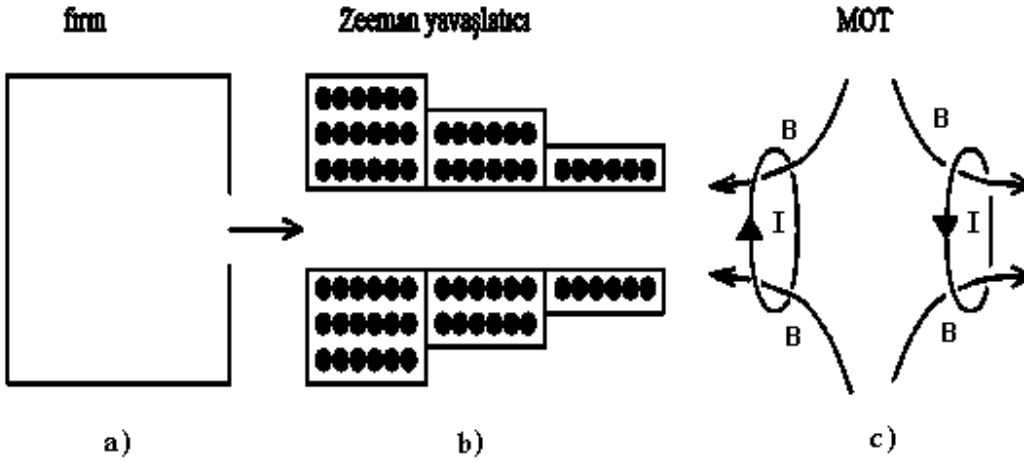
elde edilir. T_{2D} iki boyutlu sistem için kritik sıcaklık, $\varpi_{2D} = (\omega_1 \omega_2)^{1/2}$ olarak tanımlanmıştır. $\zeta(2)$ sabit bir sayı olduğundan $N \to \infty$ iken denklemin sağ tarafının sınırlı bir değerde kalması için $\omega_{2D} \to 0$ olur. 3-boyutlu sistemlerde tuzak bir yönde oldukça daraltılırsa elde edilen yapı iki boyutlu bir sistem gibi davranacaktır. Bu şekilde 2-boyutlu BEC olayını gözlemek mümkün hale gelecektir (Dalfovo ve ark. 1999, Mullin 1997). Tanatar ve Erkan (2000), güçlü-etkileşime sahip iki gaz karışımının 1-boyuttaki özelliklerinin, zayıf etkileşen 3-boyutlu iki gaz karışımına benzediğini göstermiştir. Etkileşimli iki boyutlu bozon gazında gözlenen faz geçişi Berenzinsky-Kosterlitz-Thouless geçişi olarak bilinir (Berezinsky 1971, Kosterlitz ve Thouless 1973).

3. DENEYSEL YÖNTEMLER

Atomlar arasındaki uzaklık termal de-Broglie dalga boyu mertebesinde olacak şekilde kritik sıcaklığın altına kadar soğutulabilen bozon gazında Bose-Einstein yoğuşması oluşur. Kritik sıcaklığın altına kadar soğutulan gazda bir faz geçişi olacağı Einstein (1925) tarafından matematiksel olarak hesaplanmıştır. BEC'in deneysel gözlenmesi, yoğuşmanın oluşması için gerekli olan yeterince düşük sıcaklıklara inilemediğinden, Einstein'ın hesaplamalarından 70 yıl sonra, 1995 yılında gerçekleştirilebilmiştir. 80'li yıllarda geliştirilen lazerle soğutma tekniklerinin kullanılarak nötral atomların soğutulabileceğinin keşfedilmesi (Chu ve ark. 1985, Chu 1997, Adams ve Riis 1997) ile atomlar 100 μK mertebesine kadar soğutulabilmiştir. Fakat bu sıcaklık da yoğuşmanın gözlenebilmesi için yeterince düşük değildi. Lazerle soğutmaya ilave olarak buharlaştırarak soğutma yönteminin sisteme eklenmesi ile yoğuşmanın gözlenebileceği yeterince düşük sıcaklıklara inmek mümkün olmuştur ve yoğuşmanın deneysel gözlenmesi gerçekleşmiştir.

Alkali atomlarla yapılan BEC deneylerinde kullanılan standart bir deney düzeneği Şekil 3.1'de verilmiştir. BEC olayının gözlendiği deneysel süreçler birbirine oldukça benzerdir: Önce, atomlar bir fırında buharlaştırılır, fırından çıkan atom demeti zıt yönlü bir lazer demeti ve konuma bağlı uygun bir manyetik alan kullanılarak oluşturulan Zeeman yavaşlatıcısı ile yavaşlatılır. Yavaşlatılan atomlar vakum içerisinde manyetik tuzaklarda tuzaklanır, tuzaklanan gaz tekrar lazerle soğutulur ve son aşamada tüm lazerler kapatılarak buharlaştırma yöntemi ile soğutulur. Son olarak CCD (Charge-coupled device) kameralarla görüntülenir (Hodby 2002, Streed ve ark. 2006).

Lazerle nötral atomların hızlarının ve konumlarının kontrol edilebilmesi sonucunda atomlar oldukça düşük sıcaklıklara kadar soğutulabilmektedir. 383 K sıcaklığındaki bir fırından 334 ms^{-1} hıza sahip olarak alınan bir ^{87}Rb atom demetinin hızı Zeeman yavaşlatıcısında 43 ms^{-1}'e kadar düşürülebilmektedir (Streed 2006).

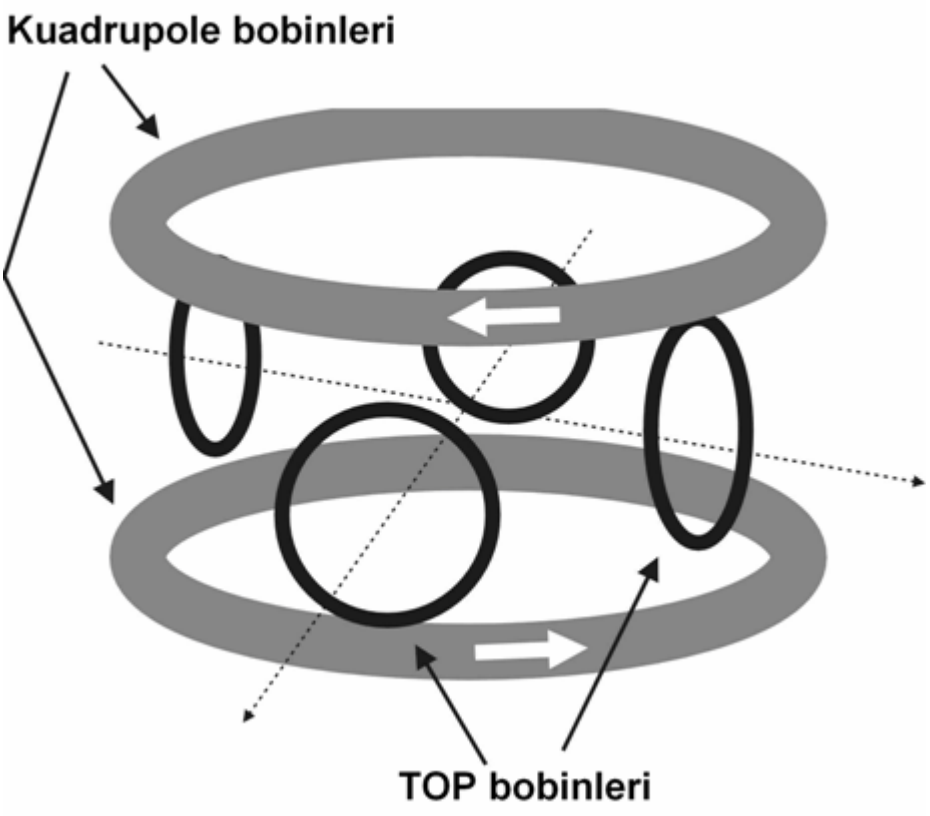


Şekil 3.1. Alkali atomların tuzaklanmasında ve soğutulmasında kullanılan deney düzeneği (Pethick ve Smith, 2002).

3.1. TUZAKLAR

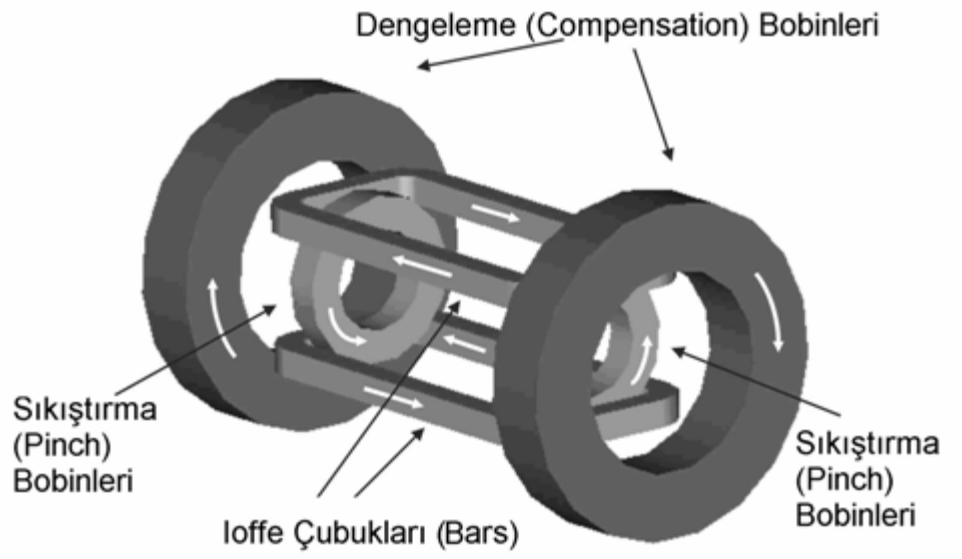
3.1.1. Manyetik Tuzaklar

Manyetik bir tuzak oluşturulurken ya yerel bir minimum ya da yerel bir maksimum oluşacak şekilde manyetik alan tasarlanır. Elektrik akımının bulunmadığı bir bölgede manyetik alan maksimum olamaz. Bu nedenle atomlar sadece manyetik alanın minimum olduğu bölgelerde tuzaklanabilir yani sadece spinleri alan yönünde olan atomlar tuzakta tutulabilir. Şekil (3.1c)'de alkali atomların tuzaklanmasında kullanılan bir manyetik tuzak için manyetik alan çizgileri gösterilmektedir. Şekilde açıkça görüleceği gibi tuzağın içindeki manyetik alan uzaysal olarak değişmektedir. Manyetik alan, kendisiyle aynı yönde yönelmiş spini olan bir atomun enerjisinde $-\vec{\mu}\cdot\vec{\mathbf{B}}$ büyüklüğünde bir potansiyel enerji artışına neden olur. $\vec{\mu}$ manyetik momentinin $\vec{\mathbf{B}}$ doğrultusundaki bileşeni pozitif ise atomlar yüksek manyetik alan bölgesine, negatif ise düşük manyetik alan bölgesine itilir. Laboratuarlarda oluşturulan manyetik alanın genellikle 1 tesladan daha az olması nedeniyle, bir tuzağın derinliği 1 kelvinden daha azdır. Bu nedenle atomların manyetik alanda tuzaklanabilmesi için, tuzaklanmadan önce tuzak derinliği mertebesinde soğutulması gerekir.



Şekil 3.2. Zamanla-dönen potansiyel (Time-orbiting potential TOP) kullanılarak oluşturulan tuzak.

Manyetik alanda minimumu olan en basit manyetik tuzak, Şekil (3.2)'deki gibi akım yönleri birbirine zıt olan ve karşılıklı yerleştirilmiş bir çift Helmholtz bobininden oluşan kuadrupol tuzaktır. Bu iki bobin arasında simetrik bir manyetik alan oluşur. Simetrik alan nedeniyle göreceli olarak yavaş hareket eden atomların spinleri hep aynı yönde bulunur. Bu basit yapılandırmanın en önemli dezavantajı merkezde manyetik alanın sıfır olmasıdır. Atomlar manyetik alanın sıfır olduğu bu bölgeden geçerken spin yönelimlerini kaybederler ve spinleri manyetik alana zıt da yönelebilir. Bu durumda atomlar manyetik alanın büyüklüğünün yüksek olduğu bölgeye yöneleceklerinden tuzaktan atılırlar yani sistemde bir tür delik oluşur. Merkezdeki delikten kurtulmak için genellikle zamanla-dönen potansiyel (TOP) kullanılarak oluşturulan tuzaklar veya Ioffe-Pritchard tipi tuzaklar kullanılır (Gott ve ark. 1962, Pritchard 1983).



Şekil 3.3. Ioffe-Pritchard tuzağı

Zamanla-dönen potansiyel (TOP), kuadrupol tuzak üzerine dönen bir manyetik alan oluşturmak için Şekil (3.2)'de görüldüğü gibi dört adet daha bobin eklenmesiyle oluşturulur. Bobinler büyüklüğü değişmeyen fakat dönen bir manyetik alan oluşturur. Bu geometrinin oluşturulabilmesi için manyetik alan x yönünde $B_0 \cos(\omega t)$ ve y yönünde $B_0 \sin(\omega t)$ olarak seçilir. Bu şekilde seçilen TOP bobinlerinden elde edilen manyetik alan merkezde oluşan deliğin sürekli hareket etmesini sağlar. Oluşturulan bu alanın frekansı manyetik altdurumlar arasındaki geçiş frekansları ile karşılaştırılabilecek kadar küçük seçilir. Böylece atomlar diğer üst durumlara geçemez ve tuzakta kalırlar. Eğer bu frekans atomun hareketinden çok büyük seçilirse atom tuzaktan kaçabilecek enerjiyi elde edebilir. Bu frekans atomun hareketinden çok küçük seçilirse atom spin yönelimini değiştirebilir ve tuzaktan kaçabilir.

Şekil (3.3), merkezdeki delikten kurtulmak için kullanılan manyetik tuzak yapılarından biri olan Ioffe-Pritchard tuzağını gösterir. Bir karenin köşelerine yerleştirilmiş 4 paralel Ioffe çubuğundan ve bir çift Helmholtz bobininden oluşur. Ioffe çubukları radyal yöndeki sınırları oluştururken Helmholtz bobinleri eksenel yöndeki sınırları oluşturur. Helmholtz bobinlerinden geçen akım, kuadrupol tuzaktakinin aksine aynı yöndedir. Sıkıştırma bobinleri ve Ioffe çubukları sayesinde

atomlar sıkı bir şekilde tuzaklanır Ioffe-Pritchard tuzağı yaklaşık olarak harmonik bir potansiyelle temsil edilebilen oldukça güçlü harmonik bir tuzaktır. Tuzakta oluşan harmonik potansiyel,

$$V = A\omega^2(x^2 + y^2) + B\omega^2 z^2 \qquad (3.1)$$

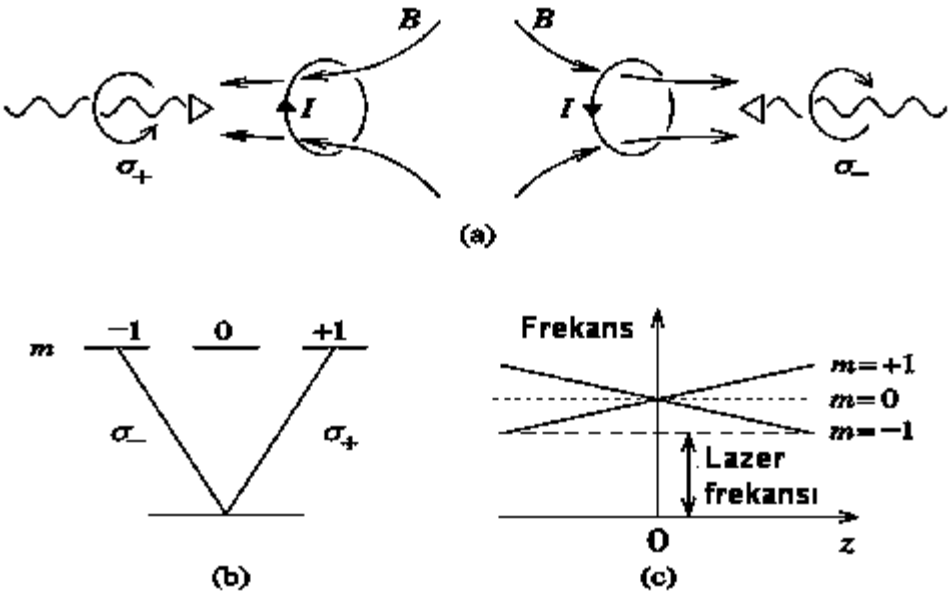
şeklindedir. (Ernst ve ark. 1998-I, Ernst ve ark. 1998-II, Volz ve ark. 2003, Streed ve ark. 2006).

3.1.2. Optik Tuzaklar

Lazer demeti kullanılarak uzayda maksimum yoğunluğa sahip radyasyon alanı oluşturulabilir. Lazer kullanıldığında taban durumdaki alkali atomlar manyetik altdurumlardan bağımsızdır. Manyetik alanda tuzaklanan atomlar manyetik alanla etkileştiğinden manyetik altdurumlara güçlü bir şekilde bağlıdır ve sadece minimum alan arayan yönelimler tuzaklanabilir. Optik tuzaklarda ise herhangi bir spin yönelimine sahip atomlar tuzaklanabilir.

Parçacıklararası etkileşimlerin sonucunda oluşan rezonans bölgesinde atom, manyetik alanla güçlü bir şekilde etkileşir. Rezonans bölgesinde atomun manyetik alanla etkileşmesinden kurtulmak için manyetik alanın homojen olması tercih edilir. Optik tuzakların önemli bir avantajı, manyetik tuzaklarda oluşturulamayan homojen manyetik alanının optik yöntemlerle elde edilebilmesidir. (Pethick ve Smith 2002).

Manyetik tuzak kullanıldığında atom bulutunun etkileşim enerjisinin spin serbestlik derecesine etkisini incelemek oldukça zordur. Optik tuzaklarda homojenlik sağlanabildiğinden tüm spin yönelimleri tuzaklanabilir ve bu etkiyi incelemek için oldukça uygundur. Spinor yoğuşma olarak bilinen birden fazla spin yönelimini içeren bu durumlar optik tuzaklar kullanılarak incelenebilir (Penckwitt 2003).



Şekil 3.4. a) Magneto-optik tuzak. **b)** uygun geçişler. **c)** uzaysal olarak değişen manyetik alandan etkilenen atomik geçişler.

Optik tuzaklar BEC olayını gözlemlemek için son zamanlarda yaygın olarak kullanılan bir yöntemdir. Optik tuzaklarda çok büyük etkileşim parametrelerine çıkılabilmektedir. Jochim ve arkadaşları (2003) optik tuzakta tuzaklanmış Li_2 molekülü ile yapmış oldukları bir çalışmada $a \approx -3500\,a_0$ saçılma uzunluklarına kadar çıkmışlardır. Optik tuzaklar 1 ve 2-boyutlu tuzakların oluşturulmasında ve düşük-boyutlu BEC sistemlerinin incelenmesinde de yaygın olarak kullanılmaktadır (Pedri ve ark. 2001, Meyrath ve ark. 2005).

3.1.3. Magneto-Optik Tuzaklar

Alkali atomlarla yapılan deneylerde Magneto-Optik Tuzakların (MOT) kullanımı oldukça yaygındır. Sadece atomları tuzaklamakta değil aynı zamanda soğutma işleminde de kullanılır. Homojen olmayan manyetik alan nedeniyle atomun frekansı konuma bağlı olduğundan geniş bir aralıkta hız dağılımına sahip atomların soğutulması da mümkün olmaktadır.

Magneto-optik tuzaklar lazer ve uzaysal olarak değişen manyetik alanın birlikte kullanılması ile oluşturulur. Atomik enerji seviyeleri manyetik alana, radyasyon basıncı ise yöne bağlıdır. Manyetik alanı z ekseni yönünde olan kuadrupol bir tuzak göz önüne alındığında, z yönündeki manyetik alan lineer olur. Uyarılmış durumların manyetik altdurumları m kuantum sayısı ile belirlenir. Yoğunluğu ve frekansı birbirine eşit ve ilerleme yönüne göre saat yönünde dairesel kutuplanmış lazer ışınımları pozitif ve negatif z yönünde gönderilir. Şekil (3.4b)'de görüldüğü gibi sağ taraftan gelen lazer ışınımı atomları (σ_+) taban durumdan m=+1 durumuna uyarırken, sol taraftan gelen lazer ışınımı (σ_-) taban durumdan m= -1 durumuna uyarır. Kırmızıya kayan bir lazer ışınımı kullanılırsa Şekil (3.4c) de görüldüğü gibi z=0 noktasında her iki lazer ışınımı da atom tarafından eşit miktarda soğurulduğu için atom üzerinde net bir radyasyon gücü oluşmaz. Atom pozitif z konumundayken geçiş frekansı $m=-1$ altdurumuna inerken negatif z konumunda $m=+1$ altdurumuna iner ve lazer frekansına yaklaşır. Bunun sonucunda atomlar negatif z bölgesinde hareket ederken (σ_-) fotonlarının soğurma oranında bir artma oluşur. Pozitif z bölgesinde hareket ederken (σ_+) fotonlarının soğurma oranında bir artma oluşur. Her iki geçiş de aynı frekanstadır ve orijine doğru bir zorlama olur. Altı yönde lazer kullanılarak 3-boyutlu tuzaklar da yapılabilir (Pethick ve Smith 2002).

MOT tuzaklar ile uygulanan diğer bir yöntemde, ikinci bir MOT daha kullanılır. İkinci MOT'un basıncı birinci MOT'unkinden daha düşüktür. Birinci MOT doğrudan fırından buharı alır, lazerle 100 μK mertebesine kadar soğutur ve diğerine aktarır. Yeterli sayıda atom (genellikle 10^{10}) birinci MOT'ta toplanınca ikinci MOT açılır ve lazer kapatılır. Atomlar sadece manyetik tuzakla tutulur. İkinci MOT'un tuzak derinliği, enerjisi fazla olan atomların tuzaktan ayrılabileceği şekilde ayarlanır. Bu nedenle göreli olarak enerjisi fazla olan atomlar tuzaktan ayrılır. Tuzakta enerjisi daha düşük atomlar kalır. Bu yöntemle 1 μK civarlarına kadar soğutma sağlanır. Bu yöntem buharlaştırarak soğutma olarak bilinir. Kritik sıcaklığın altında Bose-Einstein yoğuşması başlar. Sıcaklık düştükçe taban durumdaki atomların sayısı hızla artar.

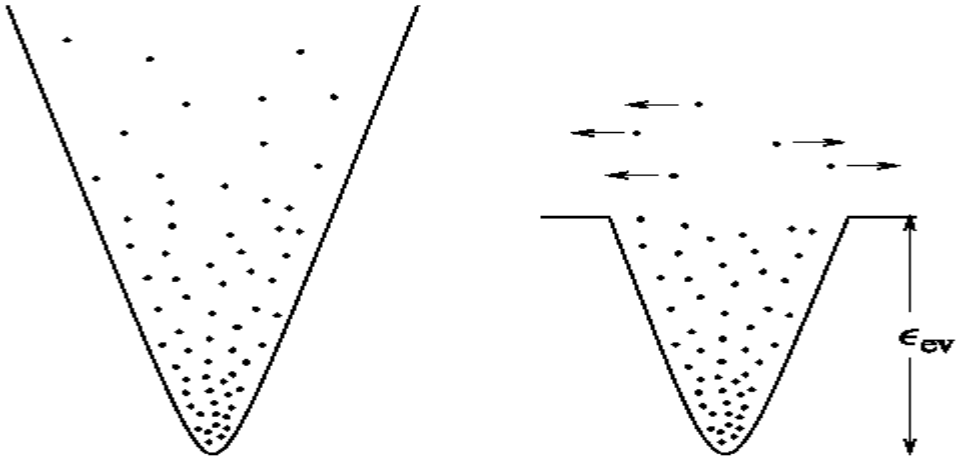
3.2. SOĞUTMA YÖNTEMLERİ

3.2.1. Lazerle Soğutma

Bose-Einstein yoğuşması deneylerinin yapılabilmesi için gerekli olan çok düşük sıcaklıklara ulaşmak, 1980 lerde nötral atomların lazerle soğutma tekniklerinin gelişmesinden (Chu ve ark. 1985, Chu 1997) sonra mümkün olmuştur. Lazerle soğutma BEC deneylerinin hepsinde kullanılan bir yöntemdir. Bu yöntemde, aynı açısal frekansa ve aynı şiddete sahip iki lazer demeti birbirine zıt olacak şekilde yerleştirilir. Lazer demetinin frekansı, kullanılan gazın uyarılma durumu ile taban durum arasındaki atomik geçiş frekansı aralığında seçilir.

Hareketsiz bir atom, sağdan soğurduğu foton kadar soldan da foton soğuracağından toplam momentum değişiminin ortalaması sıfırdır. Bununla birlikte sağ tarafa v_z hızıyla ilerleyen bir atom sol taraftan gelen fotonlardan uzaklaşır. Doppler kayması nedeniyle atom lazerin frekansını olduğundan daha düşük görür. Seçilen lazer frekansı bu aralıkta olduğundan, sol taraftan gelen lazer demeti sağ tarafa hareket eden atomlardan enerji soğurur. Böylece atomun hızı yani enerjisi azalır. Sol tarafa hareket eden atomlar, sağdan gelen lazer demetinin frekansını daha yüksek göreceklerinden, etkilenmezler. Aynı şekilde soldan gelen lazer sola hareket eden atomları soğuturken sağa hareket eden atomları etkilemez.

BEC deneylerinde lazerle soğutma yöntemine uygun olmaları nedeniyle alkali atomlar tercih edilir. Bu atomların optik geçişleri lazer ışınlarına oldukça uygundur ve oldukça düşük sıcaklıklara kadar soğutulabilir. Bu yöntemle alkali atomlar için 100 μK mertebesindeki sıcaklıklara kadar inilebilir (Pethick ve Smith 2002).



Şekil 3.5. Buharlaştırarak soğutma. ϵ_{ev} enerjisi buharlaştırma için başlangıç değeridir.

3.2.2. Buharlaştırarak Soğutma

Lazerli soğutma ile oldukça düşük sıcaklıklara kadar inilebilmesine rağmen Bose-Einstein yoğuşmasının deneysel olarak gözlenebilmesi için yeterli değildir. Şu ana kadar alkali gazlarla yoğuşmanın gözlendiği deneylerde, yoğuşma sıcaklığına ulaşabilmek için lazerli soğutma yapıldıktan sonra buharlaştırarak soğutma tekniği kullanılmıştır. Şekil (3.5)'te şematik olarak verildiği gibi tuzağın derinliği, enerjisi göreceli olarak diğerlerinden fazla olan atomların tuzaktan kaçabileceği şekilde ayarlanır. Böylece sistemden enerji alarak ortalama enerjinin üstünde bir enerjiye sahip olan atomlar sistemden uzaklaştırılır. Enerjisi fazla olan atomların uzaklaştırılması ile yoğuşmanın gözlenebileceği kadar düşük sıcaklıklara ulaşmak mümkündür.

4. ETKİLEŞEN SİSTEMLERDE BEC

Bu bölümde, Bose-Einstein yoğuşmasını açıklamak için kullanılan geleneksel yöntemler tartışılacaktır. 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. GP düşük yoğunlukta yoğuşan atomların fazla olduğu durumlarda, BEC olayının ortalama-alan teorisini oldukça iyi tanımlar (Pitaevskii 1961, Gross 1961). Sonlu sıcaklıklarda yoğuşmayan parçacıkların etkileri Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) denklemleri kullanılarak incelenebilir. HFB teorisi yoğuşmayan parçacıkların etkilerinin incelenmesinde de kullanılan önemli bir yaklaşımdır (Holzmann ve ark. 1999).

Çok parçacıklı sistemlerin simülasyonunda kullanılan Kuantum Monte Carlo (QMC) yöntemleri, Bose-Einstein yoğuşmasının özelliklerinin hesaplanmasında da yaygın olarak kullanılmaktadır. QMC bozon sistemlerinde enerji, yoğunluk dağılımı, süperakışkan yoğunluğu gibi birçok fiziksel özelliklerin hesaplanmasında kullanılmıştır ve şu ana kadar yapılan deneylerle uyumludur (Ceperley 1995, Giorgini ve ark. 1999; Krauth 1996).

Bose Einstein yoğuşmasının incelenmesinde kullanılan bir diğer yöntem de DFT dir. DFT genellikle fermiyonlardan oluşan sistemlerin elektronik yapılarının özelliklerinin hesaplanmasında yaygın olarak kullanılan bir yöntemdir (von Barth 2004). Fizikte ve kimyada çok atomlu sistemler için oldukça kullanışlıdır ve pratik sonuçlar vermektedir. DFT nin gerçek sistemlere uygulanmasında Kohn-Sham denklemleri pratik hesaplamalar için kullanışlı bir temel oluşturur. Günümüzde, özellikle katıhal fiziği çalışmalarında DFT kullanılarak yapılan hesaplamalar referans niteliği taşımaktadır (Thijssen 1999, Parr ve Yang 1989). DFT temelde fermiyonlar için geliştirilmiş bir teoridir ve bozon sistemlerinde kullanımı oldukça yenidir. Buna rağmen bozon gazları için de oldukça iyi sonuçlar vermektedir (Kim ve Zubarev 2003, Nunes 1999). Ancak, literatürde yer alan şekliyle bozonlar için DFT yaklaşımı şu ana kadar Gross-Pitaevskii teorisinin çok da ilerisine gidememiştir.

4.1. ORTALAMA ALAN TEORİSİ

4.1.1. Bogoliubov Yaklaşımı

Çok parçacıklı etkileşen bozon sistemlerinin sıfır sıcaklıktaki ortalama alan teorisi ilk kez Bogoliubov tarafından ele alınmıştır. Bogoliubov (1947) etkileşen bozonlardan oluşan bir sistemin davranışını incelemek için pertürbasyon teorisini kullanarak bir yaklaşım geliştirmiştir. Bu teori düşük yoğunluklu, zayıf etkileşimli ve üst seviyelerdeki parçacıkların ihmal edilebildiği durumlarda oldukça iyi sonuçlar vermesine rağmen atomlar arası etkileşimlerin etkili olduğu sistemlerde iyi bir yaklaşım değildir. Bogoliubov teorisi etkileşimli bozon sistemleri için Bose-Einstein yoğuşmasının özelliklerinin incelenmesinde sıklıkla kullanılan yöntemlerden birisidir (Edwards ve ark. 1996, DuBois ve Glyde 2003).

Çok parçacıklı bir sistem büyük kanonik dağılım kullanılarak çok-parçacık Hamiltonyeni $\hat{K} = \hat{H} - \mu\hat{N}$ ile tanımlanabilir. U_0 sabit bir sayı olmak üzere, parçacık çiftleri arasındaki etkileşimin $U(r_{12}) = U_0\delta(r)$ olarak tanımlandığı temas potansiyeli yaklaşımı ve daha sonraki bölümde tanımlanacak olan ikinci kuantumlanma formalizmi kullanılarak alan operatörleri yazılırsa,

$$\hat{K} = \hat{H} - \mu\hat{N} = \int dr\hat{\psi}^{+}(r)\hat{H}_0\hat{\psi}(r) + \frac{1}{2}U_0\int dr\hat{\psi}^{+}(r)\hat{\psi}^{+}(r)\hat{\psi}(r)\hat{\psi}(r) - \mu\int dr\hat{\psi}^{+}(r)\hat{\psi}(r) \tag{4.1}$$

elde edilir. Burada H_0

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) \tag{4.2}$$

ile verilen tuzak hamiltonyeni ve $V(r)$ tuzak potansiyelidir. $\hat{\psi}^{+}(r)$ ve $\hat{\psi}(r)$ ise belirli bir r konumunda, sırasıyla bir bozon yaratılmasına ve yok edilmesine karşılık gelen bozon alan operatörleridir. Bu durumda alan operatörü yoğuşan kısmın dalga fonksiyonuna karşılık gelen sabit bir sayı, $\Psi(r)$, ve ortalama değer etrafındaki dalgalanmanın, $\hat{\xi}(r)$, toplamı olarak yazılabilir.

$$\hat{\psi}(\mathrm{r}) = \Psi(\mathrm{r}) + \hat{\xi}(\mathrm{r}) \tag{4.3}$$

burada

$$\Psi(\mathrm{r}) = \left\langle \hat{\psi}(\mathrm{r}) \right\rangle \tag{4.4}$$

olarak tanımlanmıştır. $\Psi(\mathbf{r})$ yoğuşan kısmın dalga fonksiyonu olduğundan

$$\int \mathrm{dr} \left|\Psi(\mathrm{r})\right|^2 = \mathrm{N}_0 \tag{4.5}$$

normalizasyon şartına uyar. (4.3) denklemi (4.1) denklemi içerisinde kullanılırsa ve $\hat{\xi}(\mathrm{r})$ 'nin ikinci dereceden terimlerinden daha yukarı terimler ihmal edilirse, $\hat{K}$ için aşağıdaki denklem elde edilir:

$$\begin{aligned}
\hat{K} = & \int dr\, \Psi^*(r) \left\{ H_0 - \mu + \frac{1}{2} U_0 \left|\Psi(r)\right|^2 \right\} \Psi(r) \\
& + \int dr\, \Psi^*(r) \left\{ H_0 - \mu + U_0 \left|\Psi(r)\right|^2 \right\} \hat{\xi}(r) \\
& + \int dr\, \hat{\xi}^+(r) \left\{ H_0 - \mu + U_0 \left|\Psi(r)\right|^2 \right\} \Psi(r) \\
& + \int dr\, \hat{\xi}^+(r) \left\{ H_0 - \mu + 2U_0 \left|\Psi(r)\right|^2 \right\} \hat{\xi}(r) \\
& \quad + \frac{1}{2} U_0 \int dr \hat{\xi}^+(r) \left(\Psi(r)\right)^2 \hat{\xi}^+(r) \\
& \quad + \frac{1}{2} U_0 \int dr \hat{\xi}(r) \left(\Psi^*(r)\right)^2 \hat{\xi}(r)
\end{aligned} \tag{4.6}$$

İlk terim sabit bir sayıdır, ikinci ve üçüncü terimler,

$$\left[H_0 + U_0 \left|\Psi(r)\right|^2 \right] \Psi(r) = \mu \Psi(r) \tag{4.7}$$

olarak tanımlanırsa ihmal edilebilir. Bogoliubov yaklaşımına uygun büyük kanonik Hamiltonyen, $\hat{K}$, sabit bir sayı ve ikinci dereceden terimlerin toplamı şeklinde yazılabilir.

$$\hat{K} = \eta' + \int dr\, \hat{\xi}^{+}(r)\left\{H_0 - \mu + 2U_0\left|\Psi(r)\right|^2\right\}\hat{\xi}(r) + \frac{1}{2}U_0\int dr\hat{\xi}^{+}(r)\left(\Psi(r)\right)^2\hat{\xi}^{+}(r) + \frac{1}{2}U_0\int dr\hat{\xi}(r)\left(\Psi^{*}(r)\right)^2\hat{\xi}(r) \tag{4.8}$$

Burada η' sabit bir sayıdır.

Hamiltonyenin kalan terimleri, artırma ve azaltma operatörleri gibi lineer bir dönüşüm kullanılarak köşegen hale getirilebilir. Bunun için Bogoliubov dönüşümü kullanılır.

$$\hat{\xi}(r) = \sum_i \left[u_i(r)\hat{a}_i + v_i^{*}(r)\hat{a}_i^{+}\right]$$
$$\hat{\xi}^{+}(r) = \sum_i \left[u_i^{*}(r)\hat{a}_i^{+} + v_i(r)\hat{a}_i\right] \tag{4.9}$$

$\hat{a}^{+}$ ve $\hat{a}$ operatörleri daha önce tanımlanan artırma ve azaltma operatörleridir. Bogoliubov yaklaşımında $\hat{a}^{+}$ ve $\hat{a}$ operatörleri yerine bu operatörlerin yaklaşık özdeğeri olan $\sqrt{N_0}$ alınır. Bu yaklaşımda atomların büyük bir kısmının yoğuştuğu göz önüne alınır. N_0 yoğuşan atom miktarını göstermek üzere $N_0 + 1 \approx N_0$ olarak alınırsa temelde aynı fiziksel gösterim elde edilir. Yoğuşmayan atom miktarı yoğuşan atom miktarından oldukça azdır, $N - N_0 << N_0$. Burada N toplam parçacık sayısıdır.

$\Psi(r) = \sqrt{N_0}\Psi_g(r)$ bir set olarak alınır, u_i ile v_i aşağıdaki şekilde seçilirse Hamiltonyen,

$$L\,u_i(r) + N_0 U_0\left(\Psi_g(r)\right)^2 v_i(r) = E_i u_i(r) \tag{4.10}$$

$$L\,v_i(r) + N_0 U_0\left(\Psi_g^{*}(r)\right)^2 u_i(r) = -E_i v_i(r) \tag{4.11}$$

şeklinde yazılabilir. Burada L,

$$L = \hat{H}_0 + 2N_0U_0\left|\Psi_g(r)\right|^2 - \mu \tag{4.12}$$

olarak tanımlanmıştır. u_i ve v_i karesinin integrali alınabilen fonksiyonlardır. $\hat{K}$ ifadesinin son şekli basit bir toplamla ifade edilebilir.

$$\hat{K} = \sum_i E_i \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \tag{4.13}$$

Bu Hamiltonyen vakumda bulunan etkileşimsiz parçacıklar için yoğuşmanın şeklini verir.

4.1.2. Gross-Pitaevskii Teorisi

Alkali atomlarla ilk yapılan deneylerde oldukça seyrek bir gaz bulutu kullanılmıştır, yani atomlar arasındaki ortalama mesafe etkileşim mesafesinden oldukça büyüktür. Zayıf etkileşimli seyrek gazlarda, s-dalga saçılma uzunluğu ile belirlenen iki-parçacık çarpışmasının baskın olması beklenir. GP teorisi, düşük yoğunluklu ve yoğuşan atomların fazla olduğu durumlarda, BEC olayının ortalama-alan teorisini oldukça iyi tanımlar, bu teori Gross (1961) ve Pitaevskii (1961) birbirinden bağımsız olarak ve farklı teknikler kullanılarak geliştirilmiştir. Literatürde, GP denklemleri izotropik (Fabrocini ve Polls 1999, DuBois ve Glyde 2003) ve anizotropik (Dalfovo ve Stringari 1996, DuBois ve Glyde 2001) tuzaklarla tuzaklanmış bozon gazının birçok özelliklerinin incelenmesinde kullanılmıştır.

Tam yoğuşma durumunda, tüm bozonlar aynı tek parçacık durumunda bulunurlar. Bu durumda N-parçacıklı bir sistemin dalga fonksiyonu tek parçacık dalga fonksiyonlarının çarpımı olarak yazılabilir.

$$\Psi(\mathrm{r}_1, \mathrm{r}_2, ...\mathrm{r}_N) = \prod_{i=1}^{N} \phi(r_i) \tag{4.14}$$

(4.14) denklemine göre; tek bir duruma makroskopik olarak yerleşen bir sistemin Hamiltonyeni tek parçacık hamiltonyenlerinin toplamı olarak yazılabilir. Bu durumda alan operatörü tek parçacık operatörü ile yer değiştirebilir. Bogoliubov yaklaşımında (4.3) denkleminde dalga denklemi tek parçacık operatörü cinsinden tanımlanırsa,

$$\hat{\psi}(\mathrm{r}) = \sqrt{\mathrm{N}}\,\phi(\mathrm{r}) + \hat{\xi}(\mathrm{r}) \tag{4.15}$$

olarak yazılabilir. Dalgalanma operatörünün ortalaması $\left\langle \hat{\xi}(\mathrm{r}) \right\rangle = 0$ olacağından Denk. (4.15) ifadesinin beklenen değeri;

$$\phi = \frac{1}{\sqrt{N}} \left\langle \hat{\psi} \right\rangle \tag{4.16}$$

olarak elde edilir. (4.16) denklemi tüm dalgalanmaları yani tüm uyarılmış atomların etkilerini ihmal etmektedir. Fakat deneysel olarak düşük sıcaklıklarda zayıf etkileşimli yoğuşmalarda yapılan hassas ölçümlerde etkileşimin varlığı kanıtlanmıştır. Tüm atomların taban durumda olduğu veya uyarılmış atomlarla yoğuşan atomların hiç etkileşmediği varsayıldığında Gross-Pitaevskii denklemleri geçerlidir. Zayıf etkileşimlerin bulunduğu sistemler için de yaklaşık olarak geçerliliğini korur.

Bu dalga fonksiyonu iki parçacık etkileşimini içermez. İki parçacık etkileşmesinin tanımlanması için, hesaplamalarda sağladığı kolaylık sebebiyle, çoğunlukla temas potansiyeli yaklaşımı kullanılır. N-parçacıklı bir sistemin çok parçacık Hamiltonyeni,

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r_i) \right] + U_0 \sum_{i<j}^{N} \delta(r_i - r_j) \tag{4.17}$$

olarak yazılır. Burada $V(r)$ dış potansiyeldir. Bu Hamiltonyen'e uygun enerji,

$$E = N \int dr \left[\frac{\hbar^2}{2m} \left| \nabla \phi(r) \right|^2 + V(r) \left| \phi(r) \right|^2 + \frac{(N-1)}{2} U_0 \left| \phi(r) \right|^4 \right] \tag{4.18}$$

ile verilir. Bu yaklaşım tüm atomların taban durumda bulunduğu kabul edilerek yazılmıştır. Gerçekte yoğuşmaya katılmayan atomların bulunması veya taban durumda bulunan atomlar arasındaki atomik etkileşim nedeniyle tüm atomlar taban durumda bulunmaz.

Zamana Bağlı Gross-Pitaevskii Denklemi

Zamana bağlı normalize dalga fonksiyonu için Gross-Pitaevskii denklemi,

$$i\hbar\frac{\partial\phi(r,t)}{\partial t}=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(r,t)+NU_0\left|\phi(r,t)\right|^2\right]\phi(r,t) \tag{4.19}$$

ifadesi ile verilir ve bu durumda dalga fonksiyonunun normalizasyonu,

$$\int\left|\phi(r,t)\right|^2 dr=1 \tag{4.20}$$

şeklindedir. İndirgenmiş koordinatlarda zamana bağlı GP denklemi,

$$i\frac{\partial\phi(r,t)}{\partial t}=\left[-\nabla^2+V(r,t)+C\left|\phi(r,t)\right|^2\right]\phi(r,t) \tag{4.21}$$

şekline dönüşür. 3-boyutlu sistemler için C,

$$C=N\frac{4\pi\hbar a}{m\omega}\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{-\frac{3}{2}}=8\pi a N\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{-\frac{1}{2}} \tag{4.22}$$

olarak tanımlanır ve boyutsuzdur. Burada ω sınırlandırıcı potansiyelin karakteristik açısal frekansıdır. Buna karşılık parçacık başına düşen enerjinin beklenen değeri $\hbar\omega$ biriminde aşağıdaki şekilde verilir.

$$\mathrm{E}=\int\left[-\phi^*(\mathrm{r,t})\nabla^2\phi(\mathrm{r,t})+\mathrm{V}\left|\phi(\mathrm{r,t})\right|^2+\frac{1}{2}\mathrm{C}\left|\phi(\mathrm{r,t})\right|^4\right]\mathrm{dr} \tag{4.23}$$

Zamandan Bağımsız Gross-Pitaevskii Denklemi

Sadece r'ye bağlı bir sınırlandırıcı potansiyel kullanıldığında kimyasal potansiyel, μ, için zamandan bağımsız GP denklemi aşağıdaki bağıntıyı sağlar:

$$\frac{\partial\phi(\mathrm{r})}{\partial\mathrm{t}}=-\mathrm{i}\mu\,\phi(\mathrm{r}) \tag{4.24}$$

Buradan öz durumun dalga fonksiyonunda bir faz farkı dışında herhangi bir farklılık yoktur.

$$\phi(r,t) = e^{-i\mu t}\,\phi(r) \tag{4.25}$$

$\phi(r)$, $r = 0$ daki tek parçacık dalga fonksiyondur. (4.24) denklemi (4.25) denklemi ile birlikte değerlendirilirse,

$$\mu\,\phi(r) = \left[-\nabla^2 + V(r) + C\left|\phi(r)\right|^2\right]\phi(r) \tag{4.26}$$

ifadesi elde edilir.

GP denklemleri oldukça düşük sıcaklıklarda ve etkileşimin zayıf olduğu sistemlerde iyi bir yaklaşımdır ve uyarılmış atomların ihmal edildiği birçok deneyde oldukça iyi bir tanımlama sağlar (Blakie ve Davis 2004, Davis ve Blakie 2005). Bose-Einstein yoğuşmasında oluşan dönmeler ve bunun etkilerinin hesaplanmasında GP denklemleri sıklıkla kullanılmaktadır (Coddington ve ark. 2004, Simula ve ark. 2004). Davis ve Gardiner (2001) rubidyum için buharlaştırarak soğutma parametrelerini çalışmışlar ve herhangi bir düzltme terimi kullanmadan tüm eğrilerin deneyle uyumlu olduğunu bulmuşlardır.

4.1.3. Hartree-Fock-Bogoliubov Yaklaşımı

Bozon gazında yoğuşma oluştuğunda, tuzaklanmış atomlar gerçek bir uzayda kuvvetli bir şekilde sıkıştırılmıştır. Bu durumda etkileşmeler önemli hale gelir. Bogoliubov yaklaşımı, sıfır sıcaklıkta zayıf etkileşimli bozon gazı için yazılmıştır. Makroskopik yoğuşma durumunda dalga fonksiyonu GP denklemleri ile verilir. Sonlu sıcaklıklardaki yoğuşmamış parçacıkların etkileri ise Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) denklemleri kullanılarak Popov (1987) yaklaşımı altında hesaplanabilir. HFB yaklaşımı yoğuşmamış atomların etkisini öz-uyumlu (self-consistent) bir yaklaşım altında inceleyen basit bir teoridir (Griffin 1996).

Zamandan bağımsız GP denkleminde alan operatörleri yoğuşmuş ve yoğuşmamış parçalar için ayrı ayrı hesaba katılır.

$$\mu\phi(r) = \left\{-\nabla^2 + V(r) + C\left[n(r) + \tilde{n}(r)\right]\right\}\phi(r) \qquad (4.27)$$

Burada $n(r) = |\phi(r)|^2$ yoğuşan ve $\tilde{n}(r) = \left\langle \hat{\xi}^+(r)\hat{\xi}(r) \right\rangle$ yoğuşmayan yoğunlukları gösterir. Normalizasyon yoğuşan ve yoğuşmayan paracıkların tamamı üzerinden tanımlanır (Hutchinson ve ark. 1997). Bergeman (1997) harmonik bir tuzakta tuzaklanmış $T > 0$ sıcaklığındaki ^{7}Li atomlarının özelliklerini Hartree-Fock teorisi kullanarak hesaplamış ve T_c sıcaklığı civarında atomların oluşturduğu bulutun uzaysal olarak yerelleşmiş (localized) bir yoğuşma piki olduğunu bulmuştur. Esry ve arkadaşları (1997), HF teorisini kullanarak ilk kez iki farklı spin yönelimine sahip bir sistemin özelliklerini hesaplamışlardır. ^{87}Rb için bu teoriyi kullanarak yaptıkları hesaplamada ise yoğuşmanın yerçekiminden ve atomlar arasındaki etkileşmelerden etkilendiğini göstermişlerdir.

4.2. YOĞUNLUK FOKSİYONELLERİ TEORİSİ

Yoğunluk fonksiyonelleri teorisinin (DFT) getirdiği en önemli farklılık hesaplamalarda dalga fonksiyonu yerine $n(r)$ parçacık yoğunluğunun kullanılmasıdır. DFT prensip olarak Hohenberg-Kohn (HK) teoremi üzerine kurulmuştur ve teorik olarak tam sonuçlar elde edilebilir. HK teoremine göre sabit bir dış alanda bulunan, etkileşimli N-parçacıklı bir sistemin taban durumuna karşılık gelen parçacık yoğunluğu sistemin tüm özelliklerini belirler (örn. enerji, bağ uzunluğu, uyarılmış durumlar). Aslında DFT'nin uygulamadaki gerçek gücü Kohn-Sham (KS) denklemlerinden gelmektedir. Bu denklemler, etkileşimli sistemdeki parçacıklararası etkileşimlerin uygun bir şekilde tek parçacık potansiyeline dahil edilmesine ve aynı taban-durum yoğunluğuna sahip etkileşimsiz bir sistem kullanılarak, incelenen sistemin görüntüsünün bulunabilmesine olanak sağlar (Maitra ve Burke 2002).

Kuantum mekaniğinde eğer sistemin dalga fonksiyonu ψ verilmişse sistem hakkındaki tüm bilgiler elde edilebilir. Relativistik olmayan dalga fonksiyonu Schrödinger denklemi kullanılarak hesaplanabilir. V(r) potansiyelinde hareket eden tek bir parçacık için zamandan bağımsız Schrödinger denklemi

$$\left[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}+V(r)\right]\psi(r)=\varepsilon\psi(r) \tag{4.28}$$

ile verilirken çok sayıda parçacık içeren bir sistem için zamandan bağımsız Schrödinger denklemi

$$\left[\sum_i^N\left(-\frac{\hbar^2\nabla_i^{\,2}}{2m}+V(r_i)\right)+\sum_{i<j}U(r_i,r_j)\right]\psi(r_1,r_2,.....,r_N)=E\psi(r_1,r_2,.....,r_N) \tag{4.29}$$

şeklindedir. Burada N parçacık sayısı ve $U(r_i,r_j)$ parçacıklar arası etkileşmedir. Denk. (4.29)'in çok parçacıklı sistemler için çözülmesi oldukça karmaşıktır ve parçacık sayısı arttıkça yapılması gereken hesaplamaların sayısı eksponansiyel olarak artar. Bunun yerine çok parçacık dalga fonksiyonu ile ilgilenmeyen ve sadece parçacıkların yoğunluğunun sistemi tanımlamak için yeterli olacağı fikrine dayanan yoğunluk fonksiyonelleri teorisi (DFT) daha güçlü bir yöntem olarak kullanılmaktadır (Capelle 2003).

Kuantum mekaniksel yaklaşımda Schrödinger denkleminden gözlenebilirlerin elde edilmesi aşağıdaki şekilde özetlenebilir:

$$V(r)\xrightarrow{Schrödinger\ Denklemi}\psi(r_1,r_2,\cdots,r_N)\xrightarrow{\langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle}gözlenebilirler$$

Seçilen $V(r)$ için Schrödinger denklemi çözülerek $\psi(r_1,r_2,\cdots,r_N)$ dalga fonksiyonu elde edilir ve bu dalga fonksiyonu sistemin bütün özelliklerini belirler. Sistemin herhangi bir gözlenebilirine karşılık gelen $\hat{O}$ operatörünün beklenen değeri bu dalga fonksiyonu kullanılarak hesaplanır. Bulunan bu dalga fonksiyonu kullanılarak sistemdeki parçacık yoğunluğu aşağıdaki şekilde hesaplanabilir.

$$n(r) = N\int d^3r_2 \int d^3r_3 \cdots \int d^3r_N \psi^*(r, r_2, \cdots, r_N)\psi(r, r_2, \cdots, r_N) \qquad (4.30)$$

Yine bu işlemi sembolik olarak ifade edersek $V(r) \to \psi(r_1, r_2, \cdots, r_N) \to n(r)$ yazabiliriz: yani dış potansiyel biliniyorsa bundan, çok parçacık dalga fonksiyonu ve buradan da parçacık yoğunluğu bulunabilir. DFT nin temelini oluşturan Hohenberg-Kohn teoremi (Hohenberg ve Kohn 1964) bu görüntüleme işleminin tersinin bulunabileceğini söyler, yani, eğer bir sistemdeki parçacık yoğunluğu $n(r)$ biliniyorsa bu yoğunluk kullanılarak buradan çok parçacık dalga fonksiyonu $\psi(r_1, r_2, \cdots, r_N)$ ve buna karşılık gelen $V(r)$ dış potansiyeli bulunabilir.

Bu çerçevede, çok parçacık sistemlerini tanımlamak için çok sayıda uzaysal değişken içeren $\psi(r_1, r_2, \cdots, r_N)$ çok parçacık dalga fonksiyonu yerine, sadece tek bir noktanın uzaysal koordinatlarına bağlı olan $n(r)$ parçacık yoğunluğunun kullanılması daha kolay olacaktır. Bu temel fikre dayanan DFT yaklaşımı sembolik olarak $n(r) \to \psi(r_1, r_2, \cdots, r_N) \to V(r)$ şeklinde ifade edilebilir.

Bir çok parçacık sistemini tanımlamak için sadece sistemdeki parçacık yoğunluğunun kullanılması girişimleri oldukça eskidir. İlk olarak 1920'lerde Thomas ve Fermi birbirinden bağımsız olarak karmaşık N-elektronlu Schödinger dalga fonksiyonu $\psi(r_1, ..., r_N)$ yerine elektron yoğunluğu $n(r)$'yi kullanmışlardır (Parr ve Yang 1989). Thomas-Fermi teorisi olarak bilinen ve yoğunluk fonksiyonelleri teorisinin bir ilk formu olan bu yaklaşım kavramsal olarak hala önemlidir. Bu sebeple önce bu teoriyi ele alacağız.

4.2.1. Thomas-Fermi Teorisi

TF teorisinde kinetik enerji parçacık yoğunluğunun bir açılımı olarak ifade edilmiştir. Homojen etkileşimlerin olmadığı bir fermiyon gazı için yoğunluğun fonksiyonu olarak parçacık başına ortalama kinetik enerji aşağıdaki şekilde yazılabilir:

$$\varepsilon_{kin}(n) = C_F\, n^{2/3} \tag{4.31}$$

Burada $C_F = \frac{3}{10}(3\pi^2)^{2/3} = 2.8712$ olarak tanımlanan bir katsayıdır. Bu durumda birim hacimdeki kinetik enerji $n\varepsilon_{kin}$ olur. Eğer gerçekte parçacık yoğunluğunun uzaysal değişimi oldukça yavaş ise parçacık yoğunluğunun bir fonksiyonu olarak kinetik enerji yaklaşımı uygulanabilir bir yaklaşımdır. Bu durumda toplam kinetik enerji parçacık başına kinetik enerjinin integrali alınarak bulunabilir.

$$E_{kin} \approx \int d^3r\, n(r)\, \varepsilon_{kin}(r) = C_F \int d^3r\, n^{5/3}(r) \tag{4.32}$$

Thomas-Fermi yaklaşımı kullanılarak toplam enerji, parçacık yoğunluğu ve dış potansiyelin bir fonksiyonu olarak yazılabilir:

$$\begin{aligned} E_{TF} = {} & C_F \int d^3r_1\, n^{5/3}(r_1) + \int d^3r_1\, V(r_1) n(r_1) \\ & + \frac{1}{2} \int d^3r_1\, d^3r_2\, n(r_1) U(r_1, r_2)\, n(r_2) \end{aligned} \tag{4.33}$$

Burada, $U(r_1, r_2)$ iki parçacık arasındaki etkileşim potansiyelidir. Thomas-Fermi teorisinde parçacıklar arası etkileşimler göz önüne alınırken (4.33) denklemindeki son terim parçacıkların kendileri ile etkileşimlerini de içerir. Sadece çok büyük sayıda parçacık içeren sistemlere uygulandığı için Thomas-Fermi teorisinde bu hatanın giderilmesine gerek duyulmamıştır.

4.2.2. Hohenberg-Kohn Teorisi

Hohenberg ve Kohn (1964) dış potansiyel alanında hareket eden etkileşimli bir gazın taban durum enerjisinin parçacık yoğunluğu $n(r)$'ye bağlı bir fonksiyonel şeklinde hesaplanabileceğini ispatlamışlardır. Bu fonksiyonel dış potansiyelin şekline bağlı değildir ve tüm elektronik sistemlere uygulanabilir. Hohenberg ve Kohn teorisinin temeli, taban durumda sistemin enerjisinin minimum olması ilkesine dayanır. Prensip olarak, verilen herhangi bir dış potansiyel için, enerji fonksiyonellerini minimum yapan yoğunluk fonksiyonu $n(r)$ kolayca hesaplanabilir

ve bu parçacık yoğunluğu sistemin taban durumuna karşılık gelir. Taban durum yoğunluğu, N-parçacıklı Schrödinger denkleminin en düşük enerjili çözümü için sistemin bulunabileceği tek uzaysal dağılımı temsil eder. Yani tek bir taban durum yoğunluğundan tek bir taban durum çok parçacık dalga fonksiyonu elde edilir. Böylece yoğunluk kullanılarak sistemin elektron sayısı, taban-durum dalga fonksiyonu ve diğer tüm elektronik özellikleri belirlenebilir (Hohenberg ve Kohn 1964).

$V(r)$ dış potansiyeli altındaki N parçacıklı bir sistem için Hamitonyen operatörü

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} + \hat{U} = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\nabla_i^2 + \sum_{i=1}^{N}V(r_i) + \sum_{i\neq j=1}^{N}U(r_{ij}) \tag{4.34}$$

olarak yazılabilir. Burada $\hat{T}$ kinetik enerjiyi, $\hat{\mathrm{U}}$ parçacıklar arasındaki etkileşme potansiyelini ve $\hat{\mathrm{V}}$ dış potansiyeli tanımlayan operatörlerdir. Sistemin taban durumundaki bütün fiziksel özellikleri parçacık yoğunluğu $n(r)$ cinsinden tanımlanabileceği için sistemin bu Hamiltonyene karşılık gelen toplam enerjisinin beklenen değeri $E[n] = \left\langle \psi[n(r)] \middle| \hat{H} \middle| \psi[n(r)] \right\rangle$

$$\begin{aligned} E[n] &= T[n] + V[n] + U[n] \\ &= T[n] + U[n] + \int n(r)V(r)d^3r \end{aligned} \tag{4.35}$$

Şeklinde parçacık yoğunluğunun bir fonksiyoneli şeklinde yazılabilir. Sabit N parçacık sayısına sahip bir sistem için doğru taban durum yoğunluğu,

$$\int n(r)\,d^3r = N \tag{4.36}$$

şartı göz önüne alınarak enerjinin minimum değerinin bulunması ile mümkündür.

$$E[n] = \min_{\{n(r)\}}\left\{T[n] + U[n] + \int n(r)V(r)d^3r\right\} \tag{4.37}$$

Minimum enerjinin elde edilmesi ile buna uygun taban-durum yoğunluğu bulunur. Buradan taban durum dalga fonksiyonu kolayca elde edilir. Taban durum dalga

fonksiyonu üzerinden ortalama değeri kullanılarak herhangi bir fiziksel gözlenebilir hesaplanabilir:

$$A = \left\langle \psi_0 \middle| \hat{A} \middle| \psi_0 \right\rangle \tag{4.38}$$

Prensip olarak Hohenberg-Kohn teorisi hiçbir yaklaşım içermez ve bu anlamda tamdır ve bütün gözlenebilirlerin tam olarak hesaplanması mümkündür. Ancak uygulamada çok parçacık teorisinin en karmaşık kısmı $T[n]$ ve $U[n]$ fonksiyonellerinin belirlenmesidir. Her ne kadar, bu fonksiyonellerin var olduğu ve evrensel olduğu ispatlanmış olsa da bunların tam ve açık bir formu henüz verilmemiştir. Bu sebeple, $T[n]$ ve $U[n]$ için bazı uygun yaklaşımların kullanılması gerekir.

4.2.3. Kohn-Sham Denklemleri

Uygulamada DFT'nin kullanılması Kohn-Sham denklemleri sayesinde mümkün olmuştur. Kohn ve Sham (1965) ve Kohn (1999) DFT nin etkileşimli çok parçacıklı sistemlerin elektron yoğunluğunun tek parçacık teorisinden elde edilmesini sağlayan güçlü bir yöntem olduğunu göstermişlerdir. Kohn–Sham teorisi sadece taban-durum için değil bunun yanında zamana bağlı süreçler ve uyarılmış durumlar için de hesaplama olanağı ve bazı kavramsal avantajlar sağlar.

Çok parçacık sistemlerinin davranışı incelendiğinde, bu problem iki parçacık etkileşimlerini de içerecek şekilde genişletilebilir. Gerçekte etkileşimli veya etkileşimsiz parçacık sistemleri için $E[n]$'in şekli bilinmez. Fakat etkileşimsiz parçacıklar için taban durum enerjisi çözülebilir ve bu etkileşimli sistem problemini çözmek için kullanılır.

Etkileşimsiz durumda $E[n]$ bir kinetik bileşenden ve bir dış potansiyelin katkısından oluşur:

$$E[n] = T[n] + \int d^3 r\, n(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) \tag{4.39}$$

E 'nin yoğunluğa göre değişimi aşağıdaki denklemle verilir:

$$\frac{\delta T[n]}{\delta n(\mathbf{r})} + V(\mathbf{r}) = \lambda n(\mathbf{r}) \tag{4.40}$$

Burada λ Lagrange katsayısıdır ve yoğunluğun toplam parçacık sayısı ile sınırlanmasına karşılık gelen bir parametredir. $T[n]$'nin şekli tam olarak bilinmemekle beraber tek-parçacık Schrödinger denklemine uygun şekilde yazılabilir:

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right]\psi_k(\mathbf{r}) = \varepsilon_k \psi_k(\mathbf{r}) \tag{4.41}$$

Taban-durum yoğunluğu

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{k=1}^{N} |\psi_k(\mathbf{r})|^2 \tag{4.42}$$

ile verilir. Yoğunluğun N parçacık sayısına uygun olarak normalize edildiği varsayılmıştır. Kinetik enerji fonksiyonu potansiyelden bağımsızdır (Thijssen 1999).

Etkileşen bir çok parçacık sistemi için ise etkileşimleri içeren enerji fonksiyonu aşağıdaki şekilde genelleştirilebilir:

$$E[n] = T[n] + \int d^3r\, n(\mathbf{r})V(\mathbf{r}) + \frac{1}{2}\int d^3r \int d^3r_1\, n(\mathbf{r_1})U(r_{12})n(\mathbf{r}) + E_{xc}[n] \tag{4.43}$$

İlk terim etkileşimsiz parçacıkların kinetik enerji fonksiyonelini, ikincisi dış potansiyelden kaynaklanan enerjiyi üçüncüsü ise Hartree enerjisini gösterir. Son terim ilk üç terimde hesaplanamayan tüm katkıları içeren değiş-tokuş ve korelasyon (exchange correlation) enerjisidir. Burada tüm bilinmeyen etkileşim enerjilerini içeren E_{xc} için herhangi bir yaklaşım yapılmadığına dikkat edilmelidir. E_{xc}, dalga fonksiyonunun şekline değil parçacık yoğunluğuna bağlı bir fonksiyoneldir. Bu nedenle denklemdeki tüm terimler yoğunluğa bağlı yazılabilmiştir. Etkileşimli parçacıklar için kinetik enerji ve parçacıklar arası etkileşme, yoğunluğa açık bir ifade ile bağlı değildir. Bu yüzden sadece yoğunluğa bağlı olan etkileşimsiz gazların

kinetik fonksiyonu ayrılabilir ve kinetik enerji E_{xc}'nin bir parçası olarak ele alınabilir. Bu denklemin yoğunluğa göre değişimi alındığında

$$\frac{\delta T[n]}{\delta n(\mathbf{r})}+\frac{\delta E_{xc}[n]}{\delta n(\mathbf{r})}+\int d^3r_1\, n(\mathbf{r_1})\,U(r_{12})+V(\mathbf{r})=\lambda n(\mathbf{r}) \tag{4.44}$$

elde edilir. Bu denklemin sol tarafındaki ilk terim kinetik enerji terimidir. Diğer terimlerin toplamı ise bir etkin potansiyel ile gösterilirse

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2+V_{etk}(\mathbf{r})\right]\psi_k(\mathbf{r})=\varepsilon_k\psi_k(\mathbf{r}) \tag{4.45}$$

olur. Buradaki V_{etk}

$$V_{etk}(r_1)=V(\mathbf{r_1})+\frac{\delta E_{xc}[n]}{\delta n(\mathbf{r_1})}+\int d^3r_1\, n(\mathbf{r_1})U(r_{12}) \tag{4.46}$$

şeklinde tanımlanmıştır. Buradaki değiş-tokuş ve korelasyon terimi aşağıdaki şekildedir.

$$E[n]=\sum_{k=1}^{N}\varepsilon_k-\int d^3r_1 d^3r_2\, n(\mathbf{r_1})U(r_{12})n(\mathbf{r_2})+E_{xc}[n]-\int d^3r_1\, V_{xc}[n(\mathbf{r_1})]n(\mathbf{r_1}) \tag{4.47}$$

Değiş-tokuş ve korelasyon potansiyeli

$$V_{xc}[n(\mathbf{r})]=\frac{\delta E_{xc}[n]}{\delta n(\mathbf{r})} \tag{4.48}$$

şeklinde tanımlanır. Denk. (4.42), (4.45), (4.46) ve (4.47) ile verilen ifadeler yoğunluk fonksiyoneli ile hesaplama sürecini tanımlar. $V_{xc}[n(\mathbf{r})]$ ile verilen 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, her bir fiziksel sistemin kendine özgü bir değiş-tokuş ve korelasyon enerji fonksiyonuna sahip olduğunu gösterir.

DFT, fizik ve kimyadaki çok büyük sistemler için oldukça kullanışlıdır ve pratik sonuçlar vermektedir. Çok parçacık probleminde çok parçacık dalga fonksiyonu yerine bir yoğunluk dağılımı kullanılması sistemi oldukça basitleştirir. DFT'de çok parçacık Hamiltonyeni kavramsal olarak karmaşık değildir. Değiş-tokuş ve korelasyon fonksiyonu ile ilgili olan enerjiyi hesaplamak zordur, ancak enerji ifadesinde yer alan diğer kısımlar tam olarak hesaplanabilir.

Yoğunluk teorileri matematiksel bir araç olarak göz önüne alınmalıdır. Bu nedenle DFT metoduna bağlı olarak kullanılan KS yaklaşımında buna dikkat edilmelidir. Yoğunluk dağılımının anlaşılmasını sağlayan yoğunluk tabanlı kolay bir model olmasına rağmen, DFT hesabının sonucunun anlaşılmasına hızlı bir şekilde yardımcı olacak kavramlar bulunmamaktadır (Cremer 2001).

Buraya kadar DFT yaklaşımı ve Kohn-Sham (KS) denklemleri fermion sistemleri için tanımlanmıştır. Benzer yaklaşımlar üç ve daha az boyutlu tuzaklardaki N bozon sistemi içinde kullanılabilir. Bu durumda yoğunluk dağılımı (4.42) denklemi yerine

$$n(\mathbf{r}) = N\left|\psi_0(\mathbf{r})\right|^2 \tag{4.49}$$

ifadesinden hesaplanır, yani etkileşmeyen sistemde bütün bozonların taban durumda bulundukları varsayılır. Bu yaklaşım kullanılarak bir boyutlu harmonik tuzakta bozon gazının ilk uyarılma enerjisini bulmak için elde edilen denklemlerin enerji spektrumu, hidrodinamik yaklaşımla bulunan spektrumla aynıdır. Zamana bağlı genel harmonik bir tuzaktaki katı (impenetrable) bozonların bir boyuttaki yoğuşması için elde edilen denklemler alışılmış denklemlere indirgenir ve büyük N limitinde çok parçacık davranışı aynı sonuçları verir (Kim ve Zubarev 2003).

Ancak bu durumda elde edilen dağılım gerçek bozonların değil ancak bozonlar arasında etkileşimin olmadığı eşdeğer bir sanki-bozon (quasi-boson) sisteminin dağılımını verir. Bu sanki-bozonlar arasında etkileşim olmadığı için böyle bir yaklaşımla parçacıklar arası etkileşimler sonucunda parçacıkların ne kadarının üst seviyelere uyarıldıklarının ve bu uyarılmaların sistemin özellikleri üzerindeki etkisinin incelenmesi mümkün değildir.

Çok parçacık bozon sistemlerinde parçacıklararası etkileşim sonucunda üst seviyelere uyarılma oranları Kuantum Monte Carlo (QMC) yöntemleriyle incelenmiştir (DuBois ve Glyde 2001, DuBois ve Glyde 2003, Sakhel ve ark. 2002, DuBois 2002). Ancak, QMC yöntemleriyle böyle bir sistemi incelemek çok uzun bilgisayar zamanı gerektirmektedir ve çok pratik değildir. Bu sebeple parçacıkların üst seviyelere uyarılmalarını göz önüne alan çok parçacık bozon sistemlerinin özelliklerini tanımlamada kullanılabilecek teorik bir yaklaşımın oluşturulmasına ihtiyaç vardır. Bir sonraki bölümde böyle bir ihtiyacı karşılayacak teorik bir yaklaşım geliştirilmeye çalışılacaktır.

5. ÇOK PARÇACIK BOZON SİSTEMLERİNİN TEORİSİ: YENİ BİR YAKLAŞIM

Bir önceki bölümde de belirtildiği gibi bu bölümde çok parçacık bozon sistemlerinin incelenmesinde etkileşimler sebebiyle bozonların taban durumdan üst seviyelere atılmalarını da göz önüne alan bir teori geliştirilmeye çalışılacaktır. Bu amaçla önce ikinci kuantumlanma formalizmi kullanılarak sistemin toplam hamiltonyeni belirli bir r konumunda bir parçacığın yaratılmasına ve yok edilmesine karşılık gelen $\hat{\psi}^{+}(r)$ ve $\hat{\psi}(r)$ alan operatörleri cinsinden ifade edilecektir. Daha sonra doğal orbitaller (natural orbitals) tanımlanacak ve son olarak Fock uzayında yerleşim sayıları gösterimi ve doğal orbitaller kullanılarak sistemin toplam hamiltonyeni tanımlanacaktır. Bu toplam Hamiltonyen kullanılarak hem doğal orbitallerin ve hem de bu orbitallere karşılık gelen yerleşim sayılarının nasıl elde edilebileceği sunulacaktır.

5.1. İKİNCİ KUANTUMLANMA VE TOPLAM HAMİLTONYEN

Çok parçacık sistemini tanımlamada ikinci kuantumlanma formalizmi uygun bir gösterim sağlar. Bu yaklaşımda sistem alan operatörleri $\hat{\psi}^{+}(r)$ ve $\hat{\psi}(r)$ kullanılarak tanımlanabilir. Kapalı birçok parçacık sisteminde, özellikle sistemin hareket sabitleri olarak tanımlanabilecek olan parçacık sayısı ve toplam enerjiye karşılık gelen sayı operatörü $\hat{N}$ ve Hamiltonyen operatörü $\hat{H}$ alan operatörleri cinsinden kolayca ifade edilebilir. Bu operatörler kullanılarak sistemin tüm özellikleri elde edilebilir.

$\hat{\psi}^{+}(r)$ ve $\hat{\psi}(r)$ alan operatörleri tüm r uzay koordinatları ile tanımlanan bir Hilbert uzayında etki eden operatörler olarak tanımlanır. r sürekli bir değişken olduğundan söz konusu Hilbert uzayının serbestlik derecelerinin sayısı sonsuzdur. Bozonlardan oluşan sürekli sistemler için alan operatörleri aşağıdaki yer değiştirme bağıntılarına uyar:

$$\left[\hat{\psi}(r),\hat{\psi}^{+}(r')\right]=\delta(r-r') \tag{5.1}$$

$$\left[\hat{\psi}(r),\hat{\psi}(r')\right]=\left[\hat{\psi}^{+}(r),\hat{\psi}^{+}(r')\right]=0 \tag{5.2}$$

Burada $\left[\hat{A},\hat{B}\right]$ gösterimi $\hat{A}$ ve $\hat{B}$ operatörleri için $\left(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}\right)$ olarak kullanılmıştır. Alan operatörleri kullanılarak sayı operatörü $\hat{N}$ ve Hamiltonyen operatörü $\hat{H}$ oluşturulabilir. Parçacıkların bir $V(r)$ dış potansiyeli etkisinde hareket ettiği bir sistem için aşağıdaki eşitlikler yazılır.

$$\hat{N}\equiv\int d^{3}\mathrm{r}\;\;\hat{\psi}^{+}(\mathrm{r})\hat{\psi}(\mathrm{r}) \tag{5.3}$$

$$\begin{aligned}\hat{H}\equiv&-\frac{\hbar^{2}}{2m}\int d^{3}\mathrm{r}_{1}\;\;\hat{\psi}^{+}(\mathrm{r}_{1})\,\nabla^{2}\hat{\psi}(\mathrm{r}_{1})+\int d^{3}\mathrm{r}_{1}\;\;\hat{\psi}^{+}(\mathrm{r}_{1})V(r_{1})\hat{\psi}(\mathrm{r}_{1})\\&+\frac{1}{2}\int\int d^{3}\mathrm{r}_{1}\,d^{3}\mathrm{r}_{2}\;\hat{\psi}^{+}(\mathrm{r}_{1})\,\hat{\psi}^{+}(\mathrm{r}_{2})U(\mathrm{r}_{12})\hat{\psi}(\mathrm{r}_{2})\hat{\psi}(\mathrm{r}_{1})\end{aligned} \tag{5.4}$$

Burada $U(\mathrm{r}_{12})$ verilen sistemin çift-parçacık etkileşim potansiyelini gösterir. $\hat{\psi}^{+}(\mathrm{r})\hat{\psi}(\mathrm{r})$ çarpımı alanın yoğunluk operatörü olması nedeniyle tüm uzay üzerinden toplamı alındığında toplam parçacık sayısını verir. Hamiltonyen operatörünün ifadesi makroskopik verileri elde etmek için kullanılan Schrödinger formülasyonunun beklenen değer tanımına benzerdir. Aradaki fark, Schrödinger formülasyonunda sistemin dalga fonksiyonu kullanılırken, ikinci kuantumlanmada alan operatörlerinin kullanılmasıdır. N parçacıklı ve E enerjili herhangi bir durum $\left|\Psi_{NE}\right\rangle$ ile gösterilsin. $\hat{N}$ ve $\hat{\mathrm{H}}$ operatörü $\left|\Psi_{NE}\right\rangle$ durumuna uygulandığında sistemde bulunan parçacık sayısı N ve sistemin toplam enerjisi E,

$$\hat{N}\left|\Psi_{NE}\right\rangle=N\left|\Psi_{NE}\right\rangle \tag{5.5}$$

$$\hat{H}\left|\Psi_{NE}\right\rangle=E\left|\Psi_{NE}\right\rangle \tag{5.6}$$

özdeğer denklemleri ile tanımlanır. Burada genellikle $\left\langle\Psi_{NE}\middle|\Psi_{NE}\right\rangle=1$ olarak seçilir.

$\hat{\psi}(\mathbf{r})$ ve $\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})$ alan operatörleri, ortonormal tam bir set oluşturan $\phi_{i}(\mathrm{r})$ tek-parçacık dalga fonksiyonları ile artırma ve azaltma operatörleri kullanılarak seriye açılabilir:

$$\hat{\psi}^{+}(\mathrm{r})=\sum_{i}\hat{a}_{i}^{+}\,\phi_{i}^{*}(\mathrm{r}),\qquad\qquad \hat{\psi}(\mathrm{r})=\sum_{i}\hat{a}_{i}\,\phi_{i}(\mathrm{r}) \tag{5.7}$$

Burada $\hat{a}^{+}$ ve $\hat{a}$ ile gösterilen artırma ve azaltma operatörleri,

$$\begin{aligned}\hat{a}\left|N\right\rangle &=\sqrt{N}\left|N-1\right\rangle\\ \hat{a}^{+}\left|N\right\rangle &=\sqrt{N+1}\left|N+1\right\rangle\end{aligned} \tag{5.8}$$

eşitliklerini sağlarlar ve aşağıdaki yer değiştirme bağıntılarına uyarlar:

$$\left[\hat{a}_{i}\,,\hat{a}_{j}^{+}\right]=\delta_{ij}\qquad\qquad \left[\hat{\mathrm{a}}_{\mathrm{i}}\,,\hat{\mathrm{a}}_{\mathrm{i}}\right]=\left[\hat{\mathrm{a}}_{\mathrm{i}}^{+}\,,\hat{\mathrm{a}}_{\mathrm{i}}^{+}\right]=0 \tag{5.9}$$

$\hat{\psi}(\mathbf{r})$ ve $\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})$ alan operatörlerinin Denk. (5.1) ve Denk. (5.2) de tanımlanan özellikler Denk. (5.7) ile birlikte değerlendirildiğinde, $\phi_{i}(\mathrm{r})$ fonksiyonları için,

$$\sum_{i}\phi_{i}(\mathrm{r})\phi_{i}^{*}(\mathrm{r}')=\delta(\mathrm{r}-\mathrm{r}') \tag{5.10}$$

eşitliği elde edilir. Burada $\delta(\mathrm{r}-\mathrm{r}')$, 3-boyutlu Dirac delta fonksiyonudur. i sayısı enerji öz değeri gibi çeşitli tek-parçacık durumlarını tanımlayan bir indis olmak üzere, tek-parçacık dalga fonksiyonları ortonormal olduğundan,

$$\int \mathrm{d}^{3}r\;\phi_{\mathrm{i}}^{*}(\mathrm{r})\phi_{\mathrm{j}}(r)=\delta_{\mathrm{ij}} \tag{5.11}$$

yazılabilir.

Bu durumda sistemin toplam hamiltonyeni artırma ve azaltma operatörleri cinsinden aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$\hat{H}\equiv\sum_{i,j}\left\langle i\left|\hat{T}\right|j\right\rangle\hat{a}_{i}^{+}\,\hat{a}_{j}+\sum_{i,j}\left\langle i\left|V\right|j\right\rangle\hat{a}_{i}^{+}\,\hat{a}_{j}+\frac{1}{2}\sum_{i,j,k,l}\left\langle ij\left|U\right|kl\right\rangle\hat{a}_{i}^{+}\,\hat{a}_{j}^{+}\,\hat{a}_{k}\hat{a}_{l} \tag{5.12}$$

Burada

$$\left\langle i\left|\hat{T}\right|j\right\rangle \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\int d^3\mathrm{r}_1\ \phi_i^*(\mathrm{r}_1)\ \nabla^2\ \phi_j(\mathrm{r}_1)$$
$$\left\langle i|V|j\right\rangle \equiv \int d^3\mathrm{r}_1\ \phi_i^*(\mathrm{r}_1)\ V(r_1)\phi_j(\mathrm{r}_1) \qquad (5.13)$$
$$\left\langle ij|U|kl\right\rangle \equiv \int\int d^3\mathrm{r}_1\, d^3\mathrm{r}_2\ \phi_i^*(\mathrm{r}_1)\phi_j^*(\mathrm{r}_2)U(\mathrm{r}_{12})\phi_k(\mathrm{r}_1)\phi_l(\mathrm{r}_2)$$

sırasıyla kinetik enerjiye, dış potansiyele ve parçacıklararası etkileşim potansiyeline karşılık gelen matris elemenlarıdır.

5.2. YOĞUNLUK MATRİSLERİ

N tane özdeş parçacıktan oluşan bir sistemin Schrödinger tanımlamasında kullanılan N-parçacık dalga fonksiyonları yoğunluk matrislerine indirgenebilir ve bu matrisler N-parçacıklı sistemin incelenmesinde oldukça kullanışlı bir araçtır (Löwdin 1955, Löwdin ve Shull 1956, Löwdin ve Rèdei 1959, Penrose ve Onsager 1956, McWeeny 1960, Eschrig 1996). Bu kısımda, bir çok parçacık bozon sistemi için Schrödinger denkleminden başlayarak önce yoğunluk matrislerini tanımlayacağız. N-bozon içeren bir sistem için zamandan bağımsız relativistik olmayan Schrödinger denklemi aşağıdaki şekilde verilir.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{N}\nabla_i^2+\sum_{i=1}^{N}V(r_i)+\sum_{i<j}^{N}U(r_{ij})\right)\Psi_{NE}(\mathrm{r}_1,.....,\mathrm{r}_N)=E\Psi_{NE}(\mathrm{r}_1,.....,\mathrm{r}_N) \quad (5.14)$$

Burada birinci terim kinetik enerji terimlerini, ikincisi dış potansiyeli ve üçüncüsü parçacıklar arasındaki etkileşim potansiyelini temsil eder. $\Psi_{NE}(\mathrm{r}_1,.....,\mathrm{r}_N)$, E enerjisine sahip sistemin Schrödinger dalga fonksiyonudur. Buna uygun olarak $\Psi_{NE}(\mathrm{r}_1,...,\mathrm{r}_N)\Psi^*{}_{NE}(\mathrm{r}_1,...,\mathrm{r}_N)dr_1...dr_N$ çarpımı, E enerjili öz durumda bulunan sistemin, $(\mathrm{r}_1,.....,\mathrm{r}_N)$ koordinatları ile tanımlanan nokta civarında bir $dr_1...dr_N$ hacmi içinde bulunma olasılığını verir. $\Psi^*{}_{NE}$ dalga fonksiyonu Ψ_{NE} dalga fonksiyonunun karmaşık eşleniğidir. Sistemle ilgili herhengi bir fiziksel büyüklüğün gözlenebilir değeri normalize dalga fonksiyonları Ψ_{NE} ile tanımlanabilir.

Tek bir dalga fonksiyonu ile temsil edilebilen N parçacıklı bir sistem için n'inci mertebeden indirgenmiş yoğunluk matrisi aşağıdaki şekilde verilir.

$$\gamma_n(\mathrm{r}_1',...,\mathrm{r}_n',r_1,...,\mathrm{r}_n)=\binom{N}{n}\int...\int\Psi_{NE}(\mathrm{r}_1',...,\mathrm{r}_n',r_{n+1},...,\mathrm{r}_N)\Psi^*{}_{NE}(\mathrm{r}_1,...,\mathrm{r}_N)\,dr_{n+1}...dr_N \quad (5.15)$$

İntegralin önünde yer alan $\binom{N}{n}$ ifadesi bilinen Binom katsayısıdır ve olası n parçacık kombinasyonlarının sayısını normalize etmek için bulunur. Bu yoğunluk matrislerinden özellikle birinci mertebe ve ikinci mertebe yoğunluk matrisleri yoğun bir şekilde kullanılır ve birinci mertebe yoğunluk matrisine özel olarak tek parçacık yoğunluk matrisi (one body density matrix, OBDM) adı verilir, ikinci mertebe yoğunluk matrisi de iki parçacık yoğunluk matrisi (two body density matrix) olarak adlandırılır. Yukarıda verilen genel tanımdan tek parçacık yoğunluk matrisi

$$\gamma_1(\mathrm{r}_1',\mathrm{r}_1)=\mathrm{N}\int...\int\Psi_{\mathrm{NE}}(\mathrm{r}_1',\mathrm{r}_2',...,\mathrm{r}_\mathrm{N})\Psi^*{}_{\mathrm{NE}}(\mathrm{r}_1,\mathrm{r}_2,...,\mathrm{r}_\mathrm{N})\,\mathrm{dr}_2...\mathrm{dr}_\mathrm{N} \quad (5.16)$$

şeklinde verilir. İntegralin önünde yer alan N çarpanının parçacıkların uzaysal yoğunluğu $n(r)$'yi verecek şekilde yoğunluk matrisini normalize ettiği açıktır. OBDM nin köşegen harici elemanları için doğrudan fiziksel bir tanım verilemese de, köşegen elemanları r_1 ile belirlenen nokta civarında bir parçacığın bulunması olasılığını verir. Bu yüzden yoğunluk matrisinin köşegen elemanlarının toplamı sistemdeki toplam parçacık sayısını verir.

$$tr\gamma_1(r_1',r_1)=\int\gamma_1(r_1,r_1)\,dr_1=N \quad (5.17)$$

Burada tr sembolü matrisin izi (trace) anlamında kullanılmıştır.

Aynı şekilde, yukarıda verilen genel tanımdan hareket edilerek iki parçacık yoğunluk matrisi,

$$\gamma_2(r_1'r_2',r_1r_2)=\frac{N(N-1)}{2}\int...\int\Psi_{NE}(\mathrm{r}_1',r_2',...,\mathrm{r}_N)\Psi^*{}_{NE}(\mathrm{r}_1,r_2,...,\mathrm{r}_N)\,dr_3...dr_N \quad (5.18)$$

şeklinde elde edilir. İkinci dereceden yoğunluk matrisinde sadece köşegen elemanları fiziksel olarak tanımlanabilecek bir niceliğe karşılık gelir. $\gamma_2(r_1 r_2, r_1 r_2) dr_1 dr_2$ ifadesi r_1 noktası civarındaki bir dr_1 hacmi içerisinde bir parçacık varken r_2 noktası civarındaki bir dr_2 hacminde bir diğer parçacık bulunması olasılığını verir. İki parçacık yoğunluk matrisinin köşegen elemanlarının toplamı da sistemdeki olası parçacık çiftlerinin sayısını verir, yani çift parçacık yoğunluk matrisinin normalizasyonu aşağıdaki şekildedir:

$$tr\gamma_2(r_1' r_2', r_1 r_2) = \int\int \gamma_2(r_1 r_2, r_2 r_1)\, dr_1 dr_2 = \frac{N(N-1)}{2} \tag{5.19}$$

γ_1 yoğunluk matrisinin γ_2 yoğunluk matrisinden elde edilebileceği yukarıda verilen genel tanımdan kolayca elde edilebilir:

$$\gamma_1(\mathrm{r}_1', \mathrm{r}_1) = \frac{2}{\mathrm{N}-1} \int \gamma_2(\mathrm{r}_1' \mathrm{r}_2, \mathrm{r}_1 \mathrm{r}_2)\, \mathrm{dr}_2 \tag{5.20}$$

Sistemi oluşturan parçacıklar arasında üç veya daha çok cisim etkileşmeleri yokken kuantum çok parçacık sistemi, γ_1 ve γ_2 yoğunluk matrisleri kullanılarak tam olarak tanımlanabilir.

5.3. TEK PARÇACIK YOĞUNLUK MATRİSİ ve DOĞAL ORBİTALLER

Tek parçacık yoğunluk matrisi çok sık kullanıldığından bazen sadece yoğunluk matrisi olarak adlandırılır ve çoğunlukla $\rho(r', r)$ şeklinde gösterilir. Tek parçacık yoğunluk matrisinin daha önce tanımladığımız alan operatörleri cinsinden tanımı oldukça basittir ve

$$\rho(\mathrm{r}', \mathrm{r}) = \gamma_1(\mathrm{r}', \mathrm{r}) = \left\langle \hat{\psi}^+(\mathrm{r}')\ \hat{\psi}(\mathrm{r}) \right\rangle \tag{5.21}$$

şeklinde verilir. Yine daha önce yaptığımız gibi alan operatörlerini artırma ve azaltma operatörleri ve ortonormal bir set oluşturan tek parçacık dalga fonksiyonları cinsinden ifade edersek

$$\begin{aligned}\rho(\mathrm{r}',\mathrm{r}) &= \left\langle \sum_{\mathrm{i}} \hat{\mathrm{a}}_{\mathrm{i}}^{+}\, \phi_{\mathrm{i}}^{*}(\mathrm{r}'), \sum_{\mathrm{j}} \hat{\mathrm{a}}_{\mathrm{j}}\, \phi_{\mathrm{j}}(\mathrm{r}) \right\rangle \\ &= \sum_{\mathrm{ij}} \phi_{\mathrm{i}}^{*}(\mathrm{r}')\, \phi_{\mathrm{j}}(\mathrm{r}) \left\langle \hat{\mathrm{a}}_{\mathrm{i}}^{+}, \hat{\mathrm{a}}_{\mathrm{j}} \right\rangle \end{aligned} \tag{5.22}$$

elde edilir. Eğer, kullanılan tek parçacık dalga fonksiyonları seti yoğunluk matrisini köşegen yapacak şekilde yani $\left\langle \hat{a}_i^{+}, \hat{a}_j \right\rangle = \delta_{ij}$ olacak şekilde seçilirse bu durumda yoğunluk matrisi

$$\begin{aligned}\rho(\mathrm{r}',\mathrm{r}) &= \sum_{\mathrm{ij}} \phi_{\mathrm{i}}^{*}(\mathrm{r}')\, \phi_{\mathrm{j}}(\mathrm{r})\, \mathrm{N}_{\mathrm{i}} \delta_{\mathrm{ij}} \\ &= \sum_{\mathrm{i}} \mathrm{N}_{\mathrm{i}}\, \phi_{\mathrm{i}}^{*}(\mathrm{r}')\, \phi_{\mathrm{i}}(\mathrm{r}) \end{aligned} \tag{5.23}$$

haline indirgenir. Bu şartı sağlayan $\phi_i(r)$ tek parçacık dalga fonksiyonları ***doğal orbitaller*** olarak adlandırılır ve bunlara karşılık gelen N_i sayıları bu orbitallere yerleşen parçacık sayılarını verir. Doğal orbitaller çok parçacık dalga fonksiyonlarının oluşturulmasında kullanılan tek parçacık durumlarının seçiminde oldukça etkili bir yöntemdir (Davidson 1972). Çok parçacık bozon sistemlerinde, yoğuşmuş ve yoğuşmamış kısımların oranları doğal orbitaller kullanılarak hesaplanabilir (Minguzzi ve ark. 1997). Bu orbitaller baz alındığında daha önce (5.12) denklemi ile verilen sistemin Hamiltonyen operatörünün beklenen değeri yani sistemin toplam enerjisi E çok daha basit bir forma indirgenerek

$$E = \sum_i N_i \left\langle i \left| \hat{T} \right| i \right\rangle + \sum_i N_i \left\langle i \left| V \right| i \right\rangle + \sum_{i,j} N_i N_j \left\langle ij \left| U \right| ij \right\rangle - \frac{1}{2} \sum_i N_i (N_i + 1) \left\langle ii \left| U \right| ii \right\rangle \tag{5.24}$$

haline gelir. Buradaki, $\left\langle i \left| \hat{T} \right| i \right\rangle$, $\left\langle i \left| V \right| i \right\rangle$ ve $\left\langle ij \left| U \right| ij \right\rangle$ ifadeleri doğal orbitallerin tanımladığı durumlar arasındaki matris elemanlarıdır ve daha önce Denk. (5.13)'te verilmiştir.

5.4. TABAN DURUM

Sistem taban durumda bulunduğunda sistemi tanımlayan doğal orbitallerin şekli ve her bir doğal orbitale yerleşen parçacık sayısı sistemin toplam enerjisi E'yi minimum yapacak şekilde düzenlenir. Bu temel prensipten hareket edilerek ve Denk.(5.24)'te sistemin toplam enerjisi için verilen ifade kullanılarak taban durumda hem doğal orbitaller hem de bu orbitallerde bulunan parçacık sayıları elde edilebilir.

Bu çalışmada, parçacıklar arası etkileşimlerin göz önüne alındığı N-parçacıklı bir bozon sisteminin fiziksel özelliklerinin belirlenmesinde sistemin durumu doğal orbitaller cinsinden tanımlanarak doğal orbitallerin ve seviyelerdeki parçacık sayılarının elde edilebileceği bir yöntem geliştirilmiştir. Bu bölümde geliştirilen bu yaklaşım tanımlanacaktır.

Bu bölümde gösterim kolaylığı açısından doğal orbitallerden oluşan baz seti bir sütun vektör olarak gösterilecektir.

$$\Phi(r) = \begin{Bmatrix} \phi_1(\mathrm{r}) \\ \phi_2(\mathrm{r}) \\ \vdots \\ \phi_i(\mathrm{r}) \\ \vdots \end{Bmatrix} \qquad \Phi^{\dagger}(r) = \left\{\phi_1^*(r), \phi_2^*(r), \cdots, \phi_i^*(r), \cdots\right\} \tag{5.25}$$

Denk.(5.23)'de de belirtildiği gibi tek-parçacık yoğunluk matrisi doğal orbitallerin kullanılması halinde diagonaldir.

$$\rho(r', r) = \sum_i N_i \, \phi_i^*(\mathrm{r}') \, \phi_i(\mathrm{r}) \tag{5.26}$$

Bu yoğunluk matrisinin yeni gösterimimizdeki ifadesi

$$\rho(r', r) = \Phi^{\dagger}(r') \mathbf{N} \Phi \ (r) \tag{5.27}$$

şeklinde bir matris çarpımı olarak yazılabilir. Burada

$$\mathbf{N} = \begin{Bmatrix} N_1 & 0 & \cdots & 0 & \cdots \\ 0 & N_2 & \cdots & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \\ 0 & 0 & \cdots & N_i & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \ddots \end{Bmatrix} \tag{5.28}$$

ile verilen **N** matrisi doğal orbitallerin baz alındığı sistemde yoğunluk matrisidir.

Şimdi aralarında ortonormal olan ve tam bir set oluşturan keyfi bir $\Psi^{\dagger} = \{\psi_1^*(\mathrm{r}),\ \psi_2^*(\mathrm{r}),\ \cdots \quad \psi_i^*(\mathrm{r}),\ \cdots\}$ tek parçacık dalga fonksiyonları setini göz önüne alalım. Bu durumda, doğal orbitaller bu fonksiyonların bir lineer kombinasyonu şeklinde ifade edilebilir.

$$\phi_i(r) = \sum_j c_{ij}\psi_j(r) \tag{5.29}$$

Vektörel gösterimimizi kullanırsak aynı ifade,

$$\Phi(r) = \mathbf{C}\Psi(r) \tag{5.30}$$

şeklinde de yazılabilir. Burada **C** matrisi c_{ij} elemanlarından oluşur. Şimdi tek parçacık yoğunluk matrisimiz bu baz seti cinsinden

$$\rho(r',r) = \Psi^{\dagger}(r')\ \mathbf{C}^{\dagger}\,\mathbf{N}\mathbf{C}\ \Psi\ (r) = \Psi^{\dagger}(r')\ \boldsymbol{\rho}\ \Psi\ (r) \tag{5.31}$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada $\boldsymbol{\rho} = \mathbf{C}^{\dagger}\,\mathbf{N}\mathbf{C}$ dir ve yoğunluk matrisinin yeni baz setinin belirlediği referans sistemindeki ifadesidir.

Burada, $\boldsymbol{\rho} = \{\rho_{ij}\}$ matrisinin aşağıdaki özellikleri sağladığının gösterilmesi oldukça kolaydır.

$$\begin{aligned} &\rho_{ii} \geq 0 \\ &\rho_{ij} = \rho_{ji} \\ &Tr(\boldsymbol{\rho}) = Tr(\mathbf{N}) = \sum_i N_i \end{aligned} \tag{5.32}$$

Denk.(5.12)'de çok parçacıklı bir bozon sistemi için verilen toplam hamiltonyen kullanılarak bu durumda toplam enerjinin beklenen değeri $\boldsymbol{\rho} = \{\rho_{ij}\}$ ve $\mathbf{C} = \{c_{ij}\}$ matrisleri cinsinden yazılabilir.

Teorik olarak **N** matrisi sonsuz eleman içerir ancak uygulamada parçacıklar arası etkileşimin zayıf olduğu sistemler incelenirken doğal orbitallerin sadece ilk birkaç tanesine karşılık gelen küçük matrislerin kullanılması oldukça yeterli olmaktadır. Ayrıca keyfi olarak seçilen $\Psi^{\dagger} = \{\psi_1^*(\mathrm{r}),\ \psi_2^*(\mathrm{r}),\ \cdots \quad \psi_i^*(\mathrm{r}),\ \cdots\}$ baz setininde prensipte sonsuz boyutlu olması gerekir. Fakat keyfi baz setinin aranan doğal orbitallere yakın olacak şekilde seçilmesi halinde çok küçük baz setleri pratikte yeterli olmaktadır. Yapılan hesaplamalar baz setinin doğal orbitallerden uzak olması halinde de açılımın çok hızlı yakınsamakta olduğunu ve pratik olarak hesaplamaya imkan veren büyüklükte baz setlerinin yeterli olduğunu göstermiştir.

Sistemin taban durumunda parçacıkların doğal orbitallere yerleşimleri ve bunun sonucunda $\boldsymbol{\rho} = \{\rho_{ij}\}$ matrisinin elemanları toplam enerjiyi minimum yapacak şekilde olmalıdır. Dolayısıyla (5.32) denklemi ile verilen sınırlamalar altında toplam enerjiyi minimum yapan $\boldsymbol{\rho} = \{\rho_{ij}\}$ matrisi sistemin taban durumunu verecektir. Elde edilen bu matris ise diagonalize edilerek doğal orbitaller ve bu doğal orbitallerin doluluk oranları elde edilebilir.

Sistemin taban durumunu belirlerken takip edilebilecek bir diğer yol ise toplam enerjiyi doğrudan N_i doluluk oranları ve $\mathbf{C} = \{c_{ij}\}$ matrisinin elemanları cinsinden ifade etmek ve toplam enerjiyi verilen sınırlamalar altında minimum yapan N_i doluluk oranları ve $\mathbf{C} = \{c_{ij}\}$ lineer kombinasyon katsayılarını belirlemektir. Böylece hem doğal orbitaller hem de bu seviyelerin doluluk oranları doğrudan belirlenmiş olur. Bu çalışmada ikinci yol tercih edilmiştir.

5.5. BOZON SİSTEMLERİ İÇİN DFT

Hem doğal orbitalleri hem de bu seviyelerin doluluk oranlarını belirlemek için yoğunluk fonksiyonelleri yaklaşımı da kullanılabilir. Daha önce verilen Kohn-Sham denklemlerini hatırlarsak sistemi tanımlayan doğal orbitaller uygun bir etkin potansiyel kullanılarak oluşturulan tek parçacık Schrödinger denkleminden elde edilebilir. Yani doğal orbitaller

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{etk}(\mathbf{r})\right]\phi_k(\mathbf{r}) = \varepsilon_k \phi_k(\mathbf{r}) \tag{5.33}$$

şeklinde verilen Schrödinger denkleminin öz fonksiyonlarıdır. Burada, V_{etk} potansiyeli sistemi sınırlayan tuzak potansiyelinin ve parçacıklar arasındaki etkileşmelerin katkılarını içeren uygun bir potansiyeldir. Daha önce verilen tanımlama kullanılarak

$$V_{etk}(r_1) = V(\mathbf{r_1}) + \frac{\delta E_{xc}[n]}{\delta n(\mathbf{r_1})} + \int d^3 r_1 \, n(\mathbf{r_1}) U(r_{12}) \tag{5.34}$$

yazılablilir. Yukarıdaki ifadede denklemin sağ tarafındaki birinci terim sistemi sınırlayan tuzaklama potansiyeli, son terimse paraçacıklararası etkileşimleri içeren Hartree potansiyelidir. $E_{xc}[n]$ terimi diğer terimlerde hesaplamaya katılmamış olan bütün katkıları içerir ve exchange-correlation enerjisi olarak adlandırılır. Ne yazık ki toplam enerjiye olan bu katkı tam olarak bilinmemektedir ve buradan kaynaklanan engel DFT yaklaşımının esas eksikliğidir.

Bozon sistemleri için başlangıçta keyfi bir parçacık yoğunluğu kullanılarak etkin potansiyel hesaplanır. Bu etkin potansiyel için Denk.(5.33) çözülerek elde edilen doğal orbital dalga fonksiyonları ve Denk.(5.12) de verilen hamiltonyen operatörü kullanılarak Denk.(5.24) te verilen toplam enerji elde edilebilir. Bu enerji ifadesini minimum yapacak şekilde seviyelerdeki parçacık sayıları $\mathrm{N_i}$ ler belirlenir. Bu parçacık sayıları kullanılarak

$$\mathrm{n}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathrm{i}} \mathrm{N_i} \left|\phi_{\mathrm{i}}(\mathbf{r})\right|^2 \tag{5.35}$$

denkleminden tekrar parçacık yoğunluğu elde edilir. Bu işlemler yakınsama sağlanana kadar tekrarlanarak sistemin taban durumuna karşılık gelen çözüm elde edilir.

Verilen bu DFT yaklaşımı parçacıklar arasındaki etkileşmenin bir temas potansiyeli olması durumunda exchange-correlation potansiyeli için Huang-Yang (Huang ve Yang 1957) teorisinden elde edilen yaklaşık bir ifade kullanılarak denenmiştir. Ancak, DFT yaklaşımından elde edilen sonuçlarla yukarıda verilen doğrudan doğal orbitallerin belirlenmesine dayalı yöntemden elde edilen sonuçlar arasında bir farklılık gözlenmemiştir. Kullanılan parçacıklar arası etkileşim potansiyelinin şekli haricinde doğrudan doğal orbitallerin ve doluluk oranlarının elde edilmesine dayalı olan yöntemde herhangi bir yaklaşım kullanılmadığı için bu yöntem tam (exact) olarak kabul edilebilir. Bu sebeple sonuçlar kısmında sadece doğrudan yaklaşımla elde edilen sonuçlar tartışılmıştır.

Bu çalışmada hesaplamaların kolaylığı ve literatürde bulunan çalışmalarla karşılaştırılabilirliği açısından sistemi oluşturan parçacıklar arasındaki etkileşim potansiyelinin bir temas potansiyeli olduğu varsayılmıştır. Ancak, yapılan hesaplamalar, çok parçacık bozon sistemlerinin taban durumdaki (sıfır sıcaklık) bazı özelliklerini incelerken temas potansiyeli yaklaşımının kullanılmasının doğru olmadığını göstermiştir. Bu konu daha sonra tartışma bölümünde daha geniş olarak ele alınacaktır.

6. HESAPLAMALAR

Bir gaz bulutunda bulunan atomlar arasındaki gerçek etkileşme oldukça karmaşıktır. Ancak, klasik olarak, yeterince düşük sıcaklıklar ve düşük yoğunluklar göz önüne alındığında atomlar birbirleri ile etkileşebilecek kadar yakın mesafelere nadiren geldikleri varsayılır. Bunun sonucunda düşük sıcaklıklarda ve düşük yoğunluklarda atom-atom etkileşmelerini tanımlamak için genellikle temas potansiyeli yaklaşımı kullanılır. Bu yaklaşım atomların arasındaki ortalama mesafenin kısa olduğu yüksek yoğunluklarda zayıftır. Bununla birlikte, sadece parçacık çiftleri arasındaki ikili çarpışmaların göz önüne alındığı seyrek ve soğuk gazlarda atomlar arasındaki etkileşimi tanımlamada uygun bir yaklaşım olduğu kabul edilmektedir. Parçacık çiftleri arasındaki bu çarpışmalar tek bir parametre yani s-dalga saçılma uzunluğu kullanılarak karakterize edilir (Dalfovo ve ark. 1999).

Düşük sıcaklıklarda yani momentumun küçük olduğu durumlarda bu yaklaşımın güvenli bir şekilde kullanılabileceğine inanılmaktadır. Bu çalışmada parçacık çiftleri arasındaki etkileşimi tanımlamak için

$$U(\mathbf{r}_{12}) = U_0\,\delta(\mathbf{r}) \tag{6.1}$$

ile verilen temas potansiyeli yaklaşımı kullanılacaktır. Burada U_0 çiftlenim parametresi olarak tanımlanan bir sabittir. Bozon sistemleri için s-dalga saçılma uzunluğuna bağlı olarak aşağıdaki şekilde verilir.

$$U_0 = \frac{4\pi\hbar^2\,a}{m} \tag{6.2}$$

Düşük sıcaklıklarda magneto optik tuzaklarla sınırlandırılmış bir bozon sistemi için sınırlandırıcı potansiyel yaklaşık olarak harmonik kabul edilebilir. Bu sebeple bu çalışmada tuzak potansiyeli

$$V(r) = \frac{1}{2} m\omega_{ho}^2 r^2 \tag{6.3}$$

şeklinde izotropik olarak alınmıştır. Çalışmada tuzağın karakteristik genişliği ve enerjisi ile belirlenen indirgenmiş birim sistemi kullanılmış uzunluklar

$a_{h0} = (\hbar / m\omega_{h0})^{1/2}$ ve enerjiler $\hbar\omega_{ho}$ birimlerinde tanımlanmıştır. Burada m bozonun kütlesidir.

Yukarıda belirtilen yaklaşımlar altında indirgenmiş birimlerde sistemin toplam Hamiltonyen operatörü aşağıdaki şekilde verilir:

$$\hat{H} = \sum_{i}^{N}\left[-\frac{1}{2}\nabla_i^2 + \frac{r_i^2}{2}\right] + \sum_{i<j}^{N} U\left(r_{ij}\right) \tag{6.4}$$

Burada $U(r)$ indirgenmiş koordinatlarda aşağıdaki şekildedir:

$$U(r) = U_0\,\delta(r) = 4\pi\frac{a}{a_{h0}}\delta(r) \tag{6.5}$$

6.1. TOPLAM ENERJİ

N-parçacıklı bir bozon sisteminin özelliklerinin hesaplanmasında Hamilton operatörünün artırma ve eksiltme operatörleri cinsinden ifadesi (5.12) denkleminde ve ilgili matris elemanları (5.13) denkleminde verilmiştir. Doğal orbitallerin kullanılması halinde ise toplam enerjinin beklenen değerinin basitleşmiş hali (5.24) denklemi ile verilmiştir. Şimdi bu denklemden başlayarak sistemin taban durum özelliklerinin hesaplanması ile ilgili ayrıntıları vereceğiz.

Enerji hesaplamaları yapılırken doğal orbitallerin radyal ve açısal bileşenlerinin ayrılabilir olduğu varsayılmış ve açısal kısım için bilinen küresel harmonik fonksiyonlar $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ kullanılarak

$$\phi_i(r) = \phi_{nlm}(r) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{6.6}$$

şeklinde tanımlanmıştır. Burada farklı orbitalleri gösteren i indisi yerine orbitalleri tanımlayan nlm kuantum sayıları seti kullanılmaya başlanmıştır. Burada n baş kuantum sayısı, l orbital açısal momentum kuantum sayısı ve m de açısal momentumun z bileşenine karşılık gelen kuantum sayısıdır. Bu durumda her bir

seviyede bulunan parçacık sayısı da $N_i = N_{nlm}$ şeklinde olacaktır. Ancak göz önüne aldığımız sistem izotropik olduğu için, açısal momentumun z bileşenine karşılık gelen seviyeler dejeneredir ve bu seviyelerin her birinde eşit sayıda parçacık bulunması gerekir. Yani $N_{nlm} = N_{nl}$ yazılabilir. Şimdi bu tanımlamaları kullanarak (5.24) denkleminde verilen toplam enerjinin beklenen değerindeki terimleri sırasıyla düzenleyelim.

(5.24) denkleminin sağ tarafındaki birinci terim kinetik enerjinin toplam enerjiye katkısını verir. Doğal orbitaller için yukarıda verilen tanım kullanılarak

$$\begin{aligned}\sum_i N_i \left\langle i \left| \hat{T} \right| i \right\rangle &= \sum_{nlm} N_{nl} \left\langle nlm \left| \hat{T} \right| nlm \right\rangle \\ &= \sum_{nlm} N_{nlm} \int \phi^*_{nlm}(r) \left(-\frac{1}{2}\nabla^2 \right) \phi_{nlm}(r) d^3 r \\ &= \sum_{nlm} N_{nlm} \int R^*_{nl}(r) Y^*_{lm}(\theta,\phi) \left(-\frac{1}{2}\nabla^2 \right) R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta,\phi) d^3 r\end{aligned} \tag{6.7}$$

yazılabilir. Burada küresel harmoniklerin laplace operatörü altındaki bilinen özellikleri kullanılarak

$$\sum_i N_i \left\langle i \left| \hat{T} \right| i \right\rangle = \sum_{nlm} N_{nl} \int R^*_{nl}(r) \left(-\frac{1}{2r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_{nl}(r) r^2 dr \tag{6.8}$$

bulunur. Burada m kuantum sayısı üzerinden olan toplam alındığında

$$\sum_i N_i \left\langle i \left| \hat{T} \right| i \right\rangle = \sum_{nl} (2l+1) N_{nl} \int R^*_{nl}(r) \left(-\frac{1}{2r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_{nl}(r) r^2 dr \tag{6.9}$$

elde edilir.

Toplam enerji içindeki sınırlayıcı potansiyelden gelen katkıyı ifade eden (5.24) denklemindeki ikinci terim benzer şekilde

$$\sum_i N_i \langle i|V|i\rangle = \sum_{nlm} N_{nl} \langle nlm|V|nlm\rangle$$
$$= \sum_{nl} (2l+1) N_{nl} \int R_{nl}^*(r) \left(\frac{r^2}{2}\right) R_{nl}(r) r^2 dr \qquad (6.10)$$

elde edilir.

Parçacıklar arası etkileşimin toplam enerjiye katkısını ifade eden (5.24) denklemindeki üçüncü ve dördüncü terimleri ele almadan önce $\langle ij|U|ij\rangle$ matris elemanları üzerinde bir düzenleme yapmak faydalı olacaktır. Temas potansiyeli yaklaşımı kullanıldığında

$$\langle ij|U|ij\rangle = \int\int d^3\mathrm{r}_1\, d^3\mathrm{r}_2\ \phi_i^*(\mathrm{r}_1)\phi_j^*(\mathrm{r}_2) 4\pi \frac{a}{a_{ho}} \delta(\mathrm{r}_1 - \mathrm{r}_2)\phi_i(\mathrm{r}_1)\phi_j(\mathrm{r}_2) \qquad (6.11)$$

elde edilir. Dirac delta fonksiyonunun özelliklerinden yararlanılarak r_2 üzerinden olan integral hesaplanabilir ve matris elemanı

$$\langle ij|U|ij\rangle = 4\pi \frac{a}{a_{ho}} \int d^3\mathrm{r}\ |\phi_i(\mathrm{r})|^2 |\phi_j(\mathrm{r})|^2 \qquad (6.12)$$

şekline indirgenir. Bu sonuç ve küresel harmoniklerin bilinen özellikleri (Arfken ve Weber 2001) kullanılarak (5.24) denkleminin sağ tarafındaki üçüncü terim

$$\sum_{i,j} N_i N_j \langle ij|U|ij\rangle = \frac{a}{a_{ho}} \sum_{nl} \sum_{n'l'} N_{nl} N_{n'l'} (2l+1)(2l'+1) \int |R_{nl}|^2 |R_{n'l'}|^2 r^2 dr \qquad (6.13)$$

şeklinde elde edilir. Denklem (5.24) teki son terim ise

$$-\frac{1}{2}\sum_i N_i(N_i+1)\langle ii|U|ii\rangle = -\frac{1}{2}\frac{a}{a_{ho}} \sum_{nl} N_{nl}(N_{nl}+1)(2l+1)^2 A_l \int |R_{nl}(r)|^4 r^2 dr \qquad (6.14)$$

şeklinde yazılabilir. Buradaki A_l katsayıları sadece açısal momentum kuantum sayısına bağlı olan sabitlerdir ve

$$A_l = 4\pi \sum_{m=-l}^{l} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \left|Y_{lm}(\theta,\varphi)\right|^4 \sin\theta \, d\theta \, d\varphi \tag{6.15}$$

denklemiyle verilirler.

Yukarıda elde edilen toplam enerji terimleri bir araya toplandığında sonuç olarak toplam enerjinin beklenen değeri için

$$\begin{aligned} E = & \sum_{nl} (2l+1) N_{nl} \int R_{nl}^{*}(r) \left(-\frac{1}{2r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_{nl}(r) r^2 dr \\ & + \sum_{nl} (2l+1) N_{nl} \int R_{nl}^{*}(r) \left(\frac{r^2}{2} \right) R_{nl}(r) r^2 dr \\ & + \frac{a}{a_{ho}} \sum_{nl} \sum_{n'l'} N_{nl} N_{n'l'} (2l+1)(2l'+1) \int \left|R_{nl}\right|^2 \left|R_{n'l'}\right|^2 r^2 dr \\ & - \frac{1}{2} \frac{a}{a_{ho}} \sum_{nl} N_{nl} (N_{nl}+1)(2l+1)^2 A_l \int \left|R_{nl}(r)\right|^4 r^2 dr \end{aligned} \tag{6.16}$$

ifadesi elde edilir.

6.2. AÇILIM KATSAYILARI

Ancak burada kullanılan doğal orbitallerin radyal kısımları olan $R_{nl}(r)$ fonksiyonları bilinmemektedir. Daha önce de belirtildiği gibi bu doğal orbitaller bilinen herhangi bir tam fonksiyonlar seti üzerinden seriye açılabilir.

$$R_{nl}(r) = \sum_i c_i^{nl} X_{il}(r) \tag{6.17}$$

Burada $X_{il}(r)$ fonksiyonları keyfi olarak seçilebilecek olan bir tam settir. Ancak bu çalışmada, daha önce verilen yoğunluk fonksiyonel teorisinde sadece Hartree teriminin göz önüne alındığı duruma karşılık gelen

$$\left(-\frac{1}{2r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{r^2}{2} + \frac{\ell(\ell+1)}{2r^2} + U_0 \, n(r) \right) X_{il}(r) = \varepsilon_{il} X_{il}(r) \tag{6.18}$$

öz değer denkleminin çözümleri kullanılmıştır. Burada $n(r)$, r noktasında bulunan parçacık yoğunluğudur. Bu özdeğer denkleminin çözümlerinin doğal orbitallere oldukça yakın olması ve dolayısıyla oldukça küçük baz setlerinin yeterli olması beklenir. Sonuçların güvenilirliğini kontrol etmek amacıyla $n(r) = 0$ durumuna karşılık gelen özdeğer denkleminin çözümleri de baz seti olarak kullanılmıştır. İki baz seti ile elde edilen sonuçlar arasında bir fark görülmemiştir.

Denk.(6.15)'te verilen seri açılımı Denk.(6.16)'da yerine yazılır ve (6.18) denklemi de göz önünde bulundurulursa, sistemin toplam enerjisinin beklenen değeri için sadece c_i^{nl} açılım katsayılarına bağlı aşağıdaki ifade elde edilir.

$$E = \sum_{nl} (2l+1) N_{nl} \left\{ \sum_i \left(c_i^{nl}\right)^2 \varepsilon_{il} - \sum_i \sum_j c_i^{nl} c_j^{nl} I_{ij}^{l} \right. \\ \left. + \sum_{n'l'} (2l'+1) \left(N_{n'l'} - \frac{1}{2}(N_{n'l'}+1) A_{l'} \delta_{nn'} \delta_{ll'} \right) \sum_i \sum_j \sum_p \sum_r c_i^{nl} c_j^{nl} c_p^{n'l'} c_r^{n'l'} I_{ijpr}^{ll'} \right\} \tag{6.19}$$

Denklemdeki I_{ij}^{l} ve $I_{ijpr}^{ll'}$ ifadeleri aşağıdaki şekilde tanımlanan integrallerdir.

$$I_{ij}^{l} = \int_0^\infty U_o n(r) X_{il} X_{jl} \; r^2 \, dr \tag{6.20}$$

$$I_{ijpr}^{ll'} = \frac{a}{a_{ho}} \int_0^\infty X_{il} X_{jl} \; X_{pl'} X_{rl'} \, r^2 \, dr \tag{6.21}$$

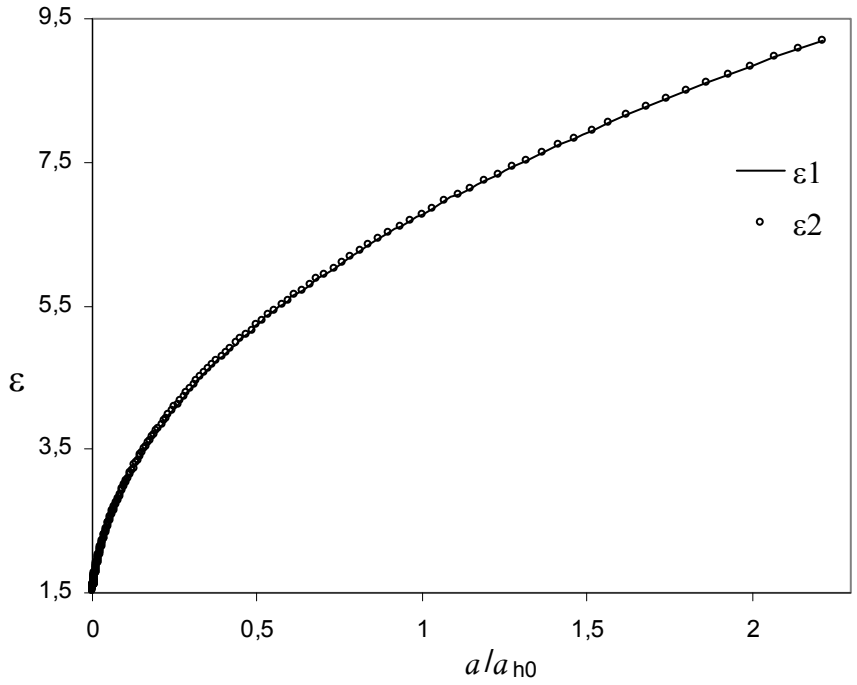
Açılım katsayıları c_i^{nl} ve seviyelerde bulunan parçacık sayıları N_{nl} Denk.(6.19)'de verilen enerji ifadesinin minimum yapılması ile elde edilebilir. Çok sayıda açılım katsayısı bulunmasına rağmen Denk.(6.19)'in aranan katsayılara göre ağırlıkla kuadratik ve en fazla dördüncü mertebe terimleri içermesi sebebiyle bu minimizasyon problemi oldukça büyük katsayı setleri için çözülebilir.

6.3. SAYISAL HESAPLAMANIN AYRINTILARI

Uzaysal dağılım sürekli olmasına rağmen pratikte uzaklık küçük parçalara bölünür ve dalga fonksiyonu grid noktalarında hesaplanır. Bu çalışmada radyal yönde 10 tuzak genişliğindeki mesafe 500 parçaya bölünmüştür. Denk.(6.18) ile verilen Schrödinger denklemi bu 500 noktada Numerov yöntemi kullanılarak çözülmüş ve baz setini oluşturan dalga fonksiyonları hesaplanmıştır. Bu dalga fonksiyonları kullanılarak I_{ij}^{l} ve $I_{ijpr}^{ll'}$ integralleri Denk.(6.20) ve Denk.(6.21) den hesaplanmıştır. Bundan sonra Denk.(6.19) ile verilen enerji ifadesini minimum yapan c_i^{nl} katsayıları ve N_{nl} parçacık sayıları IMSL matematiksel fonksiyonlar paketinde yer alan bir program kullanılarak belirlenmiştir. Bulunan katsayılar kullanılarak (6.17) denkleminden doğal orbitaller elde edilmiştir.

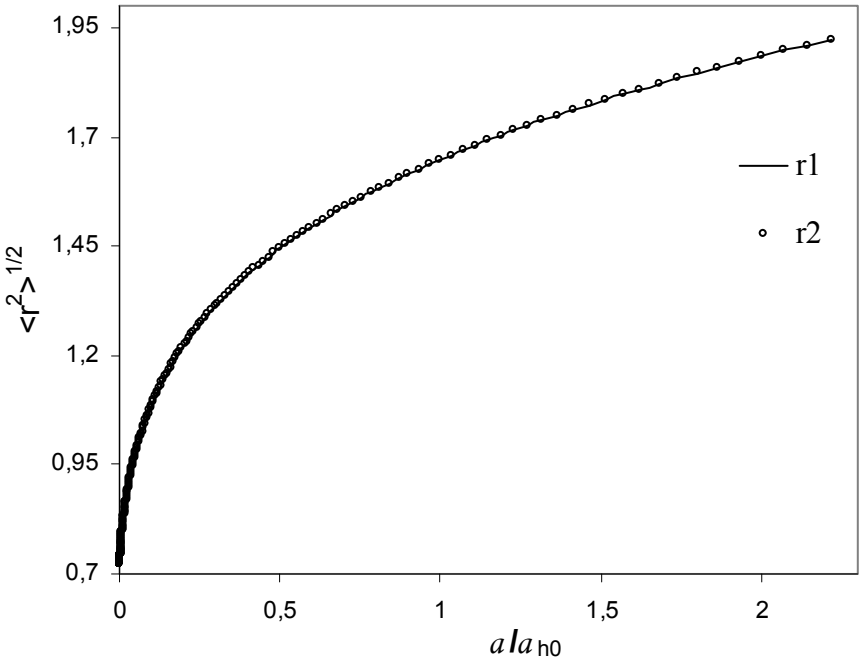
Hesaplamalar etkileşim parametresinin belirli bir değerinde yapıldıktan sonra, etkileşim parametresinin yeni bir değeri için hesaplamaya başlanırken önce (6.18) denklemindeki $n(r)$ parçacık yoğunluğu için bir önceki hesaplama sonucunda bulunan parçacık yoğunluğu kullanılmıştır. Arkasından yapılan bu yeni hesaplamadan bulunan parçacık yoğunluğu kullanılarak hesaplamalar tekrarlanmıştır.

Hesaplamaların tutarlılığının sınanması için, yukarıda her bir etkileşim parametresi için yapıldığı belirtilen iki hesaplamada bulunan sonuçlar karşılaştırılmıştır. Baz setlerinin belirlenmesinde iki farklı yoğunluk kullanılarak yapılan hesaplamalardan elde edilen toplam enerjiler, doğal orbitaller ve seviyelerin doluluk oranları arasında bir farklılık gözlenmemiştir.



Şekil 6.1. Parçacık başına düşen enerji için iki farklı başlangıç yoğunluk dağılımı kullanılarak yapılan hesaplamanın sonuçları saçılma uzunluğunun bir fonksiyonu olarak çizilmiştir. $\varepsilon 1$ başlangıçta farklı bir etkileşim parametresi için ve $\varepsilon 2$ ise bir önceki adımda bulunan parçacık yoğunluğu kullanılarak tekrarlanan hesaplamadan elde edilmiştir.

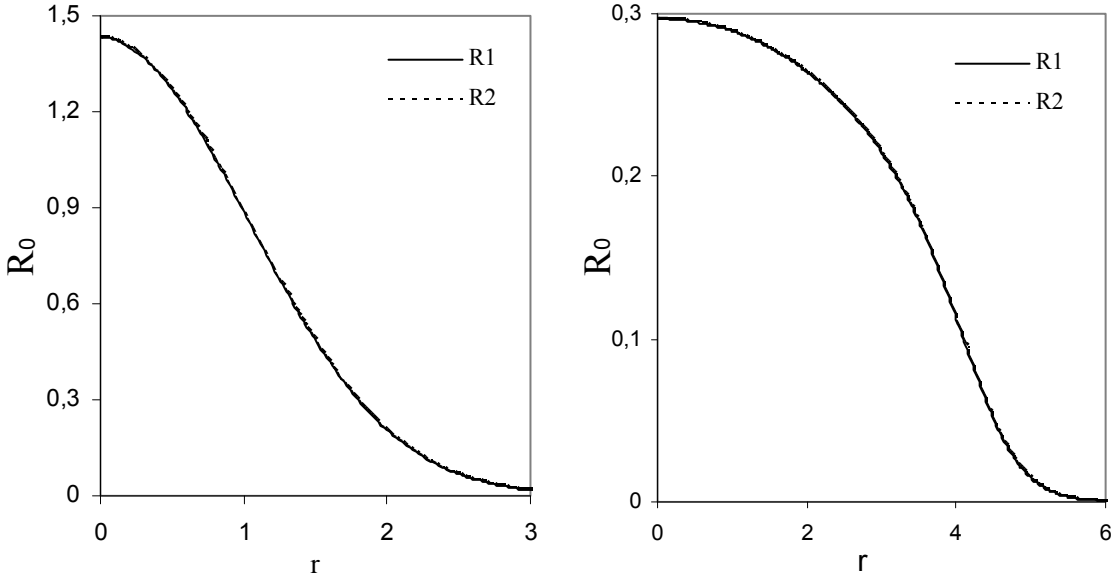
Şekil 6.1'de parçacık başına düşen enerji için iki farklı başlangıç yoğunluk dağılımı kullanılarak yapılan hesaplamanın sonuçları saçılma uzunluğunun bir fonksiyonu olarak çizilmiştir. $\varepsilon 1$, başlangıçta farklı bir etkileşim parametresi için elde edilmiş olan parçacık yoğunluğu kullanılarak hesaplanan parçacık başına düşen enerjiyi gösterir. $\varepsilon 2$ ise bir önceki adımda bulunan parçacık yoğunluğu kullanılarak tekrarlanan hesaplamadan elde edilen parçacık başına düşen enerjiyi göstermektedir. Parçacık yoğunluğu için farklı bir başlangıç değeri seçmekle gerçek değerlerinin kullanılması arasındaki bağıl fark 10^{-4} mertebesindedir. Şekil 6.2'de ise aynı karşılaştırma parçacıkların ortalama eksenel yerdeğiştirmeleri için yapılmıştır. Burada da her iki grafik arasında bir fark görülmemektedir. Ancak hesaplamalarda iki değer arasındaki bağıl fark 10^{-5} mertebesindedir.



Şekil 6.2. Ortalama eksenel yerdeğiştirme için iki farklı başlangıç yoğunluk dağılımı kullanılarak yapılan hesaplamanın sonuçları saçılma uzunluğunun bir fonksiyonu olarak çizilmiştir. r1 başlangıçta farklı bir etkileşim parametresi için ve r2 ise bir önceki adımda bulunan parçacık yoğunluğu kullanılarak tekrarlanan hesaplamadan elde edilmiştir.

Şekil 6.3.'te, yine farklı bir parçacık yoğunluğuna karşılık gelen baz seti kullanılarak ve gerçek parçacık yoğunluğuna karşılık gelen baz seti kullanılarak a) etkileşimlerin olmadığı durum için b) $a = 256\,a_{Rb}$ saçılma uzunluğu için hesaplanan taban durum doğal orbitallerini göstermektedir. Etkileşimin olmadığı durumda hesaplamalar arasındaki bağıl fark 10^{-4} mertebesinde iken $a = 256\,a_{Rb}$ saçılma uzunluğunda bağıl fark 10^{-3} mertebesindedir. Saçılma uzunluğunun $a = 256\,a_{Rb}$ olduğu yani parçacıklar arasında güçlü bir etkileşimin bulunduğu durumda dahi parçacık yoğunluğunun keyfi bir değeri ile başlamakla gerçek değeri ile başlamak arasında doğal orbitalin taban durumunu etkileyecek belirgin bir farklılık bulunmamaktadır.

a) **b)**



Şekil 6.3. Farklı bir parçacık yoğunluğuna karşılık gelen baz seti kullanılarak ve gerçek parçacık yoğunluğuna karşılık gelen baz seti kullanılarak **a)** etkileşimlerin olmadığı durum için **b)** $a = 256\,a_{Rb}$ saçılma uzunluğu için hesaplanan taban durum doğal orbitalleri konumun bir fonksiyonu olarak çizilmiştir.

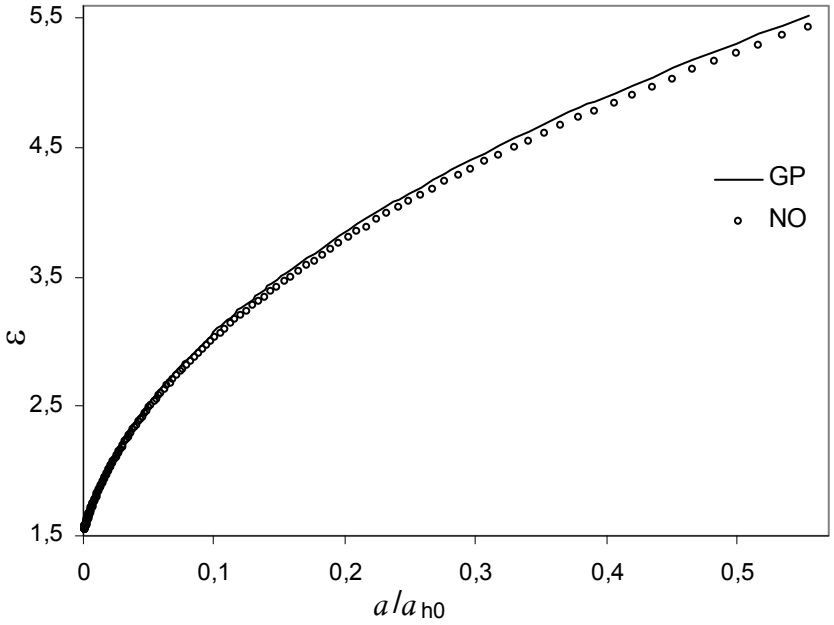
Oluşan küçük farklılıkların kaynağı ise farklı bir başlangıç yoğunluğu kullanıldığında elde edilen baz seti ile doğal orbitallerin yeterli bir şekilde ifade edilebilmesi için açılımda daha fazla terimin kullanılmasına ihtiyaç duyulmasından kaynaklanmaktadır. Buradaki hesaplamalarda seri açılımında sadece ilk 10 terim kullanılmıştır. Buna rağmen elde edilen sonuçların tutarlılığı oldukça iyidir. Dolayısıyla doğal orbitallerin ve doluluk oranlarının hesaplanmasında kullanılan algoritmanın verimli ve güvenli biçimde çalıştığını söylemek mümkündür.

7. SONUÇLAR

Bu çalışmada Kohn-Sham yaklaşımından esinlenilerek geliştirilen ve doğal orbitallerin kullanımına dayalı bir yaklaşımla T=0 K sıcaklığında ve küresel simetrik bir tuzakta tuzaklanmış N-parçacıklı bir bozon sistemi için bazı yoğuşma özellikleri hesaplanmıştır. $10 < \mathrm{N} < 3000$ aralığındaki çeşitli bozon sayıları ve $0 < a < 800\,a_{\mathrm{Rb}}$ aralığındaki çeşitli s-dalga saçılma uzunlukları için hesaplamalar yapılmıştır. Yapılan ilk BEC deneylerinde Rubidyum kullanıldığı için bu çalışmada da Rb atomlarından oluşan bir sistem göz önüne alınmıştır. ^{87}Rb için s-dalga saçılma uzunluğu a_{Rb} değeri deneysel olarak $85a_0 < a_{\mathrm{Rb}} < 140a_0$ aralığındadır (Gardner 1995). Burada $a_0 = 0{,}5292\ \mathrm{A}^{\circ}$, Bohr yarıçapıdır. Literatürde, genellikle $a_{\mathrm{Rb}} = 100a_0$ değeri kullanılır ve yapılan deneysel çalışmalarda kullanılan tuzaklar için saçılma uzunluğunun tuzak genişliğine oranı yaklaşık olarak $a_{\mathrm{Rb}} / a_{\mathrm{h0}} = 0{,}00433$ tür (Dalfovo ve Stringari 1996, Baym ve Pethick 1996).

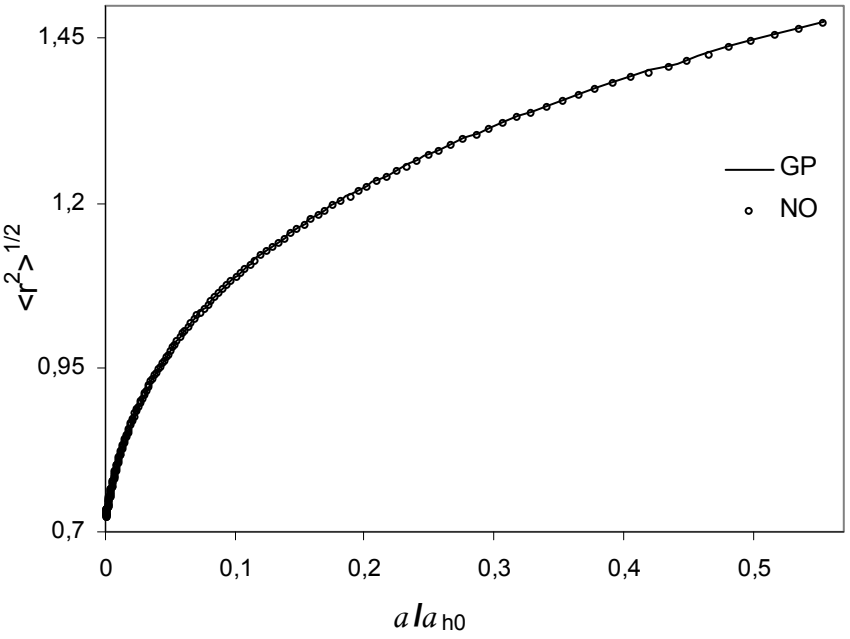
Bu bölümde bu çalışmada yapılan hesaplamalar, benzer fiziksel özellikler için literatürde bulunan sonuçlarla birlikte karşılaştırılmalı olarak sunulacaktır.

Şekil 7.1'de küresel harmonik bir tuzakta bulunan birbiri ile etkileşen 100 bozon için bu çalışmada elde edilen ve GP denklemlerinden Dalfovo ve Stringari (1996) tarafından hesaplanan parçacık başına düşen enerji değerleri verilmiştir. Düz çizgi GP denklemlerinden elde edilen sonuçları, yuvarlaklar ise bu çalışmada elde edilen sonuçları göstermektedir. Grafikte parçacık başına düşen enerji, s-dalga saçılma uzunluğunun bir fonksiyonu olarak çizilmiştir. Burada s-dalga saçılma uzunluğu $0 < a < 128\,a_{\mathrm{Rb}}$ aralığında seçilmiştir. Hem bu çalışmadan, hem de GP denklemlerinden elde edilen sonuçlarda etkileşim parametresinin artması ile parçacık başına düşen enerjinin benzer şekilde arttığı görülmektedir. Şekil 7.1'de görüldüğü gibi GP denkleminden elde edilen enerji değerleri bu çalışmada elde edilen değerlerden çok az büyüktür. GP yaklaşımında parçacığın kendisi ile etkileşmesi de hesaplamanın içerisine dahil edildiğinden bu beklenen bir sonuçtur.



Şekil 7.1. Etkileşen 100 bozon için parçacık başına düşen enerji saçılma uzunluğunun bir fonksiyonu olarak çizilmiştir. GP denkleminden hesaplanan parçacık başına düşen enerji düz çizgi ile ve NO denklemlerinden hesaplanan parçacık başına düşen enerji yuvarlaklarla gösterilmiştir.

Şekil 7.1'de verilene benzer bir karşılaştırma Şekil 7.2'de bozonların eksenel yerdeğiştirmesi için verilmiştir. Bozonların eksenel yer değiştirmesi tuzağın merkezinden r yönündeki ayrılma miktarlarının kare-ortalamasının karekökü, $\left\langle \mathrm{r}^2 \right\rangle^{1/2}$ şeklinde tanımlanır ve tuzak içerisinde bozonların ne kadar dağıldığının bir göstergesidir. $0 < a < 128\, a_{\mathrm{Rb}}$ aralığındaki s-dalga saçılma uzunluğu değerleri kullanılarak bu çalışmada bulunan sonuçlarla GP denklemlerinden bulunan sonuçlar saçılma uzunluğunun bir fonksiyonu olarak çizilmiştir. Düşük yoğunlukta ve etkileşimin zayıf olduğu bölgede her iki sonuç birbiri ile aynıdır. Saçılma uzunluğunun artması, yani parçacıklar arasındaki enerjinin artması ile parçacıklar birbirlerinden bir miktar uzaklaşırlar. Bunun sonucu olarak bozonlar tuzağın merkezinden tuzağın kenarlarına doğru yayılmaya başlarlar. Grafikten de görüleceği üzere GP denklemlerinden elde edilen sonuçlar ile bu çalışmadan elde edilen sonuçlar arasında neredeyse mükemmel bir uyum bulunmaktadır. Zaten GP denklemlerinde fazladan hesaplanan parçacıkların kendileri ile etkileşiminden

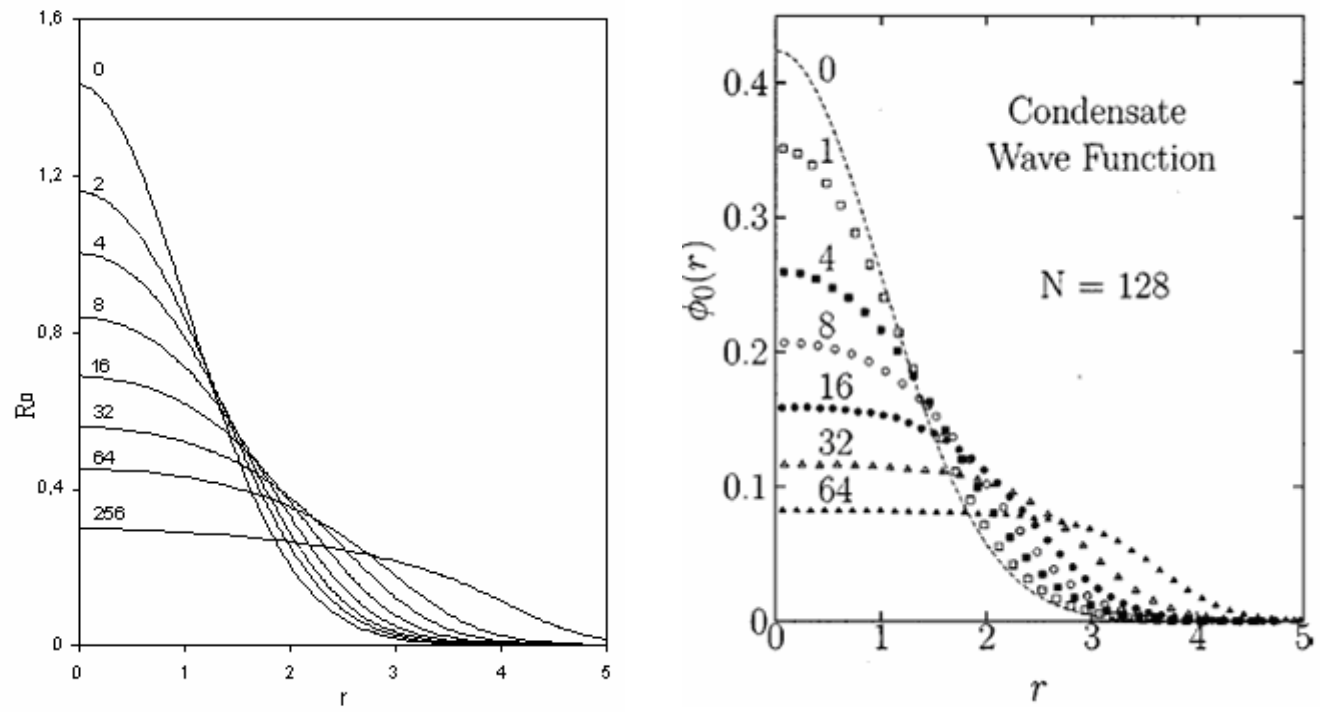


Şekil 7.2. Etkileşen 100 bozon için ortalama eksenel yerdeğiştirme, saçılma uzunluğunun bir fonksiyonu olarak çizilmiştir. GP denkleminden hesaplanan ortalama eksenel yerdeğiştirme düz çizgi ile ve NO denklemlerinden hesaplanan ortalama eksenel yerdeğiştirme yuvarlaklarla gösterilmiştir.

kaynaklanan enerji çok büyük değildir ve parçacıkların uzaysal dağılımını çok fazla etkilemesi beklenmez.

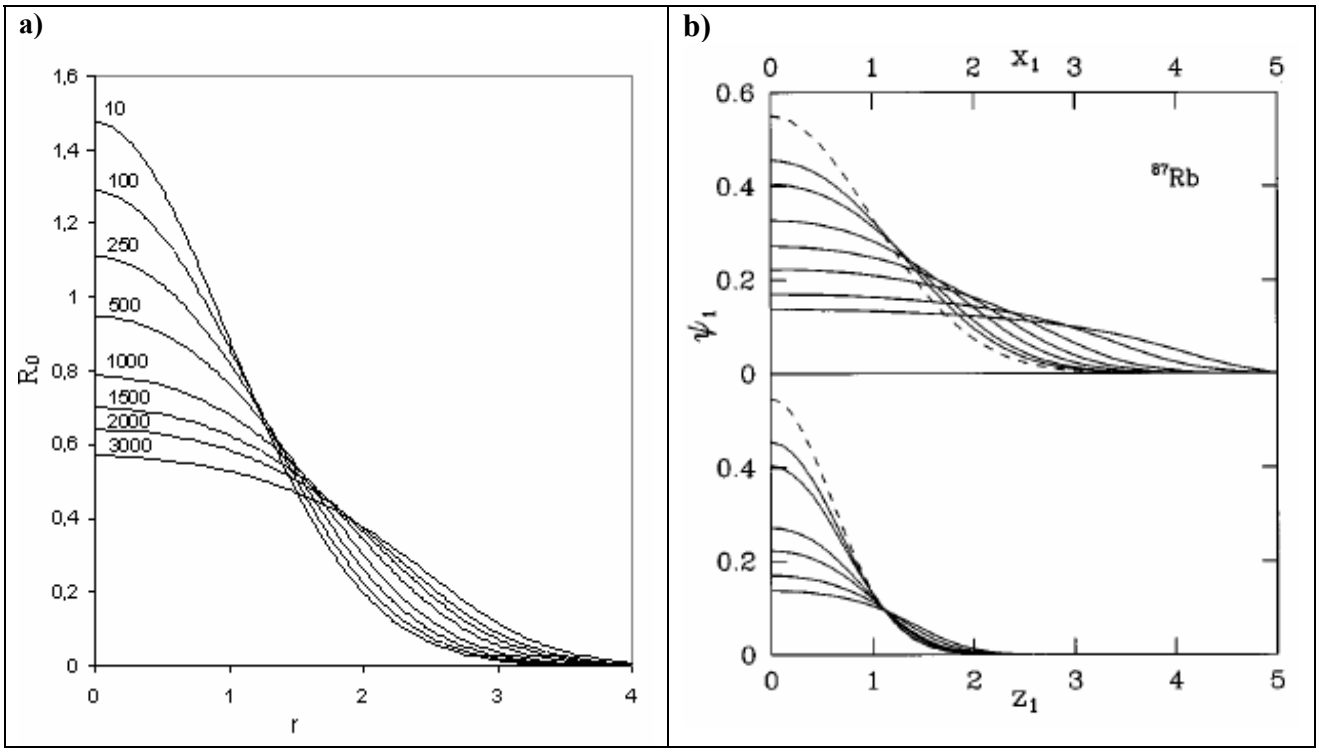
Şekil 7.3a, küresel simetrik bir tuzakta birbiri ile bir temas potansiyeli ile etkileşen 100 bozon için $a = 0, 2, 4, 8, 16, 32, 64, 256\ a_{\mathrm{Rb}}$ s-dalga saçılma uzunluğu değerlerinde çizilen taban durum doğal orbitallerini gösterir. Etkileşimin artması ile taban durum doğal orbitali merkezde daha düzleşmekte ve tuzak kenarlarına doğru yayılmaktadır. $a = 256\, a_{\mathrm{Rb}}$ s-dalga saçılma uzunluğunda merkezdeki doğal orbitalin genliği etkileşimsiz durumdaki doğal orbitalin genliğinin yaklaşık 5'te birinden daha azdır. Bu çalışmada parçacıklar arasındaki etkileşimin bir temas potansiyeli olması durumunda tüm parçacıkların hepsinin en düşük enerjili doğal orbitale yerleşeceği bulunmuştur.

a) **b)**



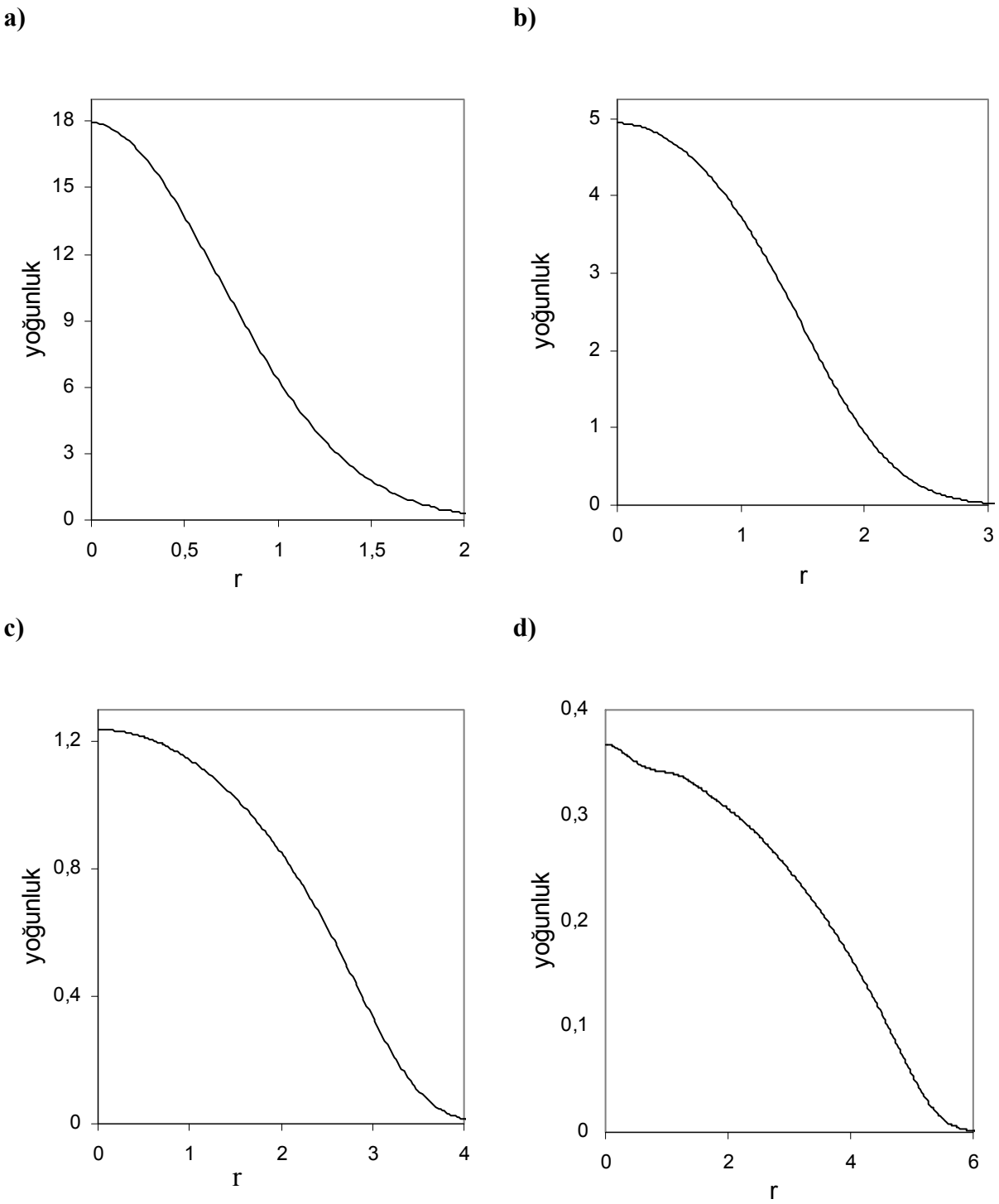
Şekil 7.3. Küresel simetrik bir tuzakta **a)** birbiriyle bir temas potansiyeli ile etkileşen 100 bozon için NO yaklaşımı kullanılarak $a = 0,2,4,8,16,32,64,256$ a_{Rb} s-dalga saçılma uzunluğu değerlerinde konumun bir fonksiyonu olarak çizilen taban durum doğal orbitalleri. **b)** katı-kürelerden oluşan 128 parçacık için katı-küre yarıçapı $\mathrm{a} = 0,1,4,8,16,32,64$ a_{Rb} s-saçılma uzunluğu için DuBois ve Glyde (2001) tarafından MC yöntemi ile hesaplanan yoğuşma doğal orbitalleri konumun bir fonksiyonu olarak çizilmiştir.

Dolayısıyla, tuzak içerisindeki paraçacık yoğunluğu, taban durum doğal orbitalinin karesi ile orantılıdır ve bu durum s-dalga saçılma uzunluğunun artması ile tuzak merkezindeki parçacık yoğunluğunun yaklaşık 25 kat azalması anlamına gelir. Saçılma uzunluğunun artması ile tuzak içerisindeki parçacık yoğunluğunun merkezde sabit bir değere ulaşırken tuzağın dışına doğru yayılması Şekil 7.3b'de görüldüğü gibi DuBois ve Glyde'ın (2001) yapmış olduğu Kuantum Monte Carlo çalışması ile de uyumludur.



Şekil 7.4. a) Küresel simetrik bir tuzak içerisinde bulunan parçacık sayısının $N = 10,100,.....,3000$ değerleri için $a/a_{Rb} = 1$ s-dalga saçılma uzunluğu kullanılarak hesaplanan taban durum doğal orbitalleri konumun bir fonksiyonu olarak çizilmiştir. **b)** Anizatropik harmonik bir tuzakta $N = 100, 200, 500, 1000, 2000, 5000, 10000$ parçacık için Dalfovo ve Stringari (1996) tarafından GP denklemleri kullanılarak hesaplanan taban-durum dalga fonksiyonu x ve z ekseninin bir fonksiyonu olarak çizilmiştir.

Şekil 7.4a'da tuzak içerisinde bulunan parçacık sayısının değişimi ile taban durum doğal orbitalinin şeklinin değişimi gösterilmiştir. Tuzak içerisinde bulunan parçacık sayısının $N = 10,100,.....,3000$ değerleri için $a/a_{Rb} = 1$ s-dalga saçılma uzunluğu kullanılarak hesaplanan taban durum doğal orbitalleri konumun bir fonksiyonu olarak çizilmiştir. Parçacık sayısının artması ile doğal orbitaller merkez yakınlarında küçülürken daha düz bir şekil almaktadır. Grafikten açıkça görüldüğü gibi parçacık sayısının artması taban durum doğal orbitalinin tuzak kenarlarına doğru yayılmasına neden olmaktadır. $N = 3000$ parçacık için merkezdeki taban durum doğal orbitalinin genliği etkileşimsiz durumdaki değerinden yaklaşık 3 katı daha azdır. Bu sonuçlar Dalfovo ve Stringari (1996) tarafından GP denkleminin iki boyutta çözülmesi ile elde edilen sonuçlar ile uyumludur (Şekil 7.4b).



Şekil 7.5. N=100 parçacık için NO kullanılarak **a)** etkileşimin olmadığı durum, **b)** $a = 10\ a_{\mathrm{Rb}}$, **c)** $a = 100\ a_{\mathrm{Rb}}$ ve **d)** $a = 800\ a_{\mathrm{Rb}}$ s-dalga saçılma uzunluklarında hesaplanan yoğunluk dağılımı konumun bir fonksiyonu olarak çizilmiştir.

Şekil 7.5, N=100 parçacık için NO kullanılarak hesaplanan dört yoğunluk dağılımını göstermektedir. Yoğunluk dağılımı Şekil 7.5 a) etkileşimsiz durumda, b) $a = 10\ a_{\mathrm{Rb}}$, c) $a = 100\ a_{\mathrm{Rb}}$ ve d) $a = 800\ a_{\mathrm{Rb}}$ saçılma uzunluklarında konumun bir fonksiyonu olarak çizilmiştir. Grafiklerden görüldüğü gibi yoğunluk, etkileşim arttıkça merkezde azalmakta ve tuzağın kenarlarına doğru yayılmaktadır. Etkileşimin $a = 100\ a_{\mathrm{Rb}}$ olduğu durum, etkileşimin olmadığı durumda yapılan hesaplama ile karşılaştırılırsa, etkileşimin güçlü olduğu $a = 100\ a_{\mathrm{Rb}}$ saçılma uzunluğunda merkezdeki yoğunluk etkileşimin olmadığı durumdan yaklaşık 3 kat azdır. Buna karşılık yoğunluk etkileşimsiz durumla kıyaslandığında tuzak kenarlarına doğru 1,5 kat daha fazla yayılmıştır. Etkileşimin oldukça güçlü olduğu $a = 800\ a_{\mathrm{Rb}}$ saçılma uzunluğunda parçacıkların çok azı merkezde kalmıştır. Oldukça büyük bir kısmı tuzak kenarlarına doğru itilmiştir.

Bu çalışmada yapılan hesaplamalarda incelenen parçacık sayısı ve etkileşim parametresi bölgesinde, tuzak içerisinde bulunan bütün parçacıkların taban durumda olduğu elde edilmiştir. Parçacıklar arasındaki etkileşimin artması ile parçacıkların tuzak kenarlarına doğru itilmekte olduğu gözlenmekte ancak üst enerji seviyelerine geçişler gözlenememektedir. Bu çalışmada elde edilen yoğunluk dağılımları DuBois ve arkadaşlarının yaptıkları Kuantum Monte Carlo hesaplamalarının sonuçları ile tutarlıdır (DuBois ve Glyde 2001, DuBois ve Glyde 2003).

Öte yandan bu çalışmada yapılan hesaplamalarda tuzak içerisinde bulunan tüm parçacıklar taban durumda elde edilmiş, üst seviyelerde herhangi bir parçacık gözlenmemiştir. Buna karşın, DuBois ve Glyde'ın (2003) parçacık çiftleri arasındaki etkileşim için katı küre potansiyeli yaklaşımını kullanarak yapmış oldukları Kuantum Monte Carlo çalışmasında doğal orbitalleri kullanarak üst seviyelere geçişlerin olduğunu göstermişlerdir. Bu çalışmada üst seviyelere geçişin görülmemesinin parçacık çiftleri arasındaki etkileşim için temas potansiyeli yaklaşımının kullanılması olduğu düşünülmektedir.

8. DEĞERLENDİRME

Çok düşük yoğunluklarda yapılan ilk deneysel çalışmalarda üst seviyelerde bulunan bozonların sayısı yaklaşık %1 mertebesinde olduğundan genellikle hesaplamalarda ihmal edilmekteydi (Dalfovo ve ark. 1999). ^{4}He sıvısı (Sokol 1995) gibi yoğunluğun yüksek olduğu durumlarda tuzaklanmış bozon gazı gerçek uzayda güçlü bir şekilde sıkıştırıldığından atomlar arasındaki etkileşimlerin etkisi ihmal edilemeyecek kadar artar. Bu nedenle atomlar arasındaki etkileşmelerin büyük olduğu ^{4}He sıvısındaki süperakışkanlık açıkça görülememektedir. Son zamanlarda yapılan deneylerde (Santos ve ark. 2001, Jochim ve ark. 2003) s-dalga saçılma uzunluğu kolayca kontrol edilebilmektedir. Bunun sonucu olarak atomlar arasındaki etkileşmenin şiddeti kolayca değiştirilebilmekte (Stringari 2005) ve oldukça büyük s-dalga saçılma uzunluklarına kadar çıkılabilmektedir (Weber ve ark. 2003, Jochim ve ark. 2003, Nilsen ve ark. 2005). Büyük saçılma parametreleri ile ilgilenildiğinde üst seviyelerde bulunan atomların sayısının ihmal edilmesi doğru değildir.

Parçacıklar arasındaki etkileşimlerin göz önüne alındığı ilk teori Bogoliubov (1947) tarafından geliştirilmiştir. Bogoliubov yoğuşan dalga fonksiyonunu sabit olarak almış ve bunun üzerinde yoğuşmayan kısımdan gelen bir dalgalanmanın bulunduğunu varsaymıştır. Daha sonra Gross (1961) ve Pitaevskii (1961), Bogoliubov tarafından geliştirilen teoriyi tek parçacık operatörleri cinsinden tanımlamıştır. Yoğuşma durumunda parçacıkların makroskopik kısmının taban durumda olduğu kabul edildiğinden, uyarılmış durumlardan gelen katkı ihmal edilir. Güçlü etkileşimler göz önüne alındığı zaman üst seviyelerde bulunan parçacık sayısı ihmal edilemeyecek kadar artacağından GP denklemleri bu sınırda kullanılamaz.

Güçlü etkileşimlerin bulunduğu, yoğunluğun yüksek olduğu sistemleri açıklamak için farklı yaklaşımlar yapılmıştır. Ziegler and Shukla (1997) tuzaklanmış bozonların özelliklerini hesaplamak için katı-küre bozonlardan oluşan bir sistemde slave bozon yaklaşımı kullanmışlardır. Tanatar ve Erkan (2000) harmonik tuzaklarda güçlü etkileşimlerin bulunduğu 1-boyuttaki bozon sistemi için yerel-yoğunluk (local-density) yaklaşımını kullanarak MC yöntemi ile yoğunlukları hesaplamışlardır. Fabrocini ve Polls (1999) yerel-yoğunluk yaklaşımını kullanarak ^{87}Rb için GP

denkleminde düşük yoğunlukta yüksek mertebe terimleri kullanarak toplam yoğunluğu hesaplamışlardır. Sakhel ve ark. (2002) yüksek yoğunluklardaki ^{85}Rb için GP denklemine çift etkileşimlerini de içerecek şekilde bir çift etkileşim parametresi ekleyerek modifiye GP (MGP) denklemlerini türetmişlerdir. Ancak bu yaklaşımların hiç birisi yapı olarak taban durumun zayıflamasını ve üst seviyelere uyarılmaları elde etmeye yönelik değildir.

DuBois ve Glyde (2001) T=0 sıcaklığında harmonik tuzakta tuzaklanmış katı-küre bozonlardan oluşan bir sistemin yoğuşma özelliklerini varyasyonel MC kullanarak hesaplamışlardır. Bu çalışmada tuzaktaki bozon sayısının artmasıyla yoğuşmanın merkezden tuzağın kenarlarına doğru hareket ettiğini bulmuşlardır. Yüksek parçacık sayılarında yoğuşma tuzağın kenarlarında oluşmaktadır. Ayrıca, parçacıklar arasındaki katı küre etkileşiminin menzilinin artmasıyla üst seviyelere uyarılan parçacık sayısının arttığı sonucuna da ulaşmışlardır. Nilsen ve ark. (2005) yoğuşma dalga fonksiyonuna bir ifade ekleyerek MC metodu ile toplam yoğunlukları ve yoğuşan kısmın yoğunluklarını hesaplamışlardır. Bu MC simülasyon çalışmalarının her ikisinde de parçacıklar arasındaki etkileşim potansiyeli bir katı küre potansiyeli olarak alınmıştır.

Güçlü etkileşimlerin bulunduğu sistemlerin bütün özelliklerini incelemekte kullanılabilecek genel bir teorik yaklaşım henüz bulunmamaktadır. Bu sebeple atomlar arasındaki etkileşmelerin şiddetli olduğu durumlarda geçerli olacak bir yaklaşımın geliştirilmesi ihtiyacı kaçınılmazdır. Bu tez çalışması bu ihtiyacı karşılamaya yönelik bir ilk girişim olarak değerlendirilebilir.

Bu çalışmada yapılan hesaplamalarda, parçacıklar arasındaki etkileşimin artması ile parçacıkların tuzak kenarlarına doğru itilmekte olduğu gözlenmekte ancak üst seviyelere geçişler gözlenememektedir. Bu çalışmada üst seviyelere geçişin görülmemesinin nedeni parçacık çiftleri arasındaki etkileşim için temas potansiyeli yaklaşımının kullanılmasıdır.

Klasik bir bakış açısıyla değerlendirecek olursak temas potansiyeli sıfır menzilli bir potansiyel olduğu için iki parçacık biribirlerinin çok yakınına geldiği halde dahi birbirleri ile etkileşmeyecek, sadece aynı konumda bulunmaları halinde bir etkileşim söz konusu olacaktır. Dolayısıyla tuzak içerisindeki çok küçük bir

bölgeye tüm parçacıkların sığması mümkün olabilecektir. Bu durumda kuantum mekaniksel etkiler göz önünde bulundurulduğunda parçacıklar arasındaki etkileşim sadece parçacık dağılımının biraz daha yayılmasına sebep olacaktır.

Her ne kadar literatürde BEC konusunda yapılan hemen hemen bütün çalışmalarda parçacıklar arasındaki etkileşim için temas potansiyeli kullanılmış olsa da, özellikle BEC için temas potansiyelinin kullanılmasının doğru olmadığına inanıyoruz. Bu tez çalışmasının ikinci bölümünde BEC olayının tanıtımı için verilen 2.3 şekline geri dönecek olursak bu şeklin birinci panelinde yer alan yüksek sıcaklık durumunda parçacıklararası mesafe parçacıkların termal de Broglie dalga boyundan çok büyüktür. Bu durumdaki seyrek bir gaz için parçacıkları noktalar olarak kabul etmek ve parçacıklar arasındaki etkileşim potansiyelini bir temas potansiyeli olarak kabul etmek kabul edilebilir bir yaklaşımdır. Ancak BEC olayının gözlendiği durumları temsil eden üçüncü ve dördüncü panellerde de görüleceği gibi BEC olayı sırasında parçacıkların termal de Broglie dalgaboyları çok uzun hale gelir ve parçacıklar sürekli bir etkileşim içindedirler. Uzun mesafeli korelasyonların gözlendiği bu şartlar altında temas potansiyeli yaklaşımının oldukça hatalı sonuçlar vermesi de kaçınılmazdır.

Parçacıklar arasındaki etkileşmeler için sıfır menzilli bir potansiyel yerine gerçek etkileşimleri temsil edebilen, ve sonlu menzile sahip potansiyellerin kullanılması halinde bu tez çalışmasında önerilen yaklaşımın uyarılmalar da dahil olmak üzere çok parçacık bozon sistemlerinin bütün özelliklerinin incelenmesinde kullanılabileceği düşünülmektedir.

Gelecekte bozonlar arasındaki etkileşimi tanımlayabilecek gerçek bir potansiyel göz önüne alınarak BEC özelliklerinin incelenmesi planlanmaktadır.

KAYNAKLAR

Adams, C. S., Riis, E. 1997 Laser Cooling And Trapping Of Neutral Atoms. Prog. Quonr. Electr **21**, 1–79.

Anderson, M.H., Ensher, J.R., Matthews, M.R., Wieman, C.E., Cornell, E.A. 1995. Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor. Science **269**, 198–201.

Arfken, G.B., and Weber, H.J. 2001, Mathematical Methods for Physicists. 5th ed. Harcourt Academic Pres, Londan, UK.

Baym, G., and Pethick, C. J. 1996 Ground-State Properties of Magnetically Trapped Bose-Condensed Rubidium Gas. Physical Review Letters **76**, 6–9.

Berezinsky, V. L. 1971 Zh. Eksp. Teor. Fiz. **61**, 1144.

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

Bose, S.N. 1924 Planck's Law and Light Quantum Hypothesis. (Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese). Zeitschrift für Physik **26**, 178, 1–4.

Bradley, C.C., Sackett, C.A., Tollett, J.J., and Hulet, R.G. 1995 Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interaction. Physical Review Letters **75**, 1687–1690.

Burt, E.A. et al. 1997 Coherence, Correlations, and Collisions: What One Learns About Bose-Einstein Condensates from Their Decay. Physical Review Letters **79**, 337–340.

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

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

Chu, S. 1998 The Manipulation of Neutral Particles. Reviews of Modern Physics, **70**, 685–706.

Chu, S., Hollberg, L., Bjorkholm, J.E., Cable, A., and Ashkin, A. 1985 Three-Dimensional Viscous Confinement and Cooling of Atoms by Resonance Radiation Pressure. Physical Review Letters **55**, 48–51.

Coddington, I. et al. 2004 Experimental Studies of Equilibrium Vortex Properties in a Bose-Condensed Gas. Cond-Mat/0405240 **4**, 1–12.

Cornell, E. 1996 J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol. 101, 419.

Cremer, D. 2001 Invited Paper: Density Functional Theory: Coverage of Dynamic and Non-Dynamic Electron Correlation Effects. Molecular Physics **99**, 1899–1940.

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

Dalfovo, F., Giorgini, S., Pitaevskii L.P., Stringari, S. 1999 Theory of Bose-Einstein Condensation in Trapped Gases. Reviews of Modern Physics **71**, 463–512.

Davidson, E. 1972 Properties and Uses of Natural Orbitals. Reviews of Modern Physics **44**, 451–464.

Davis M.J., and Gardiner C.W. 2001 Growth of a Bose-Einstein Condensate a Detailed Comparison of Theory and Experiment. Cond-Mat/0111444 **1**, 1–12.

Davis, K.B. et al., 1995 Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms. The American Physical Society **75**, 3969–3973.

Davis, M.J., and Blakie, P.B. 2005 Critical Temperature of a Trapped Bose Gas: Comparison of Theory and Experiment. cond-mat/0508667 **1**, 1–4.

Davoudi, B., Asgari, R., Polini, M., and Tosi, M.P. 2003 Self-Consistent Scattering Theory of the Pair Distribution Function in Charged Bose Fluids. Physical Review B **67**, 172503, 1–4.

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.

Dziarmaga, J., and Sacha K. 2003 Bose-Einstein-Condensate Heating by Atomic Losses. Physical Review A **68**, 043607, 1–5.

Dziarmaga, J., Karkuszewski, Z.P., and Sacha, K. 2002 Quantum depletion of an excited condensate. Physical Review A **66**, 043615, 1–4.

Edwards, M., Dodd, R.J., Clark C.W., and Burnett, K. 1996 Zero-Temperature, Mean-Field Theory of Atomic Bose-Einstein Condensates. J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol. **101**, 553–565.

Einstein, Von A. 1925 Quantentheorie des Einatomigen Idealen Gases: Zweite Abhandlung. Sitzungsber. Phys.-Math. KI. I, 3–7.

Ernst, U. et al 1998-II Free Expansion of a Bose–Einstein Condensate From an Ioffe–Pritchard Magnetic Trap. Appl. Phys. B **67**, 719–722.

Ernst, U., Marte, A., Schreck, F., Schuster, J., and Rempe, G. 1998-I Bose-Einstein Condensation in a Pure Ioffe-Pritchard Field Confguration, Europhysics Letters **41** (1), 1-6.

Eschrig, H. 1996 The Fundamentals of Density Functional Theory. B. G. Teubner Verlagsgesellschaft, Stuttgart, Germany.

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

Fabrocini, A., and Polls, A. 1999 Beyond the Gross-Pitaevskii Approximation: Local Density Versus Correlated Basis Approach for trapped bosons. Physical Review A **60**, 2319–2323.

Fermi, E. 1928 Eine statistische Methode zur Bestimmung einiger Eigenschaften des Atoms und ihre Anwendung auf die Theorie des periodischen Systems der Elemente. Z. Phys. A **48**, 73–79.

Fried, D. et al.; 1998 Bose-Einstein Condensation of Atomic Hydrogen. Physical Review Letters **81**, 3811–3814.

Gardner, J.R. et al. 1995 Collisons of Doubly Spin Polarized Ultracold ^{85}Rb Atoms. The American Physical Society **74**, 3764–3767.

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.

Glyde, H.R., Azuah, R.T., and Stirling, W. G. 2000-I Condensate, Momentum Distribution, and Final-State Effects in Liquid ^{4}He. Physical Review B **62**, 14337–14349.

Gott, Y.V., Ioffe, M.S., and Telkovskii, V.G. 1962 Some New Results on Confinement in Magnetic Traps. Nuclear Fusion Supplement. 3.

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.

Hodby, E. 2002 The Superfluid Properties of a Bose-Einstein Condensed Gas. PhD Thesis Christ Church College University of Oxford.

Hohenberg, P., and Kohn W. 1964 Inhomogeneous Electron Gas. Physical Review, **136**, B 864–867.

Hohenberg, P.C. 1967 Existence of Long-Range in One and Two Dimensions. Physical Review **158**, 383–386.

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.

Huang, K., and Yang, C.N. 1957 Quantum-Mechanical Many-Body Problem with Hard-Sphere Interaction. Physical Review **105**, 767.

Hutchinson, D.A.W., Zaremba, E. and Griffin, A. 1997 Finite Temperature Excitations of a Trapped Bose Gas. Physical Review Letters **78**, 1842–1845.

Jochim, S. et al. 2003 Bose-Einstein Condensation of Molecules. Science. **302**, 2101–2103

Ketterle, W., and van Druten N.J. 1996 Bose-Einstein Condensation of a Finite Number of Particles Trapped in One or Three Dimensions. Physical Review, **54**, 656–660.

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

Kohn, W. 1999 Nobel Lecture: Electronic Structure of Matter-Wave Functions and Density Functionals. Reviews of Modern Physics **71**, 1253–1266.

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

Kosterlitz, J. M., and Thouless, D. J. 1973 Ordering, Metastability and Phase Transitions in Two-Dimensional Systems. J. Phys. C 6, 1181–1203.

Köhl, M., Stöferle T., Moritz H., Schori C., and Esslinger T. 2004 1D Bose gases in an optical lattice. Applied Physics B **79**, 1009–1012.

Krauth, W. 1996 Quantum Monte Carlo Calculations for a Large Number of Bosons in a Harmonic Trap. Physical Review Letters **77**, 3695–3699.

Lieb, E.H., Seiringer, R., and Yngvason J. 2003 One-Dimensional Bosons in Three-Dimensional Traps. Vienna, Preprint ESI **1361**, 1–6.

London, F. 1938 On the Bose Einstein Condensation. Physical Review **54**, 947–954

Löwdin, P.O. 1955 Quantum Theory of Many Particle Systems. I. Physical Interpretations by Means of Density Matrices, Natural Spin Orbitals, and Convergence Problems in the Method of Configurational Interaction. Physical Review **97**, 1474–1489.

Löwdin, P.O., and Rèdei, L., 1959 Combined Use of Methods of Superposition of Configurations and Correlation Factor on the Grand States of the Helium- Like Ions. Physical Review **114**, 752–757.

Löwdin, P.O., and Shull, H., 1956 Natural Orbitals in The Quantum Theory of Two-Electron Systems. Physical Review **101**, 1730–1739.

Maitra, N.T., Burke, K., and Woodward, C. 2002 Memory in Time Dependent Density Functional Theory. Physical Review Letters **89**, 023002 1–4.

McWeeny, R. 1960 Some Recent Advances in Density Matrix Theory. Reviews of Modern Physics **32**, 335–369.

Meyrath, T.P., Schreck, F., Hanssen, J.L., Chuu, C.S., and Raizen M.G. 2005 A High Frequency Optical Trap for Atoms. Optics Express 2843 **13**, 2843–2851.

Minguzzi, A., Chiofalo, M.L., and Tosi, M.P. 1997 Generalized Quantum Hydrodynamics of a Trapped Dilute Bose Gas. Physics Letters A **236**, 237–244.

Modugno, G. et al. 2001 Bose-Einstein Condensation of Potassium Atoms by Sympahtetic Cooloing. Science **294**, 1320–1322.

Mullin, W.J. 1996 Bose-Einstein Condensation in a Harmonic Potential. Cond-Mat/9610005 **1**, 1–34.

Mullin, W.J. 1997 A Study of Bose-Einstein Condensation in a Two-Dimensional Trapped Gas. Cond-Mat/9709077 **1**, 1–8.

Nilsen, J.K., Mur-Petit, J., Guilleumas, M., Hjorth-Jensen, M., and Polls, A. 2005 Vortices in Atomic Bose-Einstein Condensates in the Large-Gas-Parameter Region. Physical Review A **71**, 053610 1–7.

Nunes, G.S. 1999 Density Functional Theory of the Inhomogeneous Bose-Einstein Condensate. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **32**, 4293–4299.

Parr R.G., and Yang, W. 1989 Density-Functional Theory of Atoms and Molecules. 1st ed. Oxford University Press, Oxford, USA.

Pedri, P. et al., 2001 Expansion of a Coherent Array of Bose-Einstein Condensates. Physical Review Letters **87**, 220401 1–4.

Penckwitt, A. 2003 Rotating Bose–Einstein Condensates Vortex Lattices and Excitations. PhD Thesis Department of Physics University of Otago, Dunedin, New Zealand.

Penrose, O. and Onsager L. 1956 Bose-Einstein Condensation and Liquid Helium. Physical Review **104**, 576–584.

Pethick, C.J., and Smith, H. 2002 Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases. 1st ed. Cambridge University Pres. New York, USA

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

Popov, V.N. 1987 Functional Integrals and Collective Modes. Cambridge University Pres. New York.

Pritchard, D.E. 1983 Cooling Neutral Atoms in a Magnetic Trap for Precision Spectroscopy. Physical Review Letters **51**, 1336–1339

Sakhel, A.R., DuBois J.L., and Glyde H.R. 2002 Bose-Einstein Condensates in ^{85}Rb Gases at Higher Densities. Physical Review A **66**, 063610 1–4.

Santos, F. et al. 2001 Bose-Einstein Condensation of Metastable Helium. Physical Review Letters **86**, 3459–3462.

Schuster, J., Marte, A., Amtage, S., Sang, B., Rempe, G. Beijerinck H. C.W. 2001 Avalanches in a Bose-Einstein Condensate. Physical Review Letters **87**, 170404 1–4.

Simula, T.P. et al. 2004 Observations on Sound Propagation in Rapidly Rotating Bose-Einstein Condensates. cond-mat/0407343 **2**, 1–4.

Sokol, P. edited by Griffin, A., Snoke, D.W., and Stringari, S. 1995 Bose-Einstein Condensation. 1st ed. Cambridge University Press, Cambridge, UK.

Söding, J. et al. 1999 Three-body Decay of a Rubidium Bose–Einstein Condensate. Applied Physics B **69**, 257–261.

Streed, E.W. et al 2006 Large Atom Number Bose-Einstein Condansate Machines. Review Of Scientific Instruments **77**, 023106 1–13.

Streed, E.W., 2006 ^{87}Rubidium Bose-Einstein Condensates: Machine Construction and Quantum Zeno Experiments. PhD Thesis Massachusetts Instıtute of Technology (MIT).

Stringari, S. 2005 Bose-Einstein Condensation in Ultracold Atomic Gases. Physics Letters A **347**, 150-156.

Tanatar, B., and Erkan K. 2000 Strongly interacting one-dimensional Bose-Einstein condensates in harmonic traps. Physıcal Revıew A **62**, 053601 1–6.

Thijssen, J.M. 1999 Computional Physics. 1st ed. Cambridge University Press, Cambridge

Thomas, L. H. 1927 The Calculation of Atomic Fields. Proc. Camb. Phil. Soc. 23, 542–548.

Volz, T., Dürr, S., Ernst, S., Marte, A., and Rempe, G. 2003 Characterization of Elastic Scattering near a Feshbach Resonance in ^{87}Rb. Physical Review A **68**, 010702 (R) 1–4.

von Barth, U. 2004 Basic Density-Functional Theory—an Overview. Physica Scripta. **T 109**, 9–39.

Weber, T., Herbig, J., Mark, M., Nägerl, H.C., Grimm, R. 2003 Bose-Einstein Condensation of Cesium. Science **299**, 232–235.

Wüster, S. et al. 2007 Quantum Depletion of Collapsing Bose-Einstein Condensates. Physical Review A **75**, 043611 1–8.

Xu, K., Liu, Y., Miller, D.E., Chin, J.K., Setiawan, W., and Ketterle, W. 2006 Observation of Strong Quantum Depletion in a Gaseous Bose-Einstein Condensate. Physical Review Letters **96**, 180405 1–4.

Ziegler, K., and Shukla A. 1997 Bose-Einstein Condensation in a Trap: The Case of a Dense Condensate. Physical Review A **56**, 1438–1442.