DFT(Yoğunluk Fonksiyonelleri Teorisi)'nin ÇOK PARÇACIK BOSON SİSTEMLERİNE BİR UYGULAMASI

Fahri ŞAHİN

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

KONYA 2007

T. C.
SELÇUK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

DFT(Yoğunluk Fonksiyonelleri Teorisi)'nin
ÇOK PARÇACIK BOSON SİSTEMLERİNE BİR UYGULAMASI

Fahri ŞAHİN

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

Bu tez 05.01.2007 tarihinde aşağıdaki Jüri tarafından Oybirliği ile kabul edilmiştir.

Prof. Dr. Ülfet ATAV
(Danışman)

Prof. Dr. Hüseyin YÜKSEL
(Üye)

Yrd. Doç. Dr. Erhan AKIN
(Üye)

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

DFT(Yoğunluk Fonksiyonelleri Teorisi)'nin
ÇOK PARÇACIK BOSON SİSTEMLERİNE BİR UYGULAMASI

Fahri ŞAHİN
Selçuk Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Ülfet ATAV

2007, 56 sayfa

Bu çalışmada, Bose-Einstein yoğuşmasının (BEC) Yoğunluk Fonksiyonelleri Teorisi (DFT) ve Genetik Algoritma (GA) kullanılarak analizi için bir algoritma geliştirdik. Bu algoritma sayesinde yoğuşmanın temel seviye enerjisi ve temel seviye yoğunluk fonksiyonu kolaylıkla elde edilebilir. Ayrıca bu algoritmanın bundan önce kullanılan yaklaşımlarda karşılaşılan yakınsamama problemleri nedeniyle yoğun Bose gazlarında etkili hesaplamalar yapılamaması açığını da kapatacağına inanıyoruz.

Anahtar Kelimeler: Bose-Einstein yoğuşması, yoğunluk fonksiyonelleri teorisi, genetik algoritma.

ABSTRACT

MS Thesis

AN APPLICATION OF DFT (Density Functional Theory) TO MANY BOSON SYSTEMS

Fahri ŞAHİN
Selçuk University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Physics

Supervisor: Prof. Dr. Ülfet ATAV

2007, 56 pages

In this work, we have proposed an algorithm for the analysis of Bose Einstein condensates by using density functional theory and the genetic algorithm. With the help of this algorithm, ground state energy of the condensate and ground state density distribution can be easily calculated. Also, we believe that this algorithm will help to overcome the divergence problems so that it will allow making effective calculations on dense Bose systems.

Key Words: Bose-Einstein condensate, density functional theory, genetic algorithm.

ÖNSÖZ

Bu çalışma Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında Yüksek Lisans Tezi olarak hazırlanmıştır.

Bu çalışmada, Bose-Einstein yoğuşmasının (BEC) Yoğunluk Fonksiyonelleri Teorisi (DFT) ve Genetik Algoritma (GA) kullanılarak çözümü için bir algoritma geliştirdik.

Bu çalışma boyunca beni destekleyen ve yönlendiren değerli hocam ve danışmanım sayın Prof. Dr. Ülfet ATAV'a ayrıca desteklerini ve bilgilerini esirgemeyen Yrd. Doç. Dr. Mehmet ŞAHİN, Arş. Grv. Teoman ÖZTÜRK ve Arş. Grv. Ahmet Emre KAVRUK'a ve en önemlisi bütün hayatım boyunca beni destekleyen aileme ve sevgili eşim Ülkü hanıma teşekkürü bir borç bilirim.

İÇİNDEKİLER

1. GİRİŞ	1
2. BOSE-EINSTEIN YOĞUŞMASI, DENEYSEL TEKNİKLER ve GROSS-PITAEVSKII DENKLEMİ	3
2.1. Bose-Einstein Yoğuşması	5
2.2. Deneysel teknikler	8
2.3. Atomların Soğutulması	10
2.4. Manyetik tuzaklamada geliştirilen teknikler	11
2.5. Bose-Einstein Yoğuşmasının Teorik Temelleri	12
2.5.1. Etkileşmeyen bozonlarda BEC	12
2.5.1.1. Geçiş sıcaklığı	15
2.5.1.2. Yoğuşma oranı	18
2.5.2. Etkileşen Tuzaklanmış Bozonlar	19
3. YOĞUNLUK FONKSİYONEL TEORİSİ	22
3.1. Yerel Yoğunluk Yaklaşımı	25
3.2. Varyasyon Yöntemi	28
4. KUANTUM GENETİK ALGORİTMA	32
4.1. Kopyalama	34
4.1.1. Rulet Çarkı	35
4.2. Çaprazlama	36
4.3. Mutasyon	40
5. GENETİK ALGORİTMA ve YOĞUNLUK FONKSİYONELLERİ KULLANILARAK BEC'İN İNCELENMESİ	44
5.1 Yoğunluk Fonksiyonelleri Kullanılarak BEC'in İncelenmesi	44
5.2 Genetik Algoritma	47
6. SONUÇ VE TARTIŞMALAR	48
KAYNAKLAR	52

1. GİRİŞ

Bozon, spini tamsayı olan parçacıklara verilen ortak bir addır. Bose-Einstein yoğuşması, çok sayıda bozonun tuzaklandığı sistemlerde çok düşük sıcaklıklarda oluşan bir faz değişikliğidir.

Bose-Einstein yoğuşması, Bose ve Einstein tarafından öngörüldüğünden beri (1924, 1925) temel bir ilgi konusu olmuştur. Bose-Einstein yoğuşması bu öngörüden ancak 70 yıl sonra 1995 yılında alkali atomların zayıf etkileşimli seyreltilmiş buharlarıyla yapılan bir seri deney sonucunda gözlenmiştir. Bu yoğuşma ilk önce JILA'da (Joint Institute for Laboratory Astrophysics) rubidyum atomlarıyla (Anderson ve ark. 1995), daha sonra da MIT'de (Massachusetts Institute of Technology) sodyum atomlarıyla elde edilmiştir (Davis ve ark. 1995). Aynı yılda lityum atomlarında da Bose-Einstein yoğuşmasının gözlendiği rapor edilmiştir (Bradley ve ark. 1995). Bu deneylerde atomlar önce manyetik tuzaklarla hapsedilmiş ve son derece düşük sıcaklıklara soğutulmuştur, bu sıcaklıklar mikrokelvin mertebesindedir. Atomlar, sınırlayıcı tuzağın kapatılmasını takiben yayılmaya terkedilmiş ve optiksel işlemler uygulanmıştır. Belli bir sıcaklığın altında hız dağılımında sıfır hız civarında keskin bir pikin gözlenmesi, Bose-Einstein yoğuşmasının açık bir kanıtı olmuştur.

1995 yılında alkali atomlar üzerine yapılan deneyler Bose-Einstein yoğuşması tarihinde bir kilometre taşı olarak düşünülür. 1924 yılında bu fikrin ortaya atılmasından sonra London (1938) tarafından helyumdaki süperakışkanlığı açıklamak için Bose-Einstein yoğuşması bir kez daha gündeme gelmiştir. Yoğuşmanın uzun bir bekleyişten sonra 1995 yılında deneysel olarak açık bir şekilde gözlenmesi Bose-Einstein yoğuşmasına ve Bose sistemlerindeki çok cisim özelliklerine olan ilginin artmasına yol açmıştır.

Bose sistemlerinin en önemli özelliklerinden birisi de bunların homojen olmayan ve sonlu boyutlu sistemler olmasıdır. Bu sistemlerin homojen olmaması iki cisim etkileşmelerinde önemli rol oynar. Etkileşimli bir Bose sisteminde bozonlar arası çok cisim korelasyon etkileri, yoğuşmanın dışında bulunan uyarılmış atomların

miktarını artırır. Etkileşimli bir gaz için Bogoliubov (1947) bir pertürbasyon açılımı geliştirmiştir. Bu yöntem na^3 parametresinin küçük olması (*n* parçacık yoğunluğu ve *a*'da bozonların sert küre yarıçapıdır) ve yoğuşmanın dışındaki atomların sayısının çok az olması yani $(N - N_0)/N << 1$ durumundaki (N_0 yoğuşmadaki parçacık sayısı olup, *N*, sistemdeki parçacık sayısını gösterir) etkileşimleri hesaba katar.

1995 yılında manyetik tuzaklarla sınırlanmış ^{87}Rb, ^{23}Na ve ^{7}Li alkali atomlarının seyreltilmiş zayıf etkileşimli buharlarıyla yapılan deneyler, termal olarak dağılmış bir buluttan tek bir makroskobik duruma geçişin ispatını vermiştir. Uzun bir bekleyişten sonra Bose-Einstein yoğuşmasının ispatlanması, bu konuya olan ilginin artmasına yol açmıştır. Deneylerde ulaşılan düşük yoğunluklar nedeniyle, teorik çalışmaların çoğu, zayıf etkileşimli gazlardaki yoğuşmaya ve Gross-Pitaevskii denklemine odaklanmıştır. Gross-Pitaevskii (GP) denklemi, Gross (1961) ve Pitaevskii (1961) tarafından ayrı ayrı geliştirilmiştir. Bu denklem gerçekte süperakışkan sıvı helyumdaki girdapların özelliklerini tanımlamak için geliştirilmiştir ve Bogoliubov açılımındaki sıfırıncı mertebeden terime dayanır. Gross-Pitaevskii denklemi, yoğuşmanın başarılı şekilde açıklanmasını sağlar. Ancak bu denklem seyrek durumdaki Bose gazları için geçerlidir, etkileşimin fazla olduğu sistemleri açıklamak için uygun değildir.

Biz bu çalışmada yoğuşmanın termodinamik özelliklerini ve taban durumunun statik ve dinamik özelliklerinin daha iyi anlaşılmasına katkıda bulunmak için yoğuşmayı Yoğunluk Fonksiyonelleri Teorisi (DFT) ile inceleyeceğiz. DFT çatısı altında enerji fonksiyonelini minimize eden taban durumu yoğunluğu genetik algoritma adı verilen rastlantısal bir yöntem ile bulunacaktır.

2. BOSE-EINSTEIN YOĞUŞMASI, DENEYSEL TEKNİKLER ve GROSS-PITAEVSKII DENKLEMİ

Birden fazla sayıdaki parçacığı (bir çekirdekteki nükleonlar, bir atomdaki elektronlar, bir moleküldeki atomlar) bir araya getirerek daha büyük bir kuantum sistemi meydana getirdiğimizde, eğer parçacıklar birbirlerinden ayırt edilemiyorsa, yeni bir kuantum durumu ortaya çıkar. Örneğin çok elektronlu bir atomdaki tüm elektronlar yük, kütle ve spin gibi özellikler bakımından aynı olduklarından, herhangi bir koordinattaki elektronun hangi elektron olduğunun bir önemi yoktur. Yani çok elektronlu bir atomun elektronları birbirinden ayırt edilemeyen özdeş parçacıklardır.

Pauli, 1925 yılında deneysel gözlemlerden de yararlanarak "Aynı kuantum sayılarına sahip iki fermiyon aynı sistem içinde bulunamaz" ilkesini ortaya attı. Bu ilke Pauli dışarlama ilkesi olarak bilinir.

Konuyu kolay ve anlaşılır vermek için iki parçacıklı bir durumu örneğin bir helyumdaki iki elektronu göz önüne alalım. Elektronlardan birinin $\vec{r}_1$ koordinatlarıyla tanımlandığını ve ψ_A durumunda bulunduğunu, diğerinin ise $\vec{r}_2$ koordinatlarıyla tanımlandığını ve ψ_B durumunda bulunduğunu varsayalım. Çok parçacıklı bir sistemin dalga fonksiyonu, her bir parçacığın dalga fonksiyonunun çarpımı olduğundan sistemi temsil edecek dalga fonksiyonu iki dalga fonksiyonunun çarpımına eşittir yani $\psi = \psi_A(\vec{r}_1).\psi_B(\vec{r}_2)$ şeklindedir. Şimdi iki elektronun değiş-tokuş edildiğini varsayalım, bu durumda yeni dalga fonksiyonu $\psi' = \psi_B(\vec{r}_1).\psi_A(\vec{r}_2)$ şeklinde olacaktır. Bu değiş-tokuşun gerçekliğini saptayabilecek bir ölçüm mümkün müdür sorusunun cevabı, eğer elektronlar gerçekten ayırt edilemez iseler hayır olacaktır. O halde olasılık yoğunlukları, özdeş parçacıkların değiş-tokuşuna göre değişmez kalmalıdır, yani değiş-tokuş edilmiş dalga fonksiyonu ψ_{21} , orijinal dalga fonksiyonu ψ_{12}'den en fazla işaretçe fark edilebilir. Dolayısıyla iki farklı durum söz konusudur. Eğer parçacıkların değiş-tokuşu ile dalga fonksiyonu işaret değiştiriyorsa $\psi_{21} = -\psi_{12}$'dir ve dalga fonksiyonu antisimetriktir denir. Özdeş parçacıkları temsil

eden tüm dalga fonksiyonları ya tamamen simetrik ya da tamamen antisimetrik olmalıdır. Karışık simetrili dalga fonksiyonları izinli değildir.

Bu iddiaları doğrulamak için laboratuar deneylerine bakıldığında bilinen hiçbir istisnası olmayan daha ileri bir sınıflandırma bulunur: 0,1,2…gibi tamsayı spinli tüm parçacıklar simetrik dalga fonksiyonları; $\frac{1}{2},\frac{3}{2},\frac{5}{2}$…gibi buçuklu spine sahip tüm parçacıklar ise antisimetrik dalga fonksiyonları ile temsil edilir.

Yukarıdaki ψ ve ψ' iki parçacık-fonksiyonlarından toplam dalga fonksiyonlarını elde edemeyiz. Çünkü bunlar ne simetrik ne de antisimetriktirler. Yani ψ' ne ψ' ye ne de $-\psi$' ye benzer. Bunun yerine aşağıdaki toplam dalga fonksiyonunu göz önüne alalım.

$$\psi_{12}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_A(\vec{r}_1)\psi_B(\vec{r}_2)\pm\psi_B(\vec{r}_1)\psi_A(\vec{r}_2)\right] \qquad (2.1)$$

Eğer artı işaretini seçersek toplam dalga fonksiyonu, parçacıkların değiş-tokuşuna göre simetriktir. Eğer eksi işaretini seçersek o zaman sonuç bir antisimetrik dalga fonksiyonudur. Buradaki $1/\sqrt{2}$ normalizasyon çarpanıdır.

A ve B özdeş kuantum durumlarına sahip olmamız halinde özel bir durum ortaya çıkar. (A ve B'nin kuantum sayıları takımını temsil ettiğini düşünebiliriz.) A'nın B ile aynı olması durumunda antisimetrik toplam dalga fonksiyonu özdeş olarak sıfırdır ve dolayısıyla olasılık yoğunluğu sıfır olur. Buçuklu spine sahip iki özdeş parçacığın aynı kuantum durumunda bulunma olasılığı daima sıfır olmalıdır. Bu tabiî ki Pauli dışarlama ilkesinin kendisidir. Antisimetrik dalga fonksiyonunun sıfır olması Pauli ilkesinin matematiksel temelidir. Fakat aynı şartlar altında Simetrik dalga fonksiyonlarının sıfır olması zorunlu değildir. Bu yüzden tamsayı spinli özdeş parçacıklar aynı kuantum durumunda bulunabilirler.

Pauli ilkesi ve sonuçları şu şekilde özetlenebilir:

i. Spin kuantum sayısı buçuklu (s=1/2,3/2,5/2…) olan ve fermiyon denilen parçacıklar Pauli dışarlama ilkesine uyarlar. Elektronlar, protonlar ve nötronlar fermiyondur. Fermiyonlardan oluşan bir sistemi tanımlayan dalga fonksiyonu antisimetriktir.

Bir atomda her durum için tek elektron bulunabildiğinden periyodik tablonun inşası elektronların fermiyon olma gerçeğine dayanır. Elektronların fermiyon olması metallerdeki elektronların davranışını da açıklar, düşük sıcaklıkta metallerdeki tüm enerji durumları belli bir seviyeye kadar doldurulur bu da Fermi enerjisi olarak adlandırılır. Enerji durumlarındaki bu doluşu Fermi-Dirac istatistiği açıklar.

ii. Spin kuantum sayısı tam (s=0,1,2,3,…) olan ve bozon denilen parçacıklar Pauli dışarlama ilkesine uymazlar. Bozonların enerji dağılımı Bose-Einstein istatistiği ile tanımlanır. Bozonlardan oluşan bir sistemi tanımlayan dalga fonksiyonu özdeş parçacıkların değişimine göre simetrik olmalıdır.

Düşük sıcaklıklarda bozonlar, fermiyonlara göre daha farklı davranırlar, çünkü böyle bir sistemdeki bozonların büyük bir kısmı aynı enerji durumunda toplanırlar. Tek bir durumda toplanma, yoğuşma veya Bose-Einstein yoğuşması (Bose-Einstein Condensation, (BEC)) olarak adlandırılır. Sıvı helyumdaki süperakışkanlık olgusu için de benzer şeyleri söylemek olasıdır. Süperiletkenlerde de çiftlenmiş (coupled) parçacıklar etkin bir biçimde bozon gibi davranırlar ve sıfır elektrik direnci gösteren bir durumda toplanırlar.

Bozon kavramı fotonları da içermektedir. Fotonların enerjisi Planck sabitiyle frekansa bağlanmıştır ve fotonların nitelendirilmesinde, siyah cisim ışıması açıklanırken Bose-Einstein istatistiğine başvurulur.

2.1. Bose-Einstein Yoğuşması

Bozonik parçacıklardan oluşan bir gaz bulutu kritik bir sıcaklığın altına düşürüldüğünde Bose-Einstein yoğuşmasına uğrar. Yoğuşma aynı taban durumunda bulunan makroskopik sayıdaki parçacıktan ibarettir. Bose-Einstein Yoğuşması, parçacıklar arası özel etkileşmelere bağlı olmayan bir faz değişikliğidir.

1900 yılında Max Planck'ın belli bir sıcaklığa kadar ısıtılmış bir cisimden yayılan ışıkla ilgili problemi çözmesiyle yirminci yüzyıl fiziği başlamıştır. Söz konusu ışınımın elektromanyetik bir kaynaktan yayıldığı biliniyordu, ayrıca sıcaklık ve soğukluk için geçerli olan termodinamik yasaları da biliniyordu. Ancak söz konusu ışınımın şiddeti termodinamik yasalarıyla hesaplandığında bir anlam çıkmıyordu. Planck, ışınımın büyüklükleri belli olan paketler halinde yayıldığını ileri sürmüştü. Böyle bir paketteki enerji miktarı, dalga boyuyla ters ve yayınlanan ışınımın frekansıyla doğru orantılı olup

$$E = h\nu$$

biçimindedir. Burada ν frekansı, h'da Planck sabiti denilen yeni bir sabiti göstermektedir. Planck bu yeni formülü uygulayarak ışıma şiddetini hesapladığında sonucun gözlemlerle uyuştuğunu gördü. Daha sonra 1905 yılında da Einstein bu ışınımın Planck enerji paketinin tamsayı katı olduğunu göstermiştir.

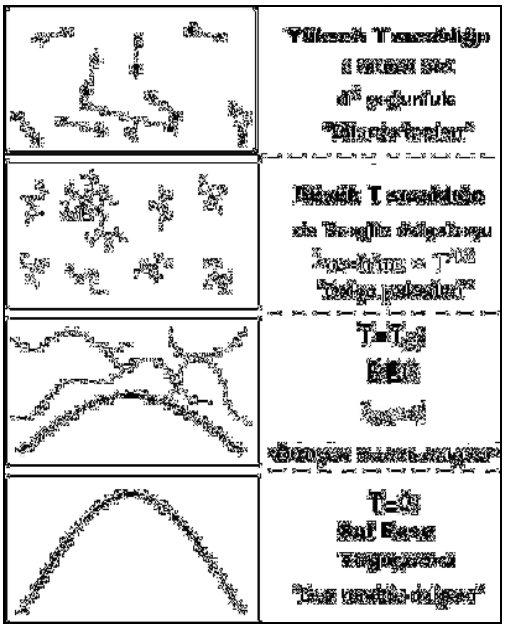
1924 yılında Hintli fizikçi Satyendra Nath Bose, Einstein'a yolladığı bir makalede fotonları özdeş parçacıklardan oluşan bir gaz gibi düşünerek siyah cisim ışıması için Planck yasasını türettiğini göstermiştir. Einstein makalenin önemini anlayarak çalışmaya başladı ve 1924 ve 1925 yıllarında iki makale yazdı, burada bozonik parçacıkların kuantum teorisini geliştirdi. Bose-Einstein istatistiği böylece doğmuş oldu ve bugün spin değeri tamsayı olan niceliklerin bu istatistiğe uyacağını biliyoruz.

Einstein, Bose'un teorisini parçacık sayılarının da korunduğunu düşünerek özdeş atomlardan ya da moleküllerden oluşan ideal bir gaza genellemiştir ve yeterince düşük sıcaklıklarda parçacıkların sistemin en düşük kuantum durumunda toplanacağını söylemiştir. Bu toplanma Bose-Einstein yoğuşması olarak adlandırılır. Bose kütlesiz fotonlarla ilgilendiği için bu özelliği bulamamıştır. Fotonlar sistemin enerjisi azaldığında yok olacağı için yoğunlaşamazlar. Bu tuhaf olguya, sıvı helyumun düşük sıcaklıklardaki anormal davranışı gözleninceye kadar (London, 1938) fazla bir ilgi gösterilmemiştir.

Helyum 2.17 K civarındaki bir kritik sıcaklığa kadar soğutulduğunda ısı kapasitesinde dikkate değer bir süreksizlik oluşur, sıvı haldeki helyumda damlacıklar gözlenmeye başlanır ve sıvının bir miktarı sıfır viskoziteye sahip olur yani süperakışkana dönüşür. Süperakışkanlık, olası en düşük enerjiye yoğuşmuş helyum atomlarından kaynaklanır.

Yoğuşma etkisi süperiletkenlikle de sağlanabilir. Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) teorisinde elektron çiftleri örgü etkileşimleriyle çiftlenirler, çiftler (Cooper çiftleri olarak adlandırılırlar) bozon gibi davranırlar ve sıfır direnç gösteren durumlara yoğunlaşırlar (Bardeen ve ark. 1957).

Sadeleştirilmiş bir gözle bakıldığında bir gaz bulutundaki parçacıklar kuantum-mekaniksel dalga paketleri olarak görülebilir. Bunlar $\lambda_{dB} = \left(2\pi\hbar^2 / mk_B T\right)^{1/2}$ termal de Broglie dalga boyu tarzında bir büyüklüğe sahiptirler, burada k_B Boltzmann sabiti, m atomik kütle ve *T* 'de gazın sıcaklığıdır. Yüksek sıcaklıkta (oda sıcaklığında) λ_{dB}'nin değeri oldukça küçüktür ve bu mesafede iki parçacığın bulunması pek olası değildir. Bu nedenle parçacıkların ayırt edilemezliği önemli değildir ve klasik tanımlama uygulanır (Boltzmann istatistiği). λ_{dB} dalga boyunun parçacıklar arası mesafe ile karşılaştırılabildiği noktaya kadar gaz bulutu soğutulduğunda her bir dalga paketi üstüste binmeye başlar ve parçacıkların ayırt edilemezliği önemli hale gelir. Fermiyonlar için Pauli dışarlama ilkesi iki parçacığın aynı kuantum durumunda bulunmasını önler oysa ki bozonlar için kuantum istatistiği, aynı kuantum durumunda birden çok parçacık bulunma olasılığını artırır (Bose-Einstein istatistiği). Makroskopik sayıda parçacığın en düşük enerji durumunda toplanması bir faz değişikliği olarak gözlenir ve Bose-Einstein yoğuşması oluşur (Şek.2.1). Bose-Einstein yoğuşması şu şekilde tanımlanabilir: Bozonlardan oluşan parçacıkların, kuantum-mekaniksel dalga fonksiyonları uzaysal olarak üst üste bindikten sonra madde dalgaları birlikte titreşmeye başlar ve koherent bir madde dalgası oluşur ki bu sistemin taban durumundaki bütün parçacıkları kapsar.



Şekil 2.1. Bose-Einstein yoğuşması karşılaştırması. Yüksek sıcaklıklarda zayıf etkileşimli bir gaz sistemi bilardo toplarına benzer. Yalın bir kuantum tanımlamasında parçacıklar λ_{dB} açılımlı dalga paketleri gibi düşünülebilir. BEC geçişim sıcaklığında λ_{dB}, parçacıklar arası *d* mesafesi ile karşılaştırılabilir hale gelir ve bir Bose-Einstein yoğuşması oluşur (parçacıklar boson ise). Sıcaklık sıfıra yaklaşırken, termal bulut saf bir Bose yoğuşmasına dönüşerek kaybolur (Ketterle 2002).

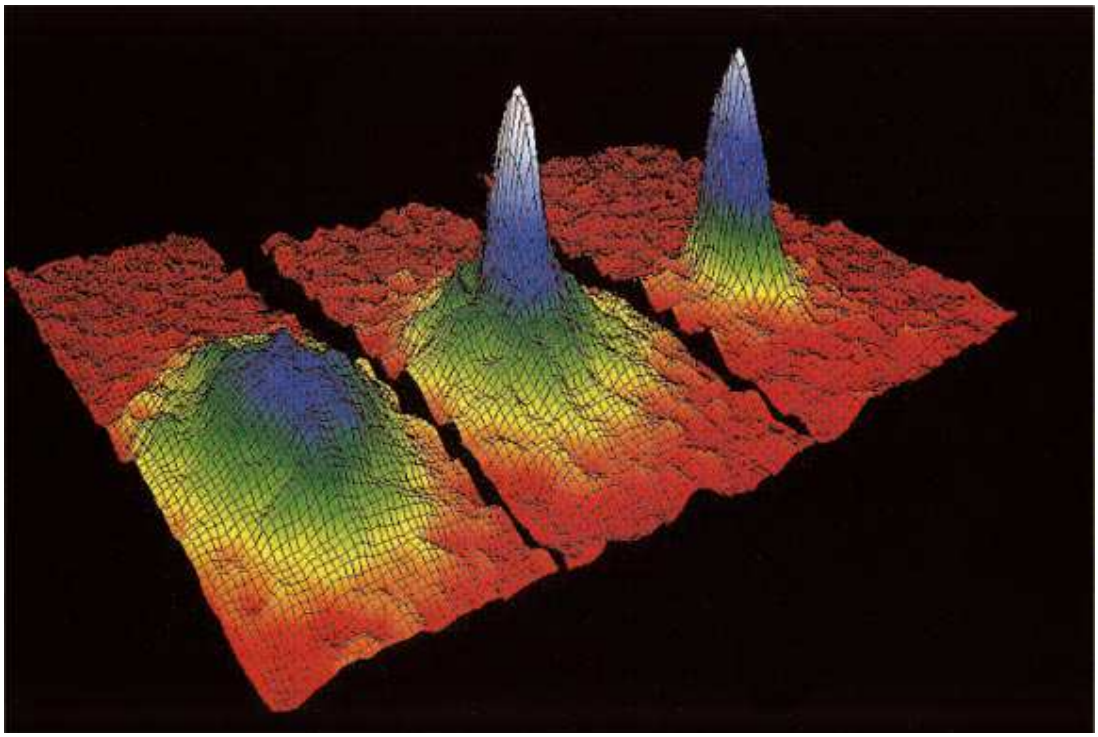
Bose-Einstein yoğuşması termal dengede oluşur. Yoğuşmanın kendisi entropiye katkıda bulunmazken, yoğuşmanın varlığı daha yüksek enerji durumları arasına dağılmış olan diğer parçacıkların entropisini artırır (Dalfovo ve ark. 1999, Krane 2001, Ketterle 2002, Cornell ve Wieman 2002, Hooft 2002,).

2.2. Deneysel teknikler

Bose-Einstein yoğuşması, 1995 yılında alkali atomların buharları üzerinde yapılan bir seri deney sonucunda gözlenmiştir. Bose-Einstein yoğuşması ilk önce JILA'da (Joint Institute for Laboratory Astrophysics, Boulder, Colorado, ABD) rubidyum atomlarıyla, daha sonra da MIT'de (Massachusetts Institute of Technology) sodyum atomlarıyla elde edilmiştir (Anderson ve ark. 1995, Davis ve ark.1995). JILA'dan Wieman ve Cornell, MIT'den de Ketterle bu çalışmalar nedeniyle 2001 yılında Nobel fizik ödülünü paylaşmışlardır. Bu deneylerde atomlar manyetik tuzaklarla hapsedilmiş ve son derece düşük sıcaklıklara kadar

soğutulmuştur, bu sıcaklıklar mikrokelvin civarındadır. Alkali atomlar sınırlayıcı tuzağın kapatılmasını takiben yayılmaya terk edilirler ve ön soğutma olarak lazerli soğutma kullanılır, daha sonra atomlar bir manyetik tuzakta tutulur ve buharlaşma ile soğutma kullanılarak daha da soğutulur. Belli bir sıcaklığın altında hız dağılımında sıfır hız civarında keskin bir pik gözlenir, bu Bose-Einstein yoğuşması elde edildiğinin açık bir işaretidir. Şekil (2.2) Bose-Einstein yoğuşmasının gözlenmesiyle ilgili ilk resimlerden olup rubidyum atomik bulutunun hız dağılımını göstermektedir. Hız dağılımında keskin bir pik gözlenmiştir ki bu Bose-Einstein yoğuşmasının açık bir kanıtıdır. Aynı yılda lityum atomlarında da Bose-Einstein yoğuşmasının gözlendiği rapor edilmiştir (Bradley ve ark. 1995).

1995 yılında alkali atomlar üzerine yapılan bu deneyler Bose-Einstein yoğuşması tarihinde bir kilometre taşı olarak düşünülmektedir. Bose-Einstein yoğuşmasının deneysel olarak elde edilmesinden sonra bu sıra dışı olguya olan ilgide dünya çapında büyük bir artış gözlenmiştir.



Şekil 2.2. Burada rubidyum atomlarının hız dağılımı, yayılma metoduyla elde edilmiştir. En soldaki şekil yoğuşmanın olduğu sıcaklığın üstündeki bir sıcaklığa denk gelir, ortadaki şekil yoğuşmadan hemen sonraki duruma karşılık gelir, sağdaki şekil ise kritik sıcaklıktan oldukça düşük bir sıcaklıkta neredeyse saf yoğuşmaya denk gelir (Anderson ve ark.1995).

2.3. Atomların Soğutulması

Bose-Einstein yoğuşması fiziğin pek çok alanında önemli bir olgu olarak gösterilmiştir ancak yoğuşma için ilk kanıtlar süperakışkan sıvı helyum ve yarıiletkenlerdeki uyarılmalarla ilgili çalışmalardan gelmiştir. Ancak sıvı helyum olayında bir sıvıda niteleyici olarak bulunan güçlü etkileşmeler geçişimin doğasını değiştirir. Bu nedenle seyrek bir atomik gazda BEC'i elde etmek için uzun bir süre geçmiştir. Deneysel çalışmalarda verilen mücadele, atomik gazların bir katıya ya da bir sıvıya dönüşmesini önleyerek sıcaklıklarını mikrokelvin mertebesine ya da daha altına kadar soğutmak üzerine olmuştur.

Bose yoğuşmasına uğramış atomları elde etme çabaları 1980'li yıllarda hidrojen ile başlamıştır. Bu deneylerde hidrojen atomları önce bir soğutucu ile soğutulmuş, sonra manyetik bir alanla tuzaklanmıştır ve daha sonra buharlaşma ile soğutma kullanılarak daha da soğutulmuştur, buharlaşma ile soğutma Hess tarafından önerilmiştir (1986). Bu yaklaşım ile BEC'i gözlemeye oldukça yaklaşılmıştır ancak bu yaklaşım ayrık atomların moleküllere dönüşmesi ve güçlü etkileşmelerin ortaya çıkmasıyla sınırlanmıştır.

Bu süreç içinde atomları tuzaklamak ve soğutmak için daha sonra Doppler soğutması gibi lazer-tabanlı teknikler, polarizasyon-gradiyent soğutma ve manyeto-optiksel tuzaklama geliştirilmiştir (Stwalley ve Nosanow 1976, Cohen-Tannoudji ve Philips 1990, Chu 1991). Lazer ışığının soğuk serbest atomların elde edilmesinde kullanılabileceği 1975 yılında T. W. Hansch ve A.L. Schawlow tarafından önerilmiştir. Burada bir fotonu soğuran bir atom, fotonun momentumunu da alır. Eğer şartlar da uygunsa bu olay atomu yavaşlatır. Bunun ardından ani bir ışıma atomu rasgele bir yöne doğru sevk eder. Atomun soğurduğu ve yaydığı ışınların frekansları ve dolayısıyla enerjileri arasında küçük bir fark vardır. Bu soğutma olarak karşımıza çıkar. Doppler kayması kullanılarak atomların yeni doğrultularında her zaman lazer ışını soğurması sağlanabilir. Böylece uygun bir üç boyutlu lazer konfigürasyonu bütün serbestlik derecelerini soğutur. Bu teknikler atom fiziğinin doğasını önemli ölçüde değiştirmiştir ve oldukça düşük sıcaklıklara varmak için yeni bir yol sağlanmıştır. Alkali atomlar lazer-tabanlı yöntemlere oldukça uygundurlar

çünkü bunların optiksel geçişleri mevcut lazerlerle uyarılabilir ve düşük sıcaklıklara soğutmak için uygun bir iç enerji seviye yapısına sahiptirler.

Ancak bu lazer soğutma teknikleriyle elde edilebilen düşük sıcaklık tek bir fotonun enerjisiyle sınırlıdır. Sonuç olarak λ_{dB}^3 hacmindeki atomların sayısı (faz uzayı yoğunluğu) BEC için gerekli olan değerden oldukça küçüktür.

BEC'i elde etmek için gereken yol geliştirilen soğutma tekniklerinin birleştirilmesinden geçmektedir. Böylece alkali atomların buharı önce lazerle soğutulur ve sonrada buharlaşma ile soğutma uygulanır. Buharlaşma ile soğutmada, yüksek enerjili atomların örnekten kaçmasına izin verilir, böylece geriye kalan atomların ortalama enerjisi azalır. Elastik çarpışmalarla atomlar arasında enerji daha düşük bir sıcaklıkta yeniden dağıtılır. Buharlaşma ile soğutma günlük hayatta karşımıza çıkan bir olgudur, bir bardak çaydaki veya banyo küvetindeki sıcak suyun soğuması buna bir örnektir.

2.4. Manyetik tuzaklamada geliştirilen teknikler

Buharlaşma ile soğutma için atomlar çevrelerinden termal olarak izole edilmelidir. Oldukça düşük sıcaklıklarda atomlar, tuzağın iç çeperine yapışacağından bu işlem elektromanyetik alanlarla yapılmalıdır. Alkali atomlar için en iyi yöntem manyetik sınırlamadır, bunun avantajı alkali atomların manyetik momentlerinden gelir. Atomların lazerle soğutulması ve tuzaklanmasından sonra bütün ışık yok edilir ve homojen olmayan bir alanla atomların etrafında bir potansiyel oluşturulur. Böylece atomlar uzayın küçük bir bölgesine hapsedilir (Monroe ve ark. 1990).

Yeniden termalizasyon için istenen zaman tuzaktaki bir atomun yarı ömründen daha kısaysa atomlar sadece buharlaştırma ile de soğutulabilir. Bu yöntem yüksek yoğunluklara ve yeniden termalizasyonun hızlanmasına müsaade edeceğinden sıkı korumalı bir tuzak gerektirir.

Bu teknikler gerçekte yüksek yoğunluklar ve hızlı buharlaşma üretir ama önemli bir problem vardır: Tuzağın içinde merkezdeki manyetik alan sıfırdır bu da atomun yönünü şaşırmasına ve manyetik momentinin doğrultusunu kaybetmesine

neden olur. Bir manyetik alan, atomları alana dik olan manyetik momentlerle sıralayacağından bu spin dönüşleri tuzaktaki atomların önemli bir kısmının kaybına yol açar. Atomların kaybını önlemek için merkezinde manyetik momenti sıfır olmayan yonca yaprağı şeklinde bir tuzak önerilmiştir. Tuzaktaki yenilik, yonca yaprağı şeklindeki tuzağın manyetik halkalarındadır. Bu da örneğe lazerli soğutmaya, tuzaklamaya ve yoğuşmayı incelemek için optiksel girişe izin verir. Bu dizayn, bu tuzakla elde edilen deneysel sonuçların güvenilir ve kullanışlı olmasını sağlamıştır.

Manyetik bir alandaki buharlaşma, elektron spin rezonansı kullanılarak kolayca halledilebilir. Tuzaklanmış atomların manyetik momentleri, spin-yukarı ve spin-aşağı durumları arasındaki enerji farkı ile rezonanstaki bir radyo-frekans alanı uygulanılarak döndürülür. Alanın frekansı öyle ayarlanır ki sadece bulutun kenarındaki atomları etkiler, harmonik salınıcı bir potansiyelde bu atomlar en yüksek enerjiye sahiptirler. Bu atomların momentleri döndürüldüğünde manyetik kuvvetler anti tuzaklama haline gelir ve atomlar tuzaktan çıkarılır. Bulut soğurken tuzağın merkezine doğru şişer, bu yüzden RF alanın frekansı, bulutun kenarında buharlaştırmayı korumak için devamlı bir şekilde azaltılmalıdır (Petrich ve ark. 1995). Deneysel çalışmalar üzerine daha ayrıntılı bilgi için Anderson ve ark.(1995), Ketterle ve ark.(1996) ile Andrews ve ark.(1997)'nın çalışmalarına başvurulmalıdır.

2.5. Bose-Einstein Yoğuşmasının Teorik Temelleri

2.5.1. Etkileşmeyen bozonlarda BEC

Alkali atomlar için kullanılan manyetik tuzakları karakterize eden önemli bir özellik olan sınırlayıcı potansiyel, kuadratik form yaklaşımıyla

$$V_{ext}(\mathrm{r}) = \frac{m}{2}\left(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2\right) \tag{2.1}$$

şeklinde yazılabilir. Bu durumda sistemin Hamiltoniyeni

$$\hat{H} = \int d\mathrm{r}\,\hat{\psi}^{\dagger}(\mathrm{r})\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{ext}(\mathrm{r})\right]\hat{\psi}(\mathrm{r}) \tag{2.2}$$

şeklindedir. Etkileşmeyen parçacıklar için bu çok-cisim Hamiltoniyeni tek parçacık Hamiltoniyenlerinin toplamıdır. Bu durumda sistemin toplam dalga fonksiyonu, tek parçacık dalga fonksiyonlarının çarpımı şeklinde gelir. Toplam Hamiltoniyenin özdeğerleri ise tek parçacık Hamiltoniyenlerin özdeğerlerinin toplamıdır. Tek parçacık Hamiltoniyenlerinin özdeğerleri ise

$$\varepsilon_{n_x n_y n_z} = \left(n_x + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_x + \left(n_y + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_y + \left(n_z + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_z \tag{2.3}$$

formuna sahiptir, buradaki n_x, n_y, n_z sayıları pozitif tamsayılardır. (2.1) deki potansiyelle sınırlandırılmış N tane etkileşmeyen bozonun taban durumu olan $\phi(\mathrm{r}_1, \cdots, \mathrm{r}_N)$, bütün parçacıklar en düşük tek parçacık durumuna $(n_x = n_y = n_z = 0)$ konularak elde edilir ve yukarıda değinildiği gibi tek parçacık dalga fonksiyonlarının çarpımıyla

$$\phi(\mathbf{r}_1, \cdots, \mathbf{r}_N) = \prod_i \varphi_0(\mathbf{r}_i) \tag{2.4}$$

şeklinde verilir. Buradaki $\varphi_0(\mathbf{r})$

$$\varphi_0(\mathbf{r}) = \left(\frac{m\omega_{ho}}{\pi\hbar}\right)^{3/4} \exp\left[-\frac{m}{2\hbar}\left(\omega_x x^2 + \omega_y y^2 + \omega_z z^2\right)\right] \tag{2.5}$$

şeklindedir ve

$$\omega_{ho} = \left(\omega_x \omega_y \omega_z\right)^{1/3} \tag{2.6}$$

osilatör frekanslarının geometrik ortalamasıdır. Yoğunluk dağılımı $n(\mathbf{r}) = N\left|\varphi_0(\mathbf{r})\right|^2$ haline gelir ve N parçacık sayısı ile lineer olarak artar. Bulutun boyutu N'den bağımsızdır ve sadece harmonik osilatörün genişliği ile belirlenir:

$$a_{ho} = \left(\frac{\hbar}{m\omega_{ho}}\right)^{1/2} \tag{2.7}$$

Bu boyut, (2.5) denklemindeki Gaussyen ifadesinin ortalama genişliği ile uyuşur. Bu sistemin ilk sıradaki önemli karakteristik uzunluğudur. Deneylerden $a_{ho} \approx 1\mu m$ kadar olduğu bilinmektedir. Sonlu sıcaklıklarda atomların sadece bir kısmı en düşük enerji durumunu işgal eder, diğerleri daha yüksek enerjideki uyarılmış durumlara dağılırlar. Termal bulutun yarıçapı a_{ho}'dan daha büyüktür. $k_B T >> \hbar\omega_{ho}$ olduğu varsayılarak ve $n_{kl}(r) \propto \exp[-V_{ext}(r)/k_B T]$ klasik Boltzmann dağılımlı termal bulut yoğunluğu yaklaşımıyla kabaca bir sonuç elde edilir. Eğer $V_{ext}(r) = (1/2)m\omega_{ho}^2 r^2$ ise Gaussyen eğrisinin genişliği $R_T = a_{ho}\left(k_B T/\hbar\omega_{ho}\right)^{1/2}$ dir ve bu a_{ho}'dan daha büyüktür. Bose dağılım fonksiyonunun kullanımı, bu sonuçla fazla değişmez.

Sınırlandırıcı alanın şekli de problemin simetrisini belirler. Örneğin küresel veya eksenel simetrili tuzaklar kullanılabilir. Rubidyum ve sodyum ile yapılan deneylerde eksenel simetri kullanılmıştır. Eksenel koordinat *z* ve radyal koordinat $r_\perp = \left(x^2 + y^2\right)^{1/2}$ olarak tanımlanır ve bunlara denk gelen frekanslarda ω_z ve $\omega_\perp = \omega_x = \omega_y$'dir. Eksenel ve radyal frekanslar arasındaki oran, $\lambda = \omega_z/\omega_\perp$, tuzağın asimetrisini belirler. $\lambda < 1$ iken tuzak puro şeklindedir, $\lambda > 1$ için tuzak disk şeklindedir. λ'ya göre etkileşmeyen bozonların taban durumu olan denk.(2.5)

$$\varphi_0(\mathbf{r}) = \frac{\lambda^{1/4}}{\pi^{3/4} a_\perp^{3/2}} \exp\left[-\frac{1}{2a_\perp^2}\left(r_\perp^2 + \lambda z^2\right)\right] \tag{2.8}$$

şeklinde yeniden yazılabilir. Buradaki $a_\perp = \left(\hbar/m\omega_\perp\right)^{1/2}$, *xy* düzlemindeki harmonik osilatör uzunluğudur.

Eksenel simetrik bir tuzağın seçimi, momentum dağılımı analizinden daha iyi sonuçlar elde etmek içindir. Bu noktayı anlamak için (2.8) denklemindeki dalga fonksiyonunun Fourier dönüşümünü yapalım: $\tilde{\varphi}_0(\mathbf{p}) \propto \exp\left[-a_\perp^2\left(p_\perp^2 + \lambda^{-1} p_z^2\right)/2\hbar\right]$. Bu ifadeden ortalama eksenel ve radyal genişlikler hesaplanabilir. Bunların oranı,

$$\sqrt{\left\langle p_z^2\right\rangle / \left\langle p_\perp^2\right\rangle} = \sqrt{\lambda} \tag{2.9}$$

tuzağın asimetri parametresi ile belirlenir. İki eksen arasındaki oran $\sqrt{\lambda}$ 'ya eşit olur, böylece *xy* düzleminde yayılan bulutun şeklinin bir elips olduğu anlaşılır. Eğer parçacıklar en düşük durum yerine yüksek enerjili özdurumlar arasına termal olarak dağılsaydı, bunların dağılım fonksiyonu eşbölüşüm ilkesine ve oranın 1'e eşit olmasına göre momentum uzayında izotropik olacaktı. Aslında yoğuşma pikinde anizotropinin ortaya çıkması BEC'in elde edileceğinin bir belirtisidir (Anderson ve ark. 1995, Davis ve ark. 1995).

2.5.1.1. Geçiş sıcaklığı

T_c geçiş sıcaklığı, en düşük enerji durumunun makroskopik doluluğunda gözüken en yüksek sıcaklık olarak tanımlanır. Parçacık sayısı *N*, yeterince büyükse, denk.(2.3)'teki sıfır nokta enerjisi ihmal edilebilir ve böylece en düşük enerji $\varepsilon_{\min}$ sıfıra eşitlenir. Uyarılmış durumlardaki parçacık sayısı;

$$N_{ex} = \int_0^\infty d\varepsilon \, \mathrm{g}(\varepsilon) \, f^0(\varepsilon) \tag{2.10}$$

ile verilir, buradaki f^0, Bose dağılım fonksiyonudur. (2.10) ifadesi kimyasal potansiyel $\mu = 0$ iken en yüksek değere ulaşır ve T_c geçiş sıcaklığı, uyarılmış durumlara toplam parçacık sayısının yerleştirilebilmesi şartıyla belirlenir. Bu da;

$$N = N_{ex}(T_c, \mu = 0) = \int_0^\infty d\varepsilon \, \mathrm{g}(\varepsilon) \frac{1}{e^{\varepsilon / kT_c} - 1} \tag{2.11}$$

şeklindedir. Buradaki $g(\varepsilon)$; enerji durum yoğunluğudur, serbest bir bozon gazı için $g(\varepsilon) = C_{3/2}\varepsilon^{3/2-1}$ ve harmonik osilatör frekansı ile sınırlanmış bir bozon gazı için $g(\varepsilon) = C_3\varepsilon^{3-1}$ şeklindedir. Denk. (2.11)'de $x = \varepsilon / kT_c$ şeklinde boyutsuz bir değişken tanımlanırsa

$$N = C_\alpha (kT_c)^\alpha \int_0^\infty dx \frac{x^{\alpha-1}}{e^x - 1} = C_\alpha \Gamma(\alpha)\zeta(\alpha)(kT_c)^\alpha \tag{2.12}$$

ifadesi bulunur. Burada C_α sabittir, $\Gamma(\alpha)$ gama fonksiyonudur ve $\zeta(\alpha)=\sum_{n=1}^{\infty} n^{-\alpha}$ Riemann zeta fonksiyonudur. Denk.(2.12)'deki integrali hesaplarken Bose fonksiyonunu e^{-x}'in kuvvet serisine açarız, burada $\int_0^\infty dx x^{\alpha-1}e^{-x}=\Gamma(\alpha)$ şeklindedir. Sonuç olarak

$$\int_0^\infty dx \frac{x^{\alpha-1}}{e^x-1}=\Gamma(\alpha)\zeta(\alpha) \tag{2.13}$$

ifadesi elde edilir. Tablo (2.1)'de α'nın bazı değerleri için gama (Γ) ve Riemann zeta fonksiyonları listelenmiştir.

Şimdi (2.12) denkleminden

$$kT_c=\frac{N^{1/\alpha}}{\left[C_\alpha\Gamma(\alpha)\zeta(\alpha)\right]^{1/\alpha}} \tag{2.14}$$

ifadesi bulunur. Üç boyutlu bir harmonik potansiyeli için $\alpha=3$'tür ve C_3 sabiti $C_3=\left(2\hbar^3\omega_1\omega_2\omega_3\right)^{-1}$ şeklinde verilir. Denk.(2.14)'ten geçiş sıcaklığı için

$$kT_c=\frac{\hbar\varpi N^{1/3}}{\left[\zeta(3)\right]^{1/3}}\approx 0{,}94\hbar\varpi N^{1/3} \tag{2.15}$$

sonucu elde edilir. Burada ϖ üç osilatör frekansının geometrik ortalamasıdır:

Tablo 2.1. α'nın seçilmiş değerleri için gama (Γ) ve Riemann zeta fonksiyonları

α	$\Gamma(\alpha)$	$\zeta(\alpha)$
1	1	∞
1,5	$\sqrt{\pi}/2=0{,}886$	2,612
2	1	$\pi^2/6=1{,}645$
2,5	$3\sqrt{\pi}/4=1{,}329$	1,341
3	2	1,202
3,5	$15\sqrt{\pi}/8=3{,}32$	1,127
4	6	$\pi^4/90=1{,}082$

$$\varpi = (\omega_1 \omega_2 \omega_3)^{1/3} \tag{2.16}$$

Sonuç olarak denk.(2.15) daha kullanışlı bir şekilde yazılabilir:

$$T_c \approx 4{,}5\left(\frac{\bar{f}}{100Hz}\right) N^{1/3}\ nK \tag{2.17}$$

burada, $\bar{f} = \varpi / 2\pi$ şeklindedir. V hacimli üç boyutlu bir kutuda tekdüze bir Bose gazına denk gelen α değeri 3/2 olup, $C_{3/2}$ sabiti $C_{3/2} = \dfrac{Vm^{3/2}}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3}$ şeklinde verilir ve böylece geçiş sıcaklığı

$$kT_c = \frac{2\pi}{[\zeta(3/2)]^{2/3}} \frac{\hbar^2 n^{2/3}}{m} \approx 3{,}31 \frac{\hbar^2 n^{2/3}}{m} \tag{2.18}$$

ile verilir, burada $n = N/V$ parçacık yoğunluğudur. İki boyutlu tekdüze bir gaz için α, 1'e eşittir ve bu durumda denk.(2.12)'deki integral ıraksar. Böylece iki boyutlu bir kutuda Bose-Einstein yoğuşması sadece sıfır sıcaklıkta meydana gelir. Ancak parçacıklar harmonik osilatör tipi bir potansiyelle sınırlanırsa iki boyutlu bir Bose gazı sıfır olmayan bir sıcaklıkta yoğuşabilir. Bu durumda $\alpha = 2$ 'dir ve denk.(2.12)'deki integral sonludur. ϖ ile göstereceğimiz faz uzayı yoğunluğunu tanımlamak oldukça kullanışlıdır. Bu yoğunluk, termal de Broglie dalga boyunun kübüne $\left(\lambda_T^3 = \left(2\pi\hbar^2 / mkT\right)^{3/2}\right)$ eşit bir hacim içindeki parçacık sayısı olarak tanımlanır:

$$\varpi = n\lambda_T^3 = n\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mkT}\right)^{3/2} \tag{2.19}$$

Gaz klasik ise bu ifade tek parçacıklı durumların doluluğunun bir ölçütüdür. Dolu durumların çoğu kT civarında veya daha az bir değerde enerjiye sahiptirler. Faz uzayı yoğunluğu, parçacık yoğunluğu ve birim hacim başına düşen dolu durumların sayısı arasındaki orandır. Böylelikle Bose-Einstein faz değişimi denk.(2.18)'e göre $\varpi = \zeta(3/2) \approx 2{,}612$ olduğunda ortaya çıkar.

Bir harmonik osilatör potansiyelindeki parçacıklar için iyi tanımlı bir faz geçişiminin varlığı, kT'den daha az tek parçacık enerji seviyelerinin ayrılmasını kabul etmemizin bir sonucudur. İzotropik harmonik bir osilatör için, $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = \omega_0$, bu ifade $\hbar\omega_0$ enerji kuantumunun, kT_c'den daha az olabileceğini ima eder. T_c, denk.(2.15) ile verildiğinden şartımız $N^{1/3} >> 1$ şeklindedir. Eğer parçacık sayısının sonluluğu hesaba katılırsa değişim düzgün olur.

2.5.1.2. Yoğuşma oranı

Denk.(2.10) ile verilen uyarılmış durumda bulunan $\mu = 0$'lı geçişim sıcaklığının altındaki parçacıkların sayısı olan N_{ex},

$$N_{ex}(T) = C_\alpha \int_0^\infty d\varepsilon\, \varepsilon^{\alpha-1} \frac{1}{e^{\varepsilon/kT} - 1} \tag{2.20}$$

şeklinde verilir. $\alpha > 1$ olduğunda integral sonludur ve Denk.(2.13) kullanılarak

$$N_{ex} = C_\alpha \Gamma(\alpha)\zeta(\alpha)(kT_c)^\alpha \tag{2.21}$$

ifadesi elde edilir. Bu sonuç toplam parçacık sayısına bağlı değildir. Ancak T_c için denk.(2.14) ifadesi

$$N_{ex} = N\left(\frac{T}{T_c}\right)^\alpha \tag{2.22}$$

şeklinde yazılabilir. Yoğuşmadaki parçacıkların sayısı böylece

$$N_0(T) = N - N_{ex}(T) \tag{2.23}$$

ile veya

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

ifadesiyle verilir. Üç boyutlu bir kutudaki parçacıklar $(\alpha = 3/2)$ ve birim hacim başına düşen uyarılmış parçacıkların sayısı n_{ex}, denk.(2.21) ve $C_{3/2}$ kullanılarak elde edilebilir:

$$n_{ex} = \frac{N_{ex}}{V} = \zeta(3/2)\left(\frac{mkT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \tag{2.25}$$

Yoğuşmanın miktarı böylece $N_0 = N\left[1-(T/T_c)^{3/2}\right]$ sonucuyla verilir.

Üç boyutlu bir harmonik osilatör potansiyeli için $(\alpha = 3)$, yoğuşmadaki parçacık sayısı

$$N_0 = N\left[1-\left(\frac{T}{T_c}\right)^3\right] \tag{2.26}$$

ile verilir. Bütün durumlarda T_c geçiş sıcaklığı, uygun α değerleri için denk.(2.14) ile verilir (Dalfovo ve ark. 1999, Pethick ve Smith 2001).

2.5.2. Etkileşen Tuzaklanmış Bozonlar

m kütleli *N* tane bozonun $V_{ext}(\boldsymbol{r})$ dış potansiyeliyle sınırlandığını ve iki parçacık arası etkileşim potansiyelinin de $V_{\text{int}}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ olduğunu düşünelim. Bu sistem için Hamiltoniyen

$$H = \sum_i^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m_i}\nabla_i^2 + V_{ext}(\mathrm{r}_i)\right) + \sum_{i>j} V(\mathrm{r}_i, \mathrm{r}_j) \tag{2.27}$$

şeklindedir. Taban durum özelliklerini hesaplamak için küresel simetrik harmonik bir tuzak ile eliptik harmonik bir tuzağı

$$V_{ext}(r) = \begin{cases} \dfrac{1}{2}m\omega_{ho}{}^2 r^2 & (Küresel) \\ \dfrac{1}{2}m\left[\omega_{ho}{}^2(x^2+y^2) + \omega_z^2 z^2\right] & (Eliptik) \end{cases} \tag{2.28}$$

şeklinde düşünelim. Burada ω_{ho}^2 tuzağın potansiyel gücünü tanımlar. Eliptik tuzakta $\omega_{ho} = \omega_\perp$ ifadesi *xy* düzlemindeki tuzak frekansıdır ve ω_z , *z* doğrultusundaki frekanstır. Denk.(2.28)'de belirtilen eliptik tuzakta $T = 0\,\mathrm{K}$'de tek bir bozonun ortalama kare titreşim genliği $\langle x^2 \rangle = (\hbar / 2m\omega_{ho})$ şeklindedir, öyle ki $a_{ho} = (\hbar / m\omega_{ho})^{\frac{1}{2}}$ tuzağın karakteristik boyunu tanımlar. Frekansların oranı $\lambda = \omega_z / \omega_\perp$ olarak gösterilebilir ve bu da bizi tuzak boylarının oranına $a_\perp / a_z = (\omega_z / \omega_\perp)^{\frac{1}{2}} = \sqrt{\lambda}$ götürür.

Bu çalışmadaki amacımız zayıf etkileşimli Bose sistemlerinde BEC'in genel özelliklerini tartışmaktır. Bu amaçla bozonlar arası etkileşmeyi göstermek için bir sert küre potansiyeli yani

$$V_{\mathrm{int}}(r) = \begin{cases} \infty & r \le a \\ 0 & r > a \end{cases} \tag{2.29}$$

şeklinde bir potansiyel kullanacağız. Buradaki *a*, bozonların sert küre çapıdır. Eğer bozonlar arası mesafe *a*'dan daha büyük bir *r* mesafesi ise $V_{\mathrm{int}}(r)$ sıfırdır, eğer $r \le a$ gibi bir mesafede bozonlar bir araya gelmeye çalışırlarsa potansiyelin değeri sonsuzdur. a_{ho}'a bağlı uzunluklara ve $\hbar\omega_{ho}$'a bağlı enerjilere giriş yaptıktan sonra çok parçacıklı Hamiltoniyen

$$H = \sum_i^N \frac{1}{2}\left(-\nabla_i^2 + x_i^2 + y_i^2 + \lambda^2 z_i^2\right) + \sum_{i<j} V_{\mathrm{int}}\left(\left|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\right|\right) \tag{2.30}$$

şeklinde yazılabilir.

Bu Hamiltoniyen etkileşmenin yüksek olduğu durumda da kullanılabilir ve amaçlarımız için yeterince genel bir tanımlamayı sağlar. İdeal bir gazın geçiş sıcaklığı ve zayıf atom yoğunluğu

$$n\lambda_T^3 \ge 2{,}612 \tag{2.31}$$

ile ilişkilidir, buradaki λ_T atomik termal dalga boyudur.

Bose-Einstein yoğuşması yoğunluğun $n = 10^{12} - 10^{14}\ par/cm^3$ olduğu, 100 *nK* civarındaki sıcaklıklarda alkali gazlarda oluşmaya başlar. Bose-Einstein yoğuşmasının teorisi, ikili çarpışmaların yüksek mertebeli çarpışmalardan daha sık olduğu durumlar için geliştirilmiştir. Bu oldukça iyi bilinen seyrek gaz yaklaşımıdır. Seyreklik şartı atomlar arası mesafenin, atomlararası kuvvetlerin menzilinden daha büyük olduğu durumda gerçekleşir. Sert merkezli bir potansiyel de olası bir fiziksel parametre olarak alınabilir. Seyreklik atomik dalga boyunun, sert merkez çapıyla karşılaştırıldığında uzun olması durumunda olur, yani $\lambda_T >> a$ veya $ka << 1$ olur, burada $k = 2\pi/\lambda_T$ şeklindedir. $ka << 1$ durumunda sert merkezli bir potansiyel yolu ile etkileşen, iki parçacığın saçılması, *a* saçılma mesafesine sahip bir *s* dalgasıdır. Bu saçılma mesafesi genelde birkaç nanometre mertebesindedir, bu nedenle seyreklik parametresi gerçekten de oldukça küçüktür $\left(\sqrt{na^3} \sim 10^{-3}\right)$. Bu şartlar altında atomlararası kuvvetler $V(\mathbf{r},\mathbf{r}') = g\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ şeklindeki etkileşmelerle modellenebilir.

Burada

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \tag{2.32}$$

çiftlenim sabitidir, *a*'nın pozitif değeri atomlar arası itişmeyi belirlerken, negatif değeri atomların birbirini çektiği durumu gösterir.

Seyrek durumda her atom etkin bir potansiyel enerji yolu ile çevresindeki tüm atomlardan etkilenir ve kuantum dalgalanmaları nedeniyle yoğuşmanın azalması, $\sqrt{na^3}$ seyreklik parametresi ile ölçeklendirildiğinden oldukça küçüktür. Bu şartlarda sıfır sıcaklıktaki gaz, tamamıyla yoğuşma dalga fonksiyonuyla karakterize edilir. Yoğuşma dalga fonksiyonu Gross-Pitaevskii (GP) denklemi olarak bilinen nonlineer bir Schrödinger denklemi ile belirlenir. Düşük sıcaklıkta seyrek sistemlerde Bose-Einstein yoğuşması üzerine olan çalışmalarda GP denklemi oldukça önemli bir rol oynar, bu denklem lineer ve nonlineer geçiş olgusunu tanımladığı gibi taban durumu da tanımlar. Ancak GP denklemi, güçlü etkileşimlerin olduğu sistemlere uygulanamaz.

3. YOĞUNLUK FONKSİYONEL TEORİSİ

Yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT), fizik ve kimyanın neredeyse tüm alanlarında yaygın olarak kullanılan bir hesaplama tekniğidir. DFT teorisinin temeli, Hohenberg ve Kohn'un (1964) teoremlerine dayanır. Birinci Hohenberg-Kohn teoremi, bir sistemin V(r) potansiyelinin ve diğer bütün taban durum elektronik özelliklerinin belirlenmesi için taban durum elektron yoğunluğunun bilinmesinin yeterli olduğunu söyler (Dobson 1999). Bu teorem,

$$V(r) \leftrightarrow n(r) \tag{3.1}$$

şeklinde gösterilebilir. Bir sistemin toplam taban durum enerjisi, yoğunluğun fonksiyoneli olarak

$$E[n(r)] = F[n(r)] + \int n(r)V(r)d^3r \tag{3.2}$$

şeklinde yazılabilir. Burada F[n(r)] yoğunluğun evrensel bir fonksiyonelidir (Hohenberg ve Kohn 1964, Nagy 1988). F[n(r)]'nin evrenselliği, V(r) potansiyeline bağlı olmaması ve atomlar, moleküller veya katılar gibi tüm sistemler için aynı şekle sahip olması anlamındadır (Harbola ve Banerjee 2003).

İkinci Hohenberg-Kohn teoremi, DFT için bir enerji varyasyon prensibi sağlar. Belirli bir V_0 dış potansiyelindeki N-elektronlu bir sistemin taban durum enerjisi, bir ñ(r) deneme yoğunluğu için her zaman, sistemin gerçek taban durum enerjisinden daha büyük veya eşittir. Eşitlik, ancak ve ancak, ñ(r) deneme yoğunluğunun, gerçek taban durum yoğunluğu n(r)'ye eşit olması ile sağlanır. Yani,

$$E_0 \equiv E_{V_0}[n] \leq E_{V_0}[\tilde{n}] \tag{3.3}$$

ilişkisi her zaman geçerlidir. Gerçek taban durum yoğunluğu için, taban durum enerji fonksiyonelinin değişiminin minimum olması gerekir. Dolayısıyla, ñ(r)≥0 ve

$$\int \tilde{n}(r)d^3r = N \tag{3.4}$$

olmak şartıyla, Denk.(3.2) ile verilen enerji fonksiyonelinin değişimi

$$\delta\left\{E[n(r)]-\mu\left[\int n(r)d^3r-N\right]\right\}=0 \tag{3.5}$$

Euler denklemine gider. Burada

$$\mu=\frac{\delta E[n(r)]}{\delta n(r)}=V(r)+\frac{\delta F[n(r)]}{\delta n(r)} \tag{3.6}$$

Olup Lagrange çarpanı olarak adlandırılır ve sistemin enerji boyutundaki kimyasal potansiyeldir (Parr ve Yang 1989, Nagy 1998, Thijssen 1999, Perdew ve Kurth 2003). Eğer, F[n(r)] tam olarak bilinirse, taban durum elektron yoğunluğu için Denk.(3.5) tam olarak sağlanır. Bununla birlikte F[n(r)] fonksiyonelinin biçimi tam olarak bilinmemektedir. Taban durum elektron yoğunluğu, prensip olarak Denk.(3.5) çözülerek belirlenebilir. Bunun için, fonksiyonel F[n(r)], bir deneme ñ(r) yoğunluğu ile tanımlanır. (Parr ve Yang 1989, Nagy 1998).

Kohn-Sham (1965) yaklaşımına göre F[n(r)] fonksiyoneli

$$F[n(r)]=T_s[n(r)]+\frac{e^2}{2}\int\int\frac{n(r)n(r')}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r|r-r'|}d^3rd^3r'+E_{xc}[n(r)] \tag{3.7}$$

şeklinde yazılabilir. Burada birinci terim $T_s[n]$ tek parçacık kinetik enerji fonksiyoneli, ikinci terim elektron-elektron etkileşmesinden kaynaklanan Hartree potansiyeli, son terim $E_{xc}[n]$ ise kuantum mekaniksel değiş-tokuş ve korelasyon enerjisidir. Elektron yoğunluğu, tek elektron öz-fonksiyonları ψ_i'ler cinsinden yazılmak istenirse Denk.(3.2), Kohn-Sham denklemlerine dönüşür (Kohn ve Sham 1965, Parr ve Yang 1989, Thijssen 1999, Dobson 1999, Argaman ve Makov 2000, Burke ve ark. 2003, Perdew ve Kurth 2003). Bu durumda,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V_{etk}(r)\right]\psi_i(r)=\varepsilon_i\psi_i(r) \tag{3.8}$$

$$V_{etk}(r)=V_{etk}[n(r)]=V(r)+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r}\int\frac{n(r')}{|r-r'|}d^3r'+V_{xc}(r) \tag{3.9}$$

$$n(r) = \sum_{i=1}^{N} |\psi_i(r)|^2 \tag{3.10}$$

ifadeleri elde edilir. Denk.(3.9)'daki $V_{xc}(r)$ ifadesi değiş-tokuş ve korelasyon potansiyeli olup enerji boyutundadır. Denk.(3.7)'nin fonksiyonel türevi alındığında bu potansiyel için

$$V_{xc}(r) = \frac{\delta E_{xc}[n(r)]}{\delta n(r)} \tag{3.11}$$

ifadesi elde edilir. Denk.(3.8), (3.9) ve (3.10) denklem takımı meşhur Kohn-Sham denklemleri olarak bilinir. Bu üç denklemin öz-uyumlu olarak çözülmesi gerekmektedir. Bunun için bir başlangıç deneme yoğunluğu ile başlanıp $V_{etk}[n(r)]$ ifadesi belirlenir. Bu nicelik Denk.(3.8)'de yerine konarak bu denklem çözülür. Bu denklemin çözümünden elde edilen öz-vektörler Denk.(3.10)'de kullanılarak yeni yoğunluk bulunur. Yeni yoğunluk kullanılarak önceki adımlar, öz-uyumlu yakınsama sağlanıncaya kadar tekrar edilir. Toplam enerji ifadesi ise

$$E = \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_i - \frac{e^2}{2} \iint \frac{n(r)n(r')}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r |r - r'|} d^3r\, d^3r' + E_{xc}[n(r)] - \int V_{xc}[n(r)]n(r) d^3r \tag{3.12}$$

şeklinde verilir.

Biçimsel olarak Kohn-Sham denklemleri, etkileşmeyen elektronlardan meydana gelen bir sistemi tanımlar. Bu ise, Kohn-Sham denklemlerinin çözümünü oldukça kolaylaştırır. Kohn-Sham denklemleri, potansiyel ifadesindeki kuantum mekaniksel çok elektron değiş-tokuş ve korelasyon etkileşimleri dışında Hartree denklemleriyle aynı biçimdedir. Yani, Kohn-Sham elektronları, diğer elektronlar tarafından oluşturulan etkin bir potansiyel içinde hareket ettikleri için, Kohn-Sham denklemiyle birlikte çok parçacık etkileşmeleri de göz önüne alınır. Dolayısıyla, gerek Kohn-Sham denklemleri, gerekse Hartree denklemleri, çok elektron sistemlerini tanımlamak için tek elektron denklemlerini kullanır (Parr ve Yang 1989). Bu yüzden, Kohn-Sham denklemlerinin bilgisayar hesaplamalarında harcanan çaba, Hartree denklemlerinde harcanan çabadan daha çok değildir. Bunun için, Hartree

denklemlerinin çözümünü gerçekleştirebilen bir bilgisayarda, Kohn-Sham denklemleri de rahatlıkla çözülebilir.

Aslında, Kohn-Sham denklemleri, bu ana kadar herhangi bir yaklaşım yapılmadığından, çok elektron sistemleri için tam bir tanımlamadır (Burke ve ark. 2003). Yoğunluk fonksiyonel teorisindeki asıl problem, değiş-tokuş ve korelasyon enerjisinin belirlenmesidir ve bu noktada $E_{xc}[n(r)]$ fonksiyonelinin belirlenmesi için yaklaşıklık yapmak kaçınılmaz hale gelir (Parr ve Yang 1989, Dobson 1999, Burke ve ark. 2003, Perdew ve Kurth 2003). $E_{xc}[n(r)]$ fonksiyonelinin belirlenmesinde en yaygın kullanılan yaklaşım, Kohn-Sham tarafından önerilen yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA)'dır.

3.1. Yerel Yoğunluk Yaklaşımı

Bu yaklaşımda, yoğunluğu homojen olmayan bir sistemin özellikleri, bölgesel olarak homojen bir elektron gazının özellikleriyle tanımlanabilir (Kohn ve Sham 1965). Yani elektron gazının belirli bir bölgedeki yoğunluğunun zamanla değişiminin çok küçük olduğu kabul edilir. Değiş-tokuş ve korelasyon potansiyeli, bölgesel yoğunluğa bağlı olan değiş-tokuş ve korelasyon enerjisi $E_{xc}[n]$'nin fonksiyonel bir türevidir ve bu, homojen bir elektron gazı için, elektron yoğunluğunun değerine bağlı olacaktır (Thijssen 1999). Yerel yoğunluk yaklaşımı altında değiş-tokuş ve korelasyon enerjisi

$$E_{xc}[n(r)] = \int n(r)\varepsilon_{xc}[n(r)]d^3r \qquad (3.13)$$

ifadesiyle verilir. Burada $\varepsilon_{xc}[n(r)]$, n yoğunluklu bir homojen elektron gazında parçacık başına değiş-tokuş ve korelasyon enerjisidir. Yerel yoğunluk yaklaşımı homojen elektron gazı için tam bir ifade olduğu için elektron yoğunluğu çok hızlı değişmeyen sistemlerde oldukça iyi sonuçlar verir (Thijssen 1999). Değiş-tokuş ve korelasyon potansiyeli, Denk. (3.13)'den

$$V_{xc}[n(r)] = \frac{\delta E_{xc}[n(r)]}{\delta n} \qquad (3.14)$$

fonksiyonel türev ifadesiyle hesaplanır. Buradaki fonksiyonel türev olarak yazılan potansiyel ifadesi

$$V_{xc}[n(r)] = \frac{d}{dn}\left(n\varepsilon_{xc}[n(r)]\right) \tag{3.15}$$

şeklinde normal türevli olarak yazılabilir.

Burada, $\varepsilon_{xc}[n(r)]$ terimi, değiş-tokuş ve korelasyon terimleri olarak ikiye ayrılabilir. Yani,

$$\varepsilon_{xc}[n(r)] = \varepsilon_x[n(r)] + \varepsilon_c[n(r)] \tag{3.16}$$

şeklinde değiş-tokuş ve korelasyondan gelen katkıların toplamı olarak yazılabilir (Parr ve Yang 1989). Benzer şekilde değiş-tokuş ve korelasyon potansiyeli de bu etkileşmelerden gelen katkıların toplamı olarak yazılabilir. Buna göre,

$$V_{xc}[n(r)] = V_x[n(r)] + V_c[n(r)] \tag{3.17}$$

olur. Değiş-tokuş ve korelasyon enerjisi $\varepsilon_{xc}[n(r)]$'nin biçimi için bir çok farklı yaklaşım yapılmıştır (Hedin ve Lundqvist 1971, Gunnarson ve Lundqvist 1976, Ceperley 1978, Ceperley ve Alder 1980, Perdew ve Zunger 1981, Perdew ve Wang 1992). Değiş-tokuş kısmının biçimi bilinmekte olup, Wigner ve Seitz (1933), Thomas-Fermi modelinde yaklaşık olarak

$$\varepsilon_x = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r}\frac{3}{4}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} n^{1/3} \tag{3.18}$$

şeklinde hesaplanabileceğini göstermişlerdir. Görüldüğü gibi elektron başına değiş-tokuş enerjisi $n^{1/3}$ ile orantılıdır. Değiş-tokuş potansiyeli ise Denk.(3.15) kullanılarak hesaplandığında

$$V_x = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} n^{1/3} \tag{3.19}$$

ifadesi elde edilir. Bu durumda toplam değiş-tokuş enerjisi

$$E_x[n] = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r}\frac{3}{4}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3}\int n^{4/3}d^3r \qquad (3.20)$$

ile verilir.

Korelasyon enerjisinin şekli, değiş-tokuş enerjisinden çok daha karmaşıktır ve hesaplanması çok daha zordur. Bu enerjinin belirlenmesi için parametrelere bağlı farklı analitik ifadeler geliştirilmiştir (Hedin ve Lundqvist 1971, Gunnarson ve Lundqvist 1976). Bunlardan en çok kullanılanlardan birisi Hedin ve Lundqvist (1971) tarafından önerilmiş olan, değiş-tokuş ve korelasyon potansiyelinin birlikte ifade edildiği biçimdir. Birkaç parametreye bağlı olan bu ifade

$$V_{xc} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r}2\beta\left[\frac{3}{8\pi}n(r)\right]^{1/3} \qquad (3.21a)$$

$$\beta = 1 + 0.0368r_s\ln\left(1+\frac{21}{r_s}\right) \qquad (3.21b)$$

$$r_s = \left(\frac{3}{4\pi n(r)}\right)^{1/3} \qquad (3.21c)$$

şeklindedir. Burada r_s Wigner-Seitz yarıçapıdır. Bu değiş-tokuş ve korelasyon potansiyeli kullanılarak bir sistemin toplam enerjisi

$$E = \sum_{i=1}^{N}\varepsilon_i - \frac{e^2}{2}\iint\frac{n(r)n(r')}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r|r-r'|}d^3r\,d^3r' - \frac{1}{4}\int V_{xc}[n(r)]n(r)d^3r \qquad (3.22)$$

ifadesiyle hesaplanabilir (See ve ark. 2002).

Korelasyon enerjisi için daha başarılı çalışmalar kuantum Monte Carlo benzetişim tekniği kullanılarak Ceperley ve Alder (1980) tarafından yapılmış olup, onların elde ettikleri sonuçlara Perdew ve Zunger (1981) parametrelere bağlı analitik ifade geliştirmişlerdir. Buna göre, parametrelere bağlı korelasyon enerjisi

$$\varepsilon_c = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r}\left(A\ln r_s + B + Cr_s\ln r_s Dr_s\right) \qquad r_s<1 \qquad (3.23)$$

$$\varepsilon_c = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r}\frac{\gamma}{1+\beta_1\sqrt{r_s}+\beta_2 r_s} \qquad r_s\geq 1 \qquad (3.24)$$

ifadeleriyle verilmektedir. Benzer şekilde korelasyon potansiyeli ise

$$V_c = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r}\left(A\ln r_s + B - \frac{A}{3} + \frac{2}{3}Cr_s\ln r_s + \frac{1}{3}(2D-C)r_s\right) \qquad r_s<1 \qquad (3.25)$$

$$V_c = \varepsilon_c\frac{1+\frac{7}{6}\beta_1\sqrt{r_s}+\frac{4}{3}\beta_2 r_s}{1+\beta_1\sqrt{r_s}+\beta_2 r_s} \qquad r_s\geq 1 \qquad (3.26)$$

şeklinde verilir. Buradaki parametrelerin değerleri γ=-0,1423, β_1=1,0529, β_2=0,3334, A=0,0311, B=-0,048, C=0.0020, D=-0,0116'dır (Perdew ve Zunger 1981). Mevcut yaklaşımlar içinde korelasyon enerjisi için kullanılan en iyi yaklaşım bu ifadelerdir. Wigner-Seitz yarıçapı r_s değerinin 1'den küçük olduğu kısım yüksek yoğunluk bölgesi, 1'den büyük olduğu kısım ise düşük yoğunluk bölgesine karşılık gelmektedir.

3.2. Varyasyon Yöntemi

Varyasyon yöntemi, basitliği ve çabuk sonuca varılması açısından en çok kullanılan yaklaşık hesaplama tekniklerinden birisidir. Zamandan bağımsız bir $\hat{H}$ Hamilton operatörü için bağlı durum enerjilerini ve dalga fonksiyonlarını yaklaşık olarak bulmak için kullanılan, oldukça yararlı bir yöntemdir (Merzbacher 1998, Springborg 2000, Bransden ve Joachin 2000, Greiner 2001). $\hat{H}$ Hamiltonuyla tanımlanan bir sistemin en düşük enerji özdeğeri E_0 olsun. ϕ, gerekli sınır şartlarını sağlayan herhangi bir normalize fonksiyon olmak üzere, enerjinin beklenen değeri,

$$E[\phi] = \left\langle\phi\middle|\hat{H}\middle|\phi\right\rangle = \int\phi^*\hat{H}\phi d^3r \geq E_0 \qquad (3.27)$$

olur. Varyasyon teoremi, sistemin taban durum enerjisi için bir üst sınır hesaplamamıza izin verir (Levine 2000). Denk. (3.27)'yi ispatlamak için ϕ, $\hat{H}$'ın ψ_k kararlı durum özfonksiyonlarının tam bir ortonormal setine açılabilir:

$$\phi = \sum_k a_k \psi_k \quad \text{ve} \quad \sum_k |a_k|^2 = 1 \tag{3.28}$$

Burada,

$$\hat{H}\psi_k = E_k \psi_k \tag{3.29}$$

özdeğer denklemidir. Denk (3.28)'deki açılımda ϕ, ψ_k'nın sağladığı sınır şartlarını sağlamaktadır.

Bu durumda ortalama enerji,

$$\left\langle \phi \middle| \hat{H} \middle| \phi \right\rangle = \sum_{k,j} a_k^* \left\langle \psi_k \middle| \hat{H} \middle| \psi_j \right\rangle a_j \tag{3.30}$$

şeklinde olur. Denk.(3.29)'daki özdeğer denklemi burada kullanılacak olursa,

$$\left\langle \phi \middle| \hat{H} \middle| \phi \right\rangle = \sum_{k,j} a_k^* \left\langle \psi_k \middle| \hat{H} \middle| \psi_j \right\rangle a_j = \sum_{k,j} a_k^* \left\langle \psi_k \middle| \psi_j \right\rangle E_j a_j \tag{3.31}$$

$$\left\langle \phi \middle| \hat{H} \middle| \phi \right\rangle = \sum_{k,j} a_k^* a_j E_j \delta_{k,j} \tag{3.32}$$

ifadesi elde edilir. Burada ψ_k'ların ortonormal olma özellikleri kullanıldı. Kronecker deltasının

$$\delta_{k,j} = \begin{cases} 1 & k = j \text{ ise} \\ 0 & k \neq j \text{ ise} \end{cases} \tag{3.33}$$

özelliği hatırlanacak olursa, bu Kronecker deltasından dolayı, k=j dışındaki diğer tüm terimlerden gelecek katkı sıfırdır. Dolayısıyla Denk.(3.32),

$$E[\phi] = \left\langle \phi \middle| \hat{H} \middle| \phi \right\rangle = \sum_k a_k^* a_k E_k = \sum_k |a_k|^2 E_k \geq E_0 \sum_k |a_k|^2 \tag{3.34}$$

şekline dönüşür. $\Sigma|a_k|^2=1$ ve E_0 sistemin en düşük enerji özdeğeri olduğu için, $E_k \geq E_0$ eşitsizlik ifadesi elde edilir. Normalize olmayan ϕ fonksiyonları kullandığı zaman (3.27) denklemi,

$$E[\phi] = \frac{\left\langle \phi \middle| \hat{H} \middle| \phi \right\rangle}{\left\langle \phi | \phi \right\rangle} = \frac{\int \phi^* \hat{H} \phi d^3 r}{\int \phi^* \phi d^3 r} \geq E_0 \tag{3.35}$$

şeklinde yazılabilir. Görüldüğü gibi bu ifade, gerçek taban durum enerjisi E_0 için bir üst sınır sağlamaktadır. Buradaki Denk.(3.35), E_0 taban durum enerjisinin hesabı için Rayleigh-Ritz varyasyon yöntemi olarak adlandırılır (Bransden ve Joachin 2000, Greiner 2001). Aslında bu yöntem, $E[\phi]$ niceliğinin hesaplanmasından başka bir şey değildir. Buradaki ϕ fonksiyonu, sayısal değeri reel sayılardan oluşan α_i gibi bazı değişim parametreleri içeren bir deneme dalga fonksiyonudur. Dolayısıyla, $E[\phi]$ fonksiyoneli, bu varyasyon parametrelerinin, $E_k(\alpha_1, \alpha_2,..., \alpha_n)$ şeklinde bir fonksiyonu olur ve E_0 taban durum enerjisine ϕ deneme dalga fonksiyonunun izin verdiği en iyi yaklaşımı yapmak için bu α_i değerlerini

$$\frac{\partial}{\partial \alpha_i} E_k(\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_n) = 0 \tag{3.36}$$

şeklinde belirlemek gerekir. Belirlenen bu α_i değerleri ϕ deneme dalga fonksiyonunda yerine konularak, hesaplanan taban durum enerjisine karşılık gelen özfonksiyonlar da bulunmuş olur.

Bu tekniğin başarısı, deneme dalga fonksiyonu olarak seçilen dalga fonksiyonunun, sistemi ne kadar iyi tanımladığına bağlıdır. Yani seçilen deneme dalga fonksiyonu, sistemi ne kadar iyi karakterize ediyorsa, yöntem o oranda başarılı olmakta ve iyi sonuç vermektedir. Fakat birçok durumda, ele alınan sistemi en iyi derecede tanımlayabilecek bir deneme dalga fonksiyonunun seçilmesi ise ayrı bir problem oluşturmaktadır. Yine bu yöntemde, seçilen deneme dalga fonksiyonu,

varyasyon parametresine bağlı olarak belirli bir analitik formla sınırlı kalmaktadır. Ancak varyasyon parametresi ya da parametreleri ölçüsünde değişiklikler olmaktadır (Şafak ve ark. 2003). Bununla birlikte, birçok varyasyon parametresi içeren deneme dalga fonksiyonları da kullanılabilir. Böyle durumlarda da parametre sayısı arttığı için işlem zamanı çok uzayabilmekte, bazen de parametre sayısının çokluğuna bağlı olarak hiçbir anlamlı sonuç alınamaması söz konusu olmaktadır.

4. KUANTUM GENETİK ALGORİTMA

Genetik Algoritma (GA), biyolojik dünyadaki genetik süreçlerden ilham alan genel bir araştırma ve sayısal optimizasyon (eniyileme) yöntemidir (Coley 2001). Bu genetik kurallar, basitçe, ortama en fazla uyum sağlayan canlının hayatını sürdürmesi, uyum sağlayamayan canlının ise elenmesi olarak tarif edilebilir. İlk kez Holland (1975) tarafından ortaya atılan GA tekniği, mühendislik ve malzeme biliminde (Venugopal ve Narendran 1992, Homaifar ve ark. 1994, Yang ve Gen 1994, Phillips ve ark. 1996, Şen ve ark. 2001, Samanta 2004, Kulkarni 2004, Castro 2004) yıllardır yoğun bir şekilde kullanılmakta olup, fiziğin bir çok alanında da (Judson 1994, Wanschura 1996, Kariuki 1997, Pullan 1997, Zacharias ve ark.1998, Şahin ve ark. 2000, Liu ve ark. 2000, Brunetti 2000, Kim ve ark. 2001, Aydın ve Yıldırım 2004, Kudla 2004) kullanılmaktadır. Son yıllarda, kuantum mekaniksel sistemlerin taban durum enerji seviyelerinin hesaplanmasında da kullanılmaya başlanmış ve Schrödinger denklemi bu yöntemle çözülmüştür (Chaudhury ve Bhattacharyya 1998, Nakanishi ve Sugawara 2000, Grigorenko ve Garcia 2000, 2001, Saha ve ark. 2001, Şahin ve Tomak 2002, Şafak ve ark. 2003).

Kuantum mekaniksel uygulamaları, kuantum genetik algoritma (KGA) olarak da adlandırılan bu yöntemin bu alandaki uygulaması, geleneksel varyasyon yönteminde olduğu gibi enerji minimizasyon ilkesine dayanır. Bununla birlikte, KGA tekniği, geleneksel varyasyon yönteminden oldukça farklıdır ve çok daha iyi sonuçlar vermektedir. Bu farklılıklar şu şekilde özetlenebilir: i) KGA yönteminin doğası rastsallığa dayanırken geleneksel varyasyon yöntemi belirli kurallara dayanır. ii) KGA yönteminde hesaplamaya, varyasyon yönteminde olduğu gibi tek bir noktadan (analitik bir ifadeyle veya bu analitik ifadeye ait bir ya da birkaç değerle) değil, bir noktalar topluluğuyla yani problemin muhtemel çözümlerinin oluşturduğu bir başlangıç popülasyonuyla başlanır. iii) KGA'da parametreler kodlanarak kullanılır. Parametre eniyilemesinde genelde ikilik kod kullanılmakla birlikte, daha farklı kodlama sistemleri de kullanılabilir. iv) Varyasyon yönteminde belirli bir analitik ifadeyle sınırlanırken, uygulamaya bağlı olarak KGA yönteminde herhangi bir analitik ifadeyle sınırlanma söz konusu değildir. v) Özellikle çoklu parametre

eniyilemesi yaparken, varyasyon yönteminde parametreleri sıralı bir biçimde değiştirerek çözüme ulaşılmaya çalışılırken KGA yönteminde aynı anda tüm parametrelerin değeri değiştirilebilir ki bu durum önemli derecede hız farkı sağlar.

KGA yöntemi üç temel prensip üzerine kurulmuştur. Bunlar: i) kopyalama ya da yeniden üretim, ii) çaprazlama ve iii) mutasyon süreçleridir. Bu süreçlerin uygulanmasında özellikle çaprazlama ve mutasyon için bir gerçekleşme olasılığı belirlenir. Genetik algoritma uygulamalarında çaprazlama olasılığı genelde yüksek seçilir. Böylece popülasyondaki çeşitlilik artırılır. Bununla birlikte, mutasyon olasılığı küçük seçilir. Eğer, mutasyon olasılığı da büyük seçilirse problemin yakınsaması güçleşir ve rastgelelik çok artar. KGA çalışmaya, problemin muhtemel çözümlerinin oluşturduğu bir başlangıç popülasyonuyla başlar. Başlangıç popülasyonu, problemin çözümünün olduğu aralıkta seçilirse yakınsama süresi çok kısalır. GA yönteminin, kuantum mekaniksel uygulaması için, iki farklı yaklaşımdan bahsedilebilir. Bunlardan birincisi parametre eniyilemesi, ikincisi ise dalga fonksiyonu eniyilemesidir. $\phi(\alpha_1, \alpha_2,..., \alpha_n)$ bir deneme dalga fonksiyonu olsun. Eğer, parametre eniyilemesi yapılacak ve geleneksel varyasyon tekniğinde olduğu gibi α_i değerleri belirlenecekse bu durumda başlangıç popülasyonunun bireyleri α_i'nin rastgele belirlenmiş değerlerinden oluşur. Bu değerler dalga fonksiyonunun analitik ifadesinde kullanılır ve elde edilen bu analitik ifadeyle hesaplamalar gerçekleştirilir. Toplam birey sayısı, popülasyon büyüklüğü veya sayısı olarak adlandırılır. Şayet, dalga fonksiyonu eniyilemesi yapılacaksa, bu durumda, rastgele belirlenen α_i değerleriyle oluşturulan dalga fonksiyonlarının sayısal değerleri başlangıç popülasyonunu oluşturur ve bu dalga fonksiyonlarının her birisi bir birey olarak göz önüne alınır. Hesaplamalar, bu sayısal dalga fonksiyonları üzerinden gerçekleştirilir. Böylece, analitik ifade ve α_i değerleri, sadece başlangıç popülasyonunu oluşturmak için bir defaya mahsus olmak üzere kullanılmış olur.

A_n, her bir bireyin normalizasyon sabiti olmak üzere, oluşturulan bu başlangıç popülasyonu

$$A_n^2 \langle \phi_n | \phi_n \rangle = A_n^2 \int \phi_n^* \phi_n d^3r = 1 \qquad (4.1)$$

ifadesiyle normalize edilir. Normalize olmuş bu dalga fonksiyonu popülasyonu

$$E_n[\phi] = \langle \phi_n | \hat{H} | \phi_n \rangle = \int \phi_n^* \hat{H} \phi_n d^3r \qquad (4.2)$$

denkleminde kullanılarak enerjinin beklenen değeri belirlenir. Buradaki indis n değerleri, popülasyon içindeki birey numarasına karşılık gelmektedir (n=1, 1. birey, n=2, 2. birey gibi). Elde edilen bu enerji değerleri kullanılarak, her bir bireyin uygunluk değeri oluşturulur ve genetik operasyonlar bu uygunluk değerleri üzerinden yürütülür. Buradaki amaç minimum enerjiyi bulmak olduğu için, küçük enerjili bireylerin uygunluk değeri büyük, büyük enerjili bireylerin uygunluk değeri ise küçük olmalıdır.

4.1. Kopyalama

Bu operasyonda amaç, yeni nesilleri üretmektir. Bunun için, her bir bireyin uygunluklarına bakılır ve uygunlukları küçük olan bireyler elenirken büyük olan bireyler hayatta kalarak yeni nesle aktarılır. Tüm bu olaylar, bir rastgelelik çerçevesinde gelişir. Buradaki amaç, daha öncede belirtildiği gibi enerjiyi minimize etmektir. Dolayısıyla, küçük enerjilere karşılık gelen bireylerin yaşama şansının daha büyük, büyük enerjilere karşılık gelen bireylerin yaşama şansının daha az olması için

$$F_i = \exp\left(-\beta\left(E_i - |E_{ort}|\right)\right) \qquad (i=1,2,3...,N_{pop}) \qquad (4.3)$$

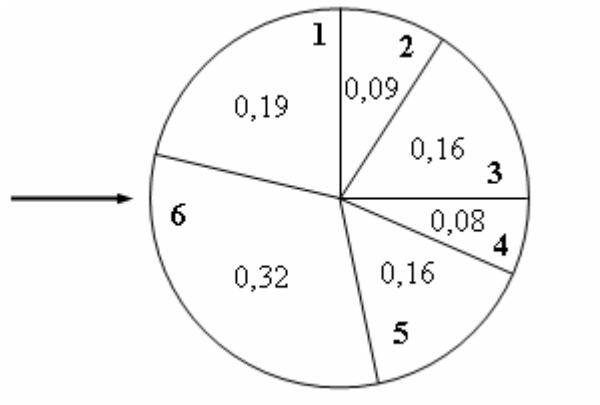
şeklinde bir dönüşüm yapılabilir. Burada β bir sabit, E_i, her bir bireyin enerji özdeğeri, E_{ort} ise tüm enerji özdeğerlerinin aritmetik ortalamasıdır. Bu dönüşümden sonra F_i değeri büyük olan bireyler daha çok önem kazanmaktadır. Bu F_i değerleriyle her bir bireyin uygunluk değeri oluşturulur. Bunun için,

$$\mu_i = \frac{F_i}{\sum_{i=1}^{Npop} F_i} \qquad (4.4)$$

şeklinde bir ifade kullanılır. Böylece her bir bireyin, mevcut topluluk içerisindeki yaşama olasılığı belirlenmiş olur. Yani, μ_i değeri büyük olan bireyin yeni popülasyona aktarılma olasılığı daha büyük, küçük olan bireyin yaşama şansı daha küçüktür. Bunun için bir seçim işlemi yapılır. Seçim işlemini gerçekleştirmek için bir çok farklı yöntem mevcuttur (Goldberg 1999, Coley 2001). Aşağıda rulet çarkıyla gerçekleştirilen seçim işlemi anlatılacaktır.

4.1.1. Rulet Çarkı

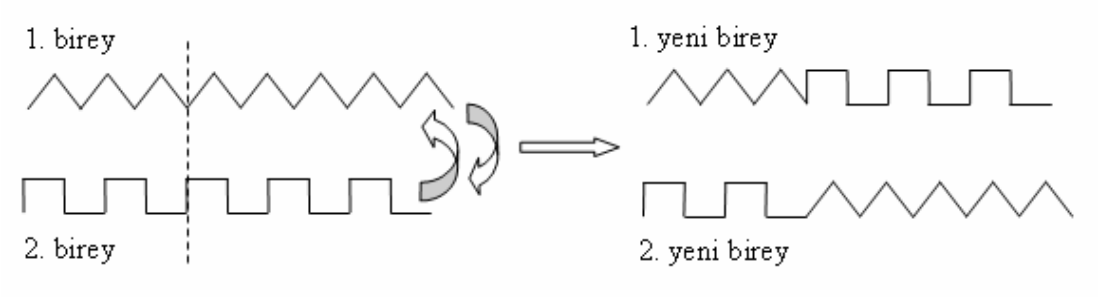
Mevcut populasyondan, yeni bir nesil elde etmek için kullanılan seçim araçlarından biridir. Bir rulet çarkıyla seçim yapmak için, öncelikle (4.4) denkleminden elde edilen uygunluk değerleri kullanılarak bir rulet çarkı oluşturulur. Şekil 4.1'de böyle bir rulet çarkı şematik olarak görülmektedir. Her bir dilimdeki 1'den 6'ya kadar olan rakamlar birey numarasını, diğer rakamlar da bu bireylerin uygunluk değerini göstersin. Bu rulet çarkı döndürülüp durması beklenilir. Durduğu anda okun, en büyük uygunluk değerine sahip olan dilimi gösterme ihtimali en fazladır. Bununla birlikte uygunluk değeri en küçük olan değeri de gösterebilir ki bu ihtimal de istatistiksel olarak mevcuttur. Bu şekilde popülasyon sayısı kadar çevrilen rulet çarkıyla yeni neslin bireyleri seçilmiş olur. Elde edilen bu yeni nesil üzerinde diğer genetik operasyonlar uygulanır.



Şekil 4.1. Rulet çarkının şematik gösterimi

4.2. Çaprazlama

Doğadaki gerçekleşen biyolojik süreçte çaprazlama, iki kromozomun genlerini birbirleriyle değiştirmelerini sağlayan bir işlem olarak tanımlanabilir. Bu işlemde amaç mevcut popülasyonun bireyleri kullanılarak, yeni nesil için daha iyi bireyler elde etmektir. Bunun için, Şekil 4.2'de şematik olarak gösterildiği gibi, popülasyon içinden rastgele iki birey seçilir. Daha sonra seçilen bu iki birey yine rastgele belirlenen noktalardan kesilerek birbirleriyle yer değiştirilir. Böylece iki yeni birey elde edilmiş olur. Elde edilen bu iki yeni birey, farklı oranlarda hem birinci bireyin, hem de ikinci bireyin bilgilerini taşımaktadır. Şekil 4.2'de gösterilen ve rastgele belirlenen kesilme noktası bir yerden olacağı gibi aynı anda birden fazla yerden de olabilir.



Şekil 4.2. Çaprazlama operasyonunun şematik gösterimi

Parametre eniyilemesinde çaprazlama operasyonu, genelde parametrelerin sayısal değerlerine karşılık gelen ikilik kodları üzerinden yapılır. Tekli ve ikili kesim noktaları kullanılarak yapılmış böyle bir çaprazlama aşağıdaki gibi gösterilebilir.

1. birey 0 0 0 | **0 1 0 1 1** = 11 ⟹ 0 0 0 **1 0 1 0 1** = 21 1. yeni birey

2. birey 0 1 0 | **1 0 1 0 1** = 85 0 1 0 **0 1 0 1 1** = 75 2. yeni birey

1. birey 0 0 0 | **0 1** | 0 1 1 = 11 ⟹ 0 0 0 **1 0** 0 1 1 = 19 1. yeni birey

2. birey 0 1 0 | **1 0** | 1 0 1 = 85 0 1 0 **0 1** 1 0 1 = 77 2. yeni birey

Dalga fonksiyonu eniyilemesinde ise çaprazlama operasyonunda, ikilik kodlarla çalışmak yerine, direkt olarak dalga fonksiyonunu oluşturan sayısal değerlerle çalışılması çok daha kolay olur.

Rastgele seçilmiş $\psi_1(x)$ ve $\psi_2(x)$ gibi iki dalga fonksiyonunu göz önüne alalım. Eğer bu dalga fonksiyonlarını kendi aralarında çaprazlayıp yeni iki dalga fonksiyonu elde etmek istiyorsak

$$\psi_1'(x) = \psi_1(x)St(x) + \psi_2(x)(1 - St(x))$$
$$\psi_2'(x) = \psi_2(x)St(x) + \psi_1(x)(1 - St(x)) \qquad (4.5)$$

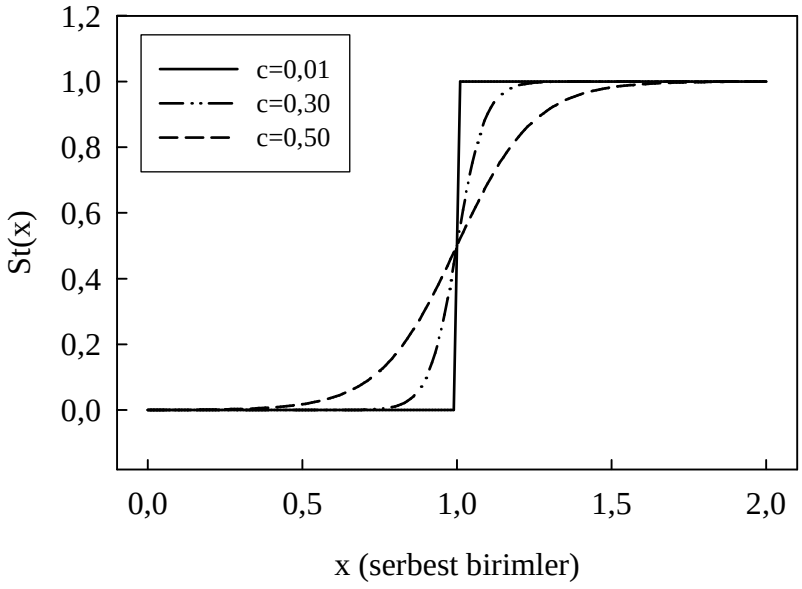
işlemini yapmamız gerekir. Böylece her iki dalga fonksiyonundan da bilgiler taşıyan iki tane yeni dalga fonksiyonu elde edilmiş olur. Burada dikkat edilirse dalga fonksiyonunun her birinden belirli ağırlıkta alınıp, birbirleri üzerine bu ağırlıklarla ekleniyor. Bu yüzden, bu şekilde çaprazlama yaparken çok dikkatli olmak gerekir. Yani St(x) niceliğinin biçimi çok önemlidir. Çünkü, çok keskin yapılabilecek bir çaprazlama, dalga fonksiyonunun türevinde süreksizliklere neden olabilir ki böyle bir durum kuantum mekaniğinin varsayımlarına aykırı bir durumdur ve yanlış çözümlere götürebilir. Bunun önüne geçmek için farklı çaprazlama teknikleri kullanılabilir. Bu çalışmada, St(x) için kullanılan çaprazlama fonksiyonu

$$St(x) = \frac{1}{2}\left[1 + \tanh\left(\frac{x - x_0}{c^2}\right)\right] \qquad (4.6)$$

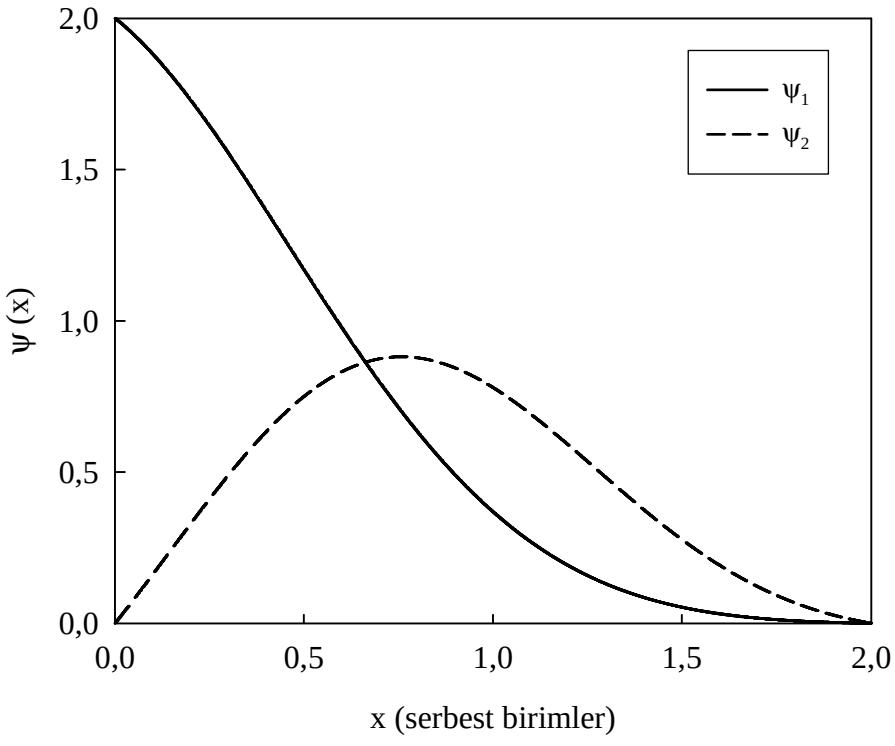
şeklinde yumuşak geçişli bir basamak fonksiyonudur (Gutowski 1994, Grigorenko ve Garcia 1999). Burada x_0 sistemin sınırları aralığından seçilen rastgele bir sayı, c ise basamak fonksiyonunun keskinliğini belirleyen bir sayıdır. Şekil 4.3'te görüldüğü gibi c sayısı küçüldükçe keskinlik artmakta, büyüdükçe azalmakta ve yumuşak bir geçiş olmaktadır.

Diğer bir yöntem ise çaprazlama operasyonunu gerçekleştirmek için St değerini (0-1) aralığında rastgele bir sayı olarak seçmektir. Bu şekilde gerçekleştirilen çaprazlamada yumuşak geçişli bir çaprazlama olmaktadır ve elde

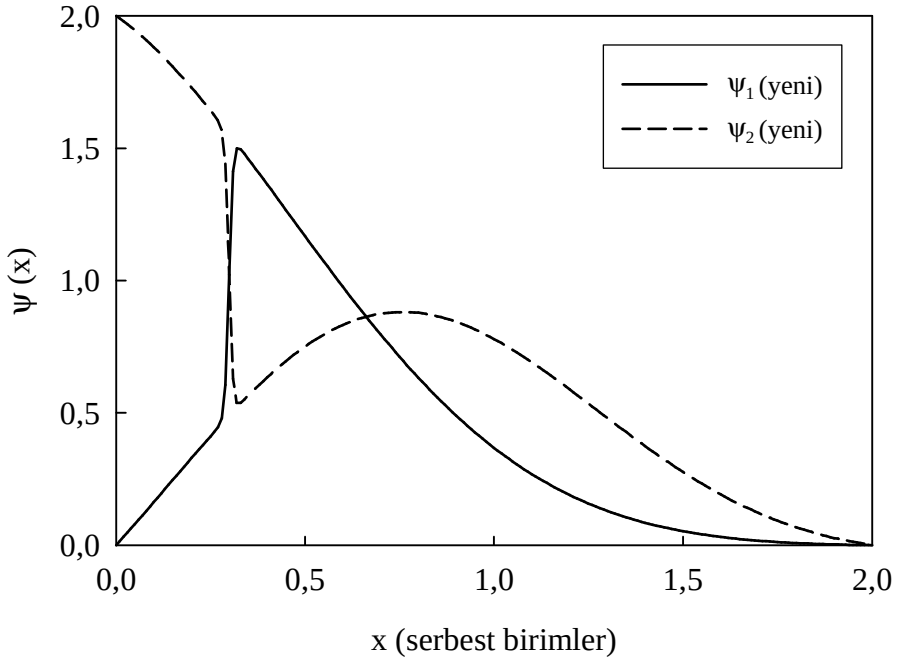
edilen dalga fonksiyonunun türevinde herhangi bir süreksizlik meydana gelmemektedir. Şekil 4.4'te rastgele oluşturulmuş iki dalga fonksiyonu, Şekil 4.5 ve 4.6'da da keskin ve yumuşatılmış bir geçişle yapılmış çaprazlama operasyonu sonucu elde edilen yeni nesil dalga fonksiyonları görülmektedir.



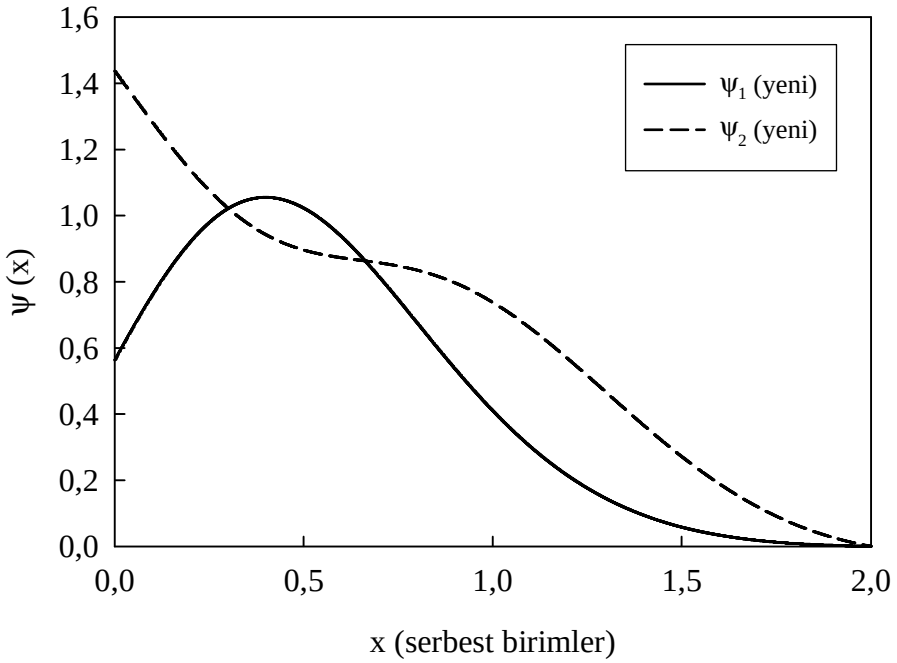
Şekil 4.3. Farklı keskinliklere sahip basamak fonksiyonları



Şekil 4.4. Rastgele seçilmiş iki dalga fonksiyonu



Şekil 4.5. Basamak fonksiyonunda c=0,1 kullanılarak yapılmış bir çaprazlama



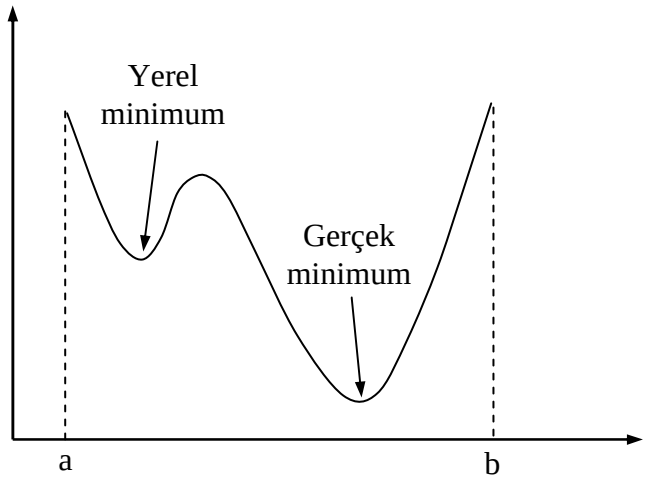
Şekil 4.6. Basamak fonksiyonunda c=0,8 kullanılarak yapılmış bir çaprazlama

Görüldüğü gibi, Şekil 4.5'te çaprazlama sonucu elde edilen yeni dalga fonksiyonları sürekli olmasına rağmen, türevlerinde süreksizlik mevcuttur ve bu

durum kuantum mekaniği varsayımlarına aykırı bir durumdur. Bazı durumlarda sadece bir çaprazlama fonksiyonu yerine birden fazla çaprazlama fonksiyonu da kullanılabilir. Bu durumda hangi fonksiyonla çaprazlama yapılacağı yine rastgele belirlenir.

4.3. Mutasyon

Ele alınan problemin çözümü yapılırken, Şekil 4.7'de gösterildiği gibi yöntem yerel bir minimuma düşmüş olabilir. İkilik kodlara tekrar dönersek, örneğin sekiz haneli bir kodlama sisteminde, rastgele üretilmiş bir başlangıç popülasyonunun hepsinin de ilk hanesi sıfır olması durumu söz konusu olabilir. Böyle bir durumda bu popülasyondan sadece çaprazlama operasyonu ile ilk hanesi 1 olan bir birey elde etmek mümkün değildir. Yani böyle bir popülasyondan elde edilebilecek en büyük sayı 01111111=127'dir. Oysa sekiz haneli bir ikilik kodlamadan elde edilmesi gereken en büyük sayı 11111111=255'tir. Böyle bir yerel minimumdan çıkmak için mutasyon operasyonu kullanılır. Mutasyon operasyonu, çaprazlamadan farklı olarak iki farklı birey yerine, tek bir birey üzerinde gerçekleştirilen bir operasyondur. Bu operasyonun ikilik kodlamadaki karşılığı, değeri 1 olan bir kromozomu 0, değeri 0 olan bir kromozomu ise 1 yapmaktır.

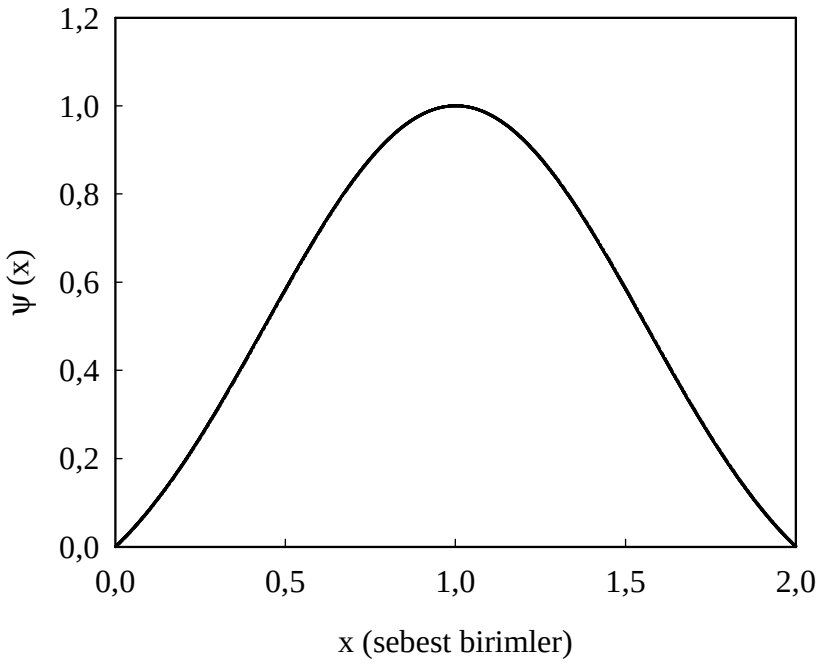


Şekil 4.7. Yerel minimum ve gerçek minimum

Dalga fonksiyonu eniyilemesinde ise mutasyon operasyonu parametre eniyilemesindekinden oldukça farklıdır. Dalga fonksiyonuna mutasyon operasyonu uygulanırken yine dikkatli olmak gerekir. Çok şiddetli bir mutasyon uygulamak dalga fonksiyonunda istenmeyen kırıklıklara, ya da yanlış çözümlere neden olabilir. Böyle bir durumun önüne geçmek için Gauss fonksiyonu kullanılabilir (Grigorenko ve Garcia 1999). A, uygulanacak mutasyonun şiddeti olmak üzere

$$F_M(x) = A \exp\left(\frac{-(x - x_0)^2}{\delta^2} \right) \tag{4.7}$$

şeklinde bir mutasyon fonksiyonu tanımlanabilir. Burada x_0 ve δ problemin tanım aralığında rastgele bir sayıdır. Yalnız, özellikle δ değeri çok küçük olmayacak şekilde seçilmelidir. Bu değer mutasyon fonksiyonunun genişliğini belirlediği için, çok küçük olması durumunda çok sivri bir uç vermektedir.

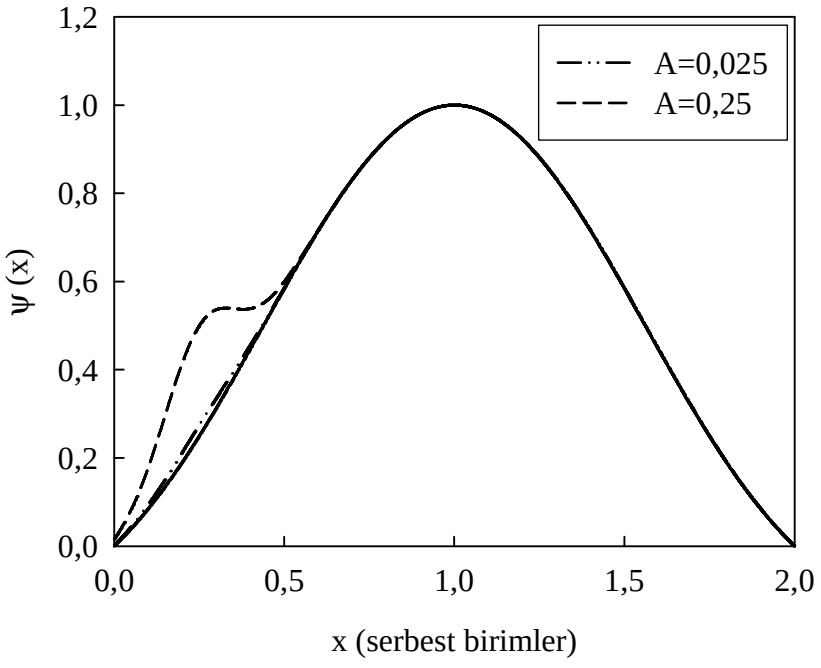


Şekil 4.8. Rastgele oluşturulmuş herhangi bir dalga

Eğer rastgele seçilmiş bir ψ_1 dalga fonksiyonu alınıp mutasyon uygulanırsa,

$$\psi_1'(x) = \psi_1(x) + F_M(x) \tag{4.8}$$

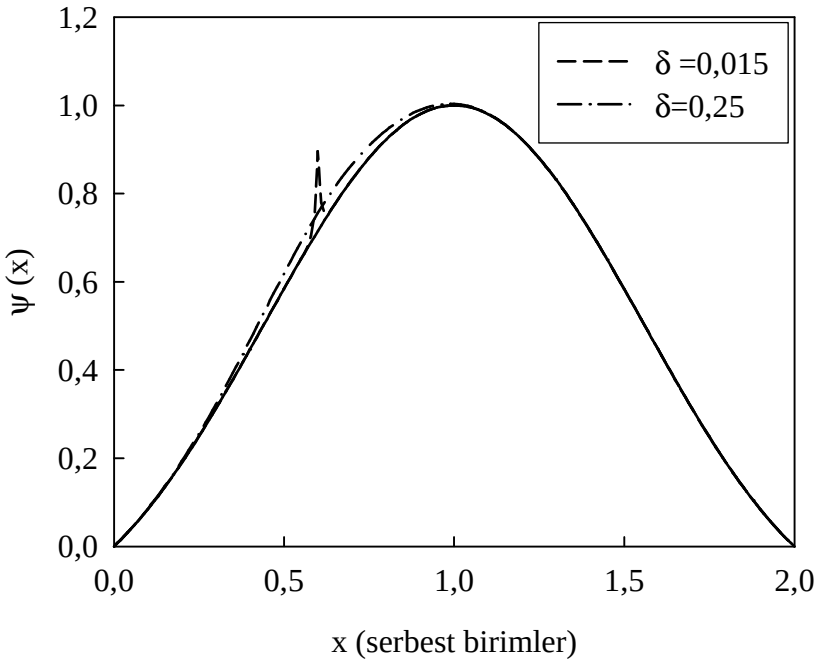
şeklinde yeni bir dalga fonksiyonu elde edilir. Şekil 4.8' de gösterilen ve sonsuz derin bir kuantum kuyusundaki elektrona eşlik eden Gauss benzeri bir dalga fonksiyonunu göz önüne alalım. Böyle bir fonksiyona, Denk. (4.7)'deki fonksiyonu kullanarak mutasyon uygularsak Şekil 4.9 ve 4.10'daki yeni dalga fonksiyonları elde edilir. Şekil 4.9'da mutasyon şiddetinin etkisi açık bir şekilde görülmektedir. Görüldüğü gibi, mutasyon şiddeti A=0,025 iken dalga fonksiyonunun formunda çok ciddi bir değişiklik olmamaktadır. Elde edilen dalga fonksiyonu yine sonsuz derin potansiyel kuyusundaki bir parçacığın taban durum dalga fonksiyonu karakterine sahiptir. Mutasyon şiddeti A=0,25 iken elde edilen dalga fonksiyonunda ve türevinde herhangi bir süreksizlik olmamakla birlikte, sonsuz derin potansiyel kuyusundaki bir parçacığın taban durum dalga fonksiyonu özelliğini yansıtmamaktadır. Dolayısıyla elde edilen dalga fonksiyonu bizim gerçek çözümümüz değildir.



Şekil 4.9. Mutasyon şiddetinin dalga fonksiyonu üzerindeki etkisi.

Şekil 4.10 ise daha farklı bir durumu yani δ değerinin küçük olması durumunu yansıtmaktadır. Burada küçük δ değerinin etkisinin daha iyi görülmesi için şiddet biraz büyütüldü. Görüldüğü gibi, küçük δ değerinde, mutasyondan sonra elde edilen dalga fonksiyonu böyle bir sistemin taban durum dalga fonksiyonunu karakterize etmemekte ve daha da önemlisi, dalga fonksiyonunun türevinde süreksizlik meydana gelmektedir.

Bunlara ilaveten herhangi bir fonksiyon kullanmaksızın çok küçük bir sayı eklenmesi şeklinde sabit şiddetli mutasyonlar ya da iterasyonlar artarken şiddeti azalan değişken şiddetli mutasyonlar da kullanılmaktadır (Saha ve ark. 2001).



Şekil 4.10. δ değerinin dalga fonksiyonu üzerindeki etkisi.

5. GENETİK ALGORİTMA ve YOĞUNLUK FONKSİYONELLERİ KULLANILARAK BEC'İN İNCELENMESİ

5.1 Yoğunluk Fonksiyonelleri Kullanılarak BEC'in İncelenmesi

Yoğunluk Fonksiyonelleri Teorisi (DFT)'nin ana fikri çok parçacıklı Schrödinger denklemi yerine, temel seviyenin yoğunluğunun bir denkleminin kullanılmasıdır.

$$\frac{\delta F}{\delta \rho(r)} + V_{ext}(r) = 0 \tag{5.1}$$

Burada F parçacıklar arası etkileşme potansiyeli tarafından tanımlanan ve dış potansiyelden bağımsız olan

$$\frac{\delta F}{\delta V_{ext}(r)} = 0 \tag{5.2}$$

yoğuşmanın yoğunluğuna bağlı eşsiz bir fonksiyoneldir. Denklem 5.1 ufak bir değişiklikle

$$\frac{\delta \bar{F}}{\delta \rho(r)} = 0 \tag{5.3}$$

şeklinde yazılabilir. Burada

$$\bar{F} = F + \int V_{ext} \rho d^3 r \tag{5.4}$$

ve

$$\rho = \sum_i n_i |\psi_i|^2 \tag{5.5}$$

dir. Denklem 5.3'ün çözümü sonucu temel seviyenin yoğunluğu ρ_0 olarak bulunursa temel seviyenin enerji ifadesi,

$$E = \bar{F}\left(\rho_0(r)\right) = F\left(\rho_0(r)\right) + \int \rho_0(r) V_{ext}(r)\, d^3r \tag{5.6}$$

şeklinde tanımlanır (Guilherme 1999). DFT teorisinde, çok parçacıklı Schrödinger denkleminin çözümü ve çok parçacıklı dalga fonksiyonundan yoğunluğu bulunması gibi zor işlemler bypass edilerek direk çok parçacıklı sistemin yoğunluğu denklem 5.3'den çözülmektedir. F fonksiyonelinin Boson sistemleri için de var olduğunu, fermi sistemleri için yapılan ispat yöntemine benzer şekilde bir yöntem kullanarak ispatlayabiliriz. F fonksiyonelinin varlığını kolayca gösterebilmemize rağmen F fonksiyonelini tam olarak tanımlayamıyoruz. Bundan ötürü gerçek F fonksiyonelini çözmek yerine yaklaşık bir Fonksiyoneli çözmek zorunda kalırız.

İşe etkileşmeyen bir atom gazıyla başlarsak F fonksiyoneli basitçe

$$F = \int -\frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{\rho} \nabla^2 \sqrt{\rho}\, d^3r \tag{5.7}$$

şeklinde yazılabilir. Dış potansiyeli de işin içine katarsak

$$\bar{F} = \int -\frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{\rho} \nabla^2 \sqrt{\rho}\, d^3r + \int V_{ext} \rho\, d^3r \tag{5.8}$$

elde ederiz. Yerel yoğunluk yaklaşımı altında, Denk. (5.7) ile verilen etkileşmeyen parçacıkların fonksiyoneline etkileşmeden sorumlu bir ifade eklersek

$$F = \int -\frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{\rho} \nabla^2 \sqrt{\rho}\, d^3r + \int \varepsilon(\rho) \rho\, d^3r \tag{5.9}$$

olur. Burada

$$\varepsilon(\rho) = \frac{E(\rho)}{N}$$

Homojen bir sistem için parçacık başına düşen temel enerjidir. Yerel yoğunluk yaklaşımı altında toplam fonksiyonel

$$\bar{F} = \int -\frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{\rho}\nabla^2\sqrt{\rho}d^3r + \int \varepsilon(\rho)\rho d^3r + \int V_{ext}\rho d^3r \qquad (5.10)$$

olur. Buradan temel seviyenin enerji ifadesi ise kolaylıkla

$$E = \int -\frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{\rho}\nabla^2\sqrt{\rho}d^3r + \int \varepsilon(\rho)\rho d^3r + \int V_{ext}\rho d^3r \qquad (5.11)$$

yazılır.

Şimdi bozonlar arası etkileşmeyi ifade eden $\varepsilon(\rho)$'nun açık ifadesi veren Huang-Yang'ın teorisi ile ilgilenelim (Huang ve Yang 1957). Bu teoride ε küçük bir parametre olan ρa^3' cinsinden seriye açılıyor. Buradaki *a* ise atomlar arası şiddetli itici potansiyelin saçılma uzunluğudur. $\varepsilon(\rho)$'nun açık ifadesi ise

$$\varepsilon \equiv \frac{E}{N} = \frac{2\pi\hbar^2 a}{m}\rho\left[1 + \left(128/15\sqrt{\pi}\right)\sqrt{\rho a^3} + \cdots\right] \qquad (5.12)$$

Şeklindedir (Wu 1959). Biz bu çalışmada yüksek dereceden terimleri ihmal ettik. Denklem 5.12'i yeniden düzenlersek

$$\varepsilon = \frac{2\pi\hbar^2 a}{m}\rho\left[1 + g\left(\rho a^3\right)\right] \qquad (5.13)$$

biçiminde ifade edebiliriz. Bu ifade Denklem 5.11'de yerine konursa ve küresel harmonik bir tuzak için harmonik osilatör boyutuna geçiş yapılırsa

$$E = -\frac{N}{2}\int \psi\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial \psi}{\partial r}\right)\right]d^3r + \int 2\pi\rho^2\left(a/l_\omega\right)\left[1 + g\left(\rho\left(a/l_\omega\right)^3\right)\right]d^3r + \int \frac{1}{2}r^2\rho d^3r \qquad (5.14)$$

N parçacıklı küresel harmonik bir tuzak ile tuzaklanmış bozon sisteminin toplam enerjisini $\hbar\omega$ cinsinden veren ifadeye ulaşılmış olur. Bu ifadede $l_\omega = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$'ya eşittir.

Biz bu çalışmada Denk. (5.14) ile verilen Toplam enerji ifadesinin, temel seviye enerjisini veren gerçek temel seviye yoğunluk profilini arıyoruz. Bunun için ise varyasyon temelli yaklaşım altında Genetik Algoritmayı kullanacağız.

5.2 Genetik Algoritma

İlk önce 100 adet bireyden oluşan ilk popülasyon yani 100 adet rasgele yoğunluk profili oluşturulur. Daha sonra Denk. (5.14) ile bu profillere karşılık gelen enerji öz değerleri hesaplanır. Burada yapmak istediğimiz Denk. (5.14) ile verilen enerji ifadesini minimize eden gerçek temel seviye yoğunluk profilini bulmaktır. Bunun içinde enerji değeri küçük çıkan yoğunluk fonksiyonları bizim için oldukça değerlidir. Bu yüzden enerji değeri küçük olan bireylerin diğer popülasyona daha çok aktarılmasını istiyoruz. Denk. (4.3) ile verilen ifade kullanılarak önce her bir bireyin yaşama şansı elde edilir. Daha sonra ise Denk. (4.4) ile bu yaşama şansları kullanılarak her bir bireyin uygunluğu elde edilir. En son olarak ise bu uygunluk değerleri kullanılarak yeni nesil oluşturulur. Bunun için Şekil 4.1'de görüldüğü gibi bir rulet çarkı kullanılabilir.

Kopyalama yöntemi ile yeni elde edilen bireyler üzerinde ise popülasyonu zenginleştirmek için çaprazlama ve mutasyon işlemleri uygulanır. Burada Denk. (4.5)'i kullanarak direk yoğunluk fonksiyonları üzerinden çaprazlama yaparız. Denk. (4.5)' deki çaprazlama fonksiyonunun açık ifadesi de Denk. (4.6) ile verilmektedir. Son olarak ise Denk. (4.7) ile tanımlanan mutasyon fonksiyonunu kullanarak. Denk. (4.8) de gösterildiği gibi yoğunluk fonksiyonları üzerine mutasyon fonksiyonu uygulanır. Bütün bu işlemlerden sonra elimizde yeni nesil yoğunluk fonksiyonları popülasyonu oluşur. Bu yeni nesil ile Denk. (5.14)'deki enerji ifadesi kullanılarak tekrar bütün işlemler bu yeni nesil üzerinden uygulanarak bir sonraki nesil elde edilir. Ta ki yeterince sonuca yaklaşılana dek bütün bu işlemler her nesil için tekrarlanır.

6. SONUÇLAR ve TARTIŞMA

Bir önceki bölümde BEC'nın DFT ve Genetik Algoritma kullanılarak temel seviye enerjisinin ve yoğunluk profilinin nasıl bulunabileceği hakkında bir algoritma sunulmuştu. Bu algoritma kullanılarak herhangi bir dilde yazılacak olan kaynak kod ile gerekli hesaplamalar kolayca yapılabilir. Bu bölümde önerilen yöntemin bir uygulaması olarak bir BEC sisteminin hem Gross-Pitaevskii teorisi hem de DFT teorisi ile verilen tanımlamaları için hesaplamalar yapılmıştır. Yerel yoğunluk yaklaşımı çerçevesinde birinci mertebeden düzeltmeyi içeren DFT teorisinin, ortalama alan teorisinden elde edilebilen Gross-Pitaevskii denkleminden elde edilen sonuçları nasıl değiştirdiğini inceledik.

Harmonik bir tuzakta farklı sayılarda boson bulunması durumu için yapmış olduğumuz hesaplamalardan elde etmiş olduğumuz tuzak içerisindeki boson yoğunluğu dağılımları hem GP hem de DFT için karşılaştırmalı olarak Şekil 6.1' de verilmiştir. a, b ve c panelleri sırasıyla N= $2x10^6$, $2x10^7$ ve $2x10^8$ değerlerine karşılık gelmektedir. Kesikli çizgiler GP sonuçlarını sürekli çizgiler ise DFT sonuçlarını göstermektedir.

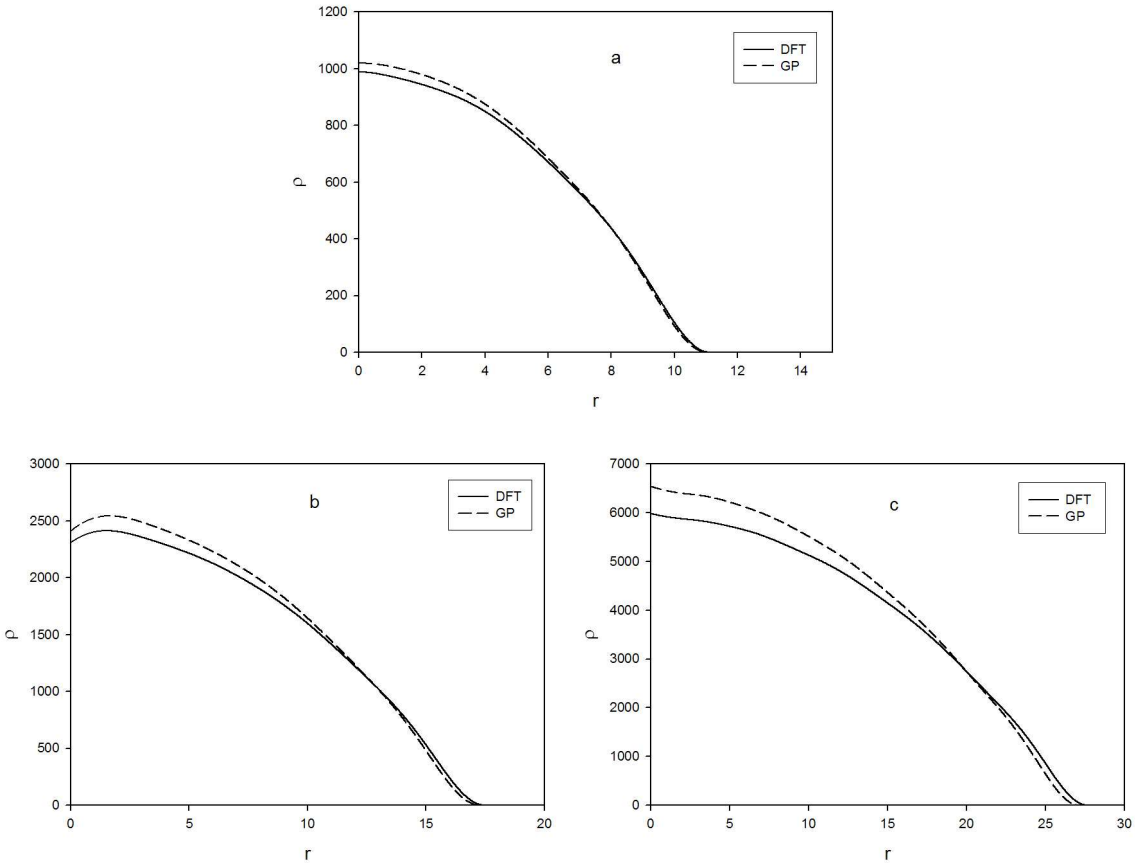
Şekil 6.1' den de görüldüğü gibi DFT teorisinde bir yüksek mertebeden terimin göz önüne alınması parçacıklar arasındaki itici etkileşmelerin daha artmasına sebep olmaktadır. Bunun sonucunda, parçacık yoğunluğu iç bölgelerde azalırken dış bölgelerde bir artış göstermektedir. Ancak Şekil 6.1 deki farklı panellerin karşılaştırılmasından da görüleceği gibi yoğunlukta gözlenen bu değişimler sadece yüksek parçacık sayılarında belirgin olmaktadır.

Şekil 6.2 de tuzakta bulunan bozonlar için parçacık başına düşen ortalama enerji tuzakta bulunan parçacık sayısına karşılık çizilmiştir. Kesikli çizgi GP sonuçlarını sürekli çizgi ise DFT sonuçlarını göstermektedir. Şekilden de görüldüğü gibi DFT teorisinde birinci mertebeden düzeltme teriminin göz önüne alınması yüksek parçacık sayılarında toplam enerjiyi yaklaşık %5 oranında artırmaktadır.

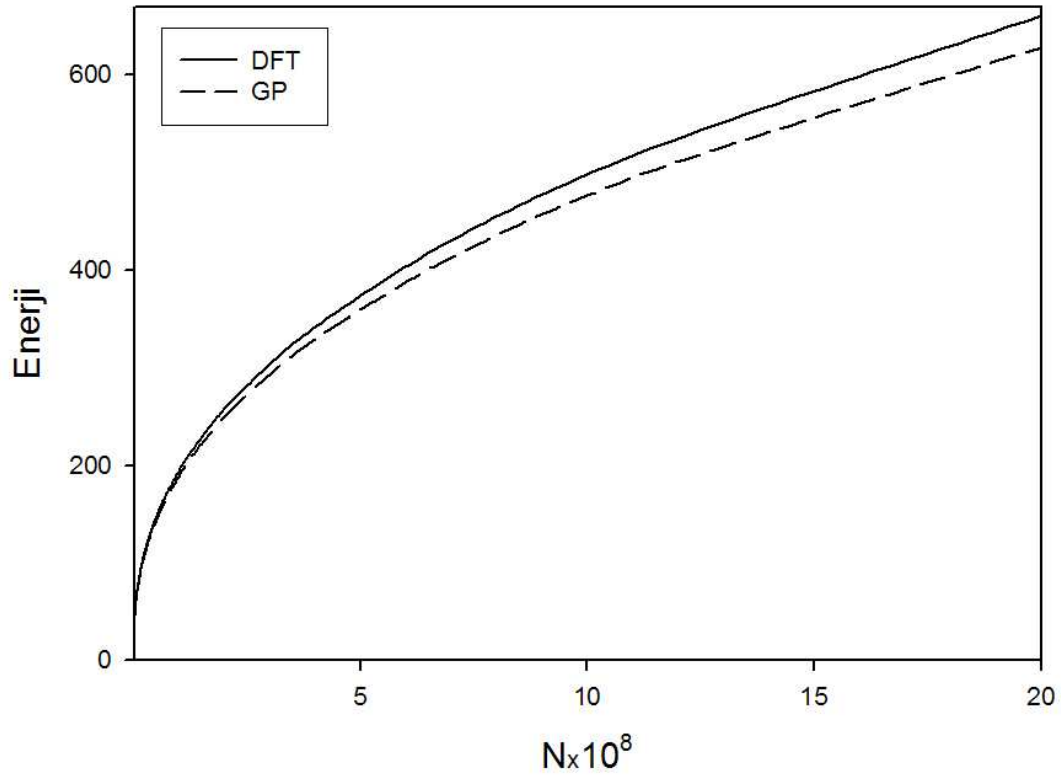
Bozonların tuzak merkezinden olan uzaklıklarının karelerinin ortalaması harmonik bir tuzakta bulunan bozonların oluşturduğu bulutun uzayda kapladığı

bölgenin ortalama büyüklüğünü tanımlamak için önemli bir parametredir. Bu niceliğin tuzakta farklı sayılarda bozon bulunması halinde parçacık sayısına karşılık çizimleri Şekil 6.3 te verilmiştir. Kesikli çizgi GP sonuçlarını sürekli çizgi ise DFT sonuçlarını göstermektedir. Yukarıda yapılan tartışmalar burada elde edilen sonuçlar içinde hemen hemen aynıdır. Parçacıklar arası itmenin katkısı bozonların tuzakta daha dış bölgelere doğru dağılmasına sebep olmakta böylece merkezden olan uzaklıkların karelerinin ortalaması artmaktadır.

Bu hesaplamalar sonucu elde edilen temel seviye enerji değerleri ve enerji değerlerine karşılık gelen yoğunluk profilleri yoğuşmanın pek çok diğer fiziksel özelliklerini hesaplamada da kullanılabilir.



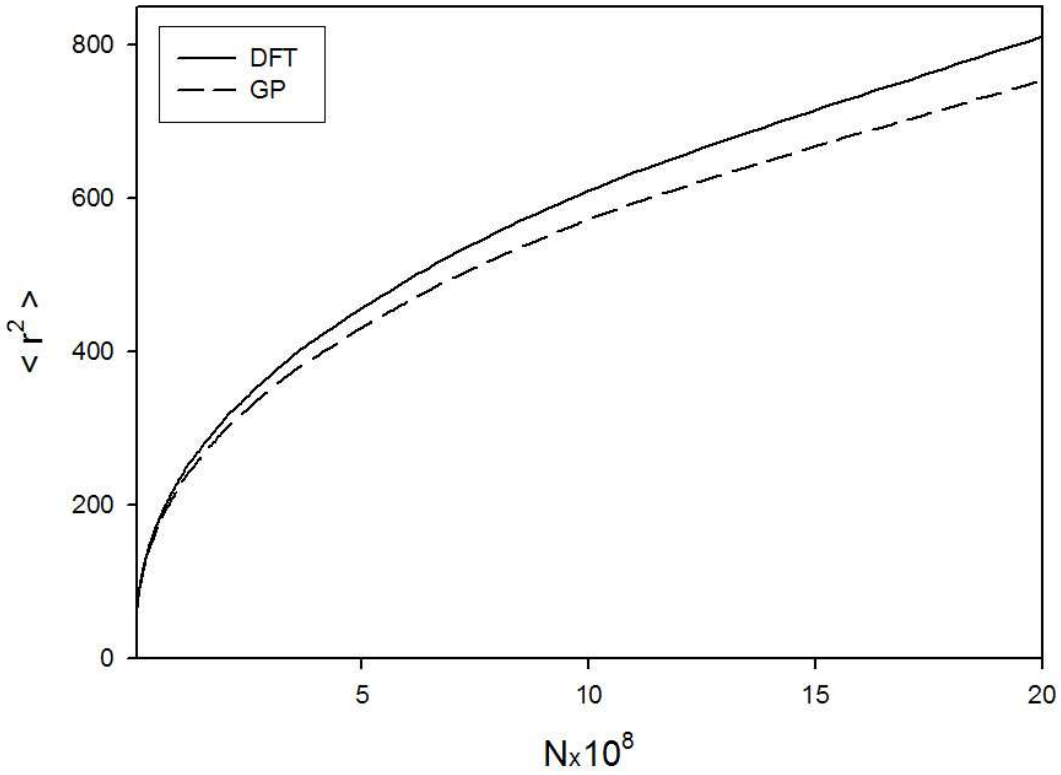
Şekil 6.1 BEC'sının yoğunluk profilinin r'ye göre grafikleri. a, b ve c panelleri sırasıyla N parçacık sayısının $2x10^6$, $2x10^7$ ve $2x10^8$ değerlerine karşılık gelmektedir. Burada r $\sqrt{\hbar/m\omega}$ harmonik osilatörler birimleri cinsinden verilmektedir. Kesikli çizgiler GP sonuçlarını sürekli çizgiler ise DFT sonuçlarını göstermektedir.



Şekil 6.2 BEC'ın yoğuşmasının temel seviye yoğunluk profilinin parçacık başına düşen enerjisinin parçacık sayısına göre grafiği. Kesikli çizgi GP çözümlerini, sürekli çizgi ise DFT çözümlerini göstermektedir. Burada enerji $\hbar\omega$ cinsinden verilmektedir.

Bu çalışmada BEC, DFT ve Genetik Algoritma incelenerek. Bose-Einstein yoğuşmasını incelerken DFT ve Genetik Algoritmadan nasıl yararlanılabileceği gösterilmiş ve bunun için bir algoritma geliştirilmiştir. Geliştirilen algoritma örnek bir probleme uygulanarak, GP yaklaşımı yerine DFT'nin kullanılmasının sonuçları nasıl değiştirdiği tartışılmıştır.

Özellikle son yıllarda, Feshbach rezonansı olarak bilinen bir etkiden yararlanılarak parçacıklar arası etkileşimlerin çok şiddetli olduğu, Bose Einstein yoğuşmasına uğramış sistemler elde edilebilmektedir (Pethick, C. J., Smith, H. 2001). GP yaklaşımının geçerliliğini kaybettiği bu durumlarda DFT yaklaşımının kullanılması zorunlu hale gelecektir. Bu sebeple, bu tezde sunulan yaklaşımın, ileride bu konuda yapılacak çalışmalara yardımcı olacağını düşünüyoruz.



Şekil 6.3 r^2' nin beklenen değerinin tuzakdaki parçacık sayısına göre grafiği. Burada uzunluk birimi olarak yine $\sqrt{\hbar/m\omega}$ kullanılmıştır. Kesikli çizgi GP sonuçlarını sürekli çizgi ise DFT sonuçlarını göstermektedir.

KAYNAKLAR

Anderson, M. H., Ensher J. R., Matthews M. R., Wieman C. E., and Cornell, E. A. 1995. Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor. Science **269**, 198-201

Andrews, M. R., Kurn, D. M., Miesner, H. J., Durfee, D. S., Townsend, C. G., Inouye, S. and Ketterle, W. 1997. Observation of interference between two Bose condensates Science **275**, 637

Argaman, N., Makov, G. 2000 Density functional theory: An introduction. American Journal of Physics 68: 69-79.

Aydın, E., Yıldırım, R. 2004 Optimizing the performance of single-mode laser diode system using genetic algorithm. Optics and Lasers in Engineering 42: 41-46.

Bardeen, J., Cooper, L. N. and Schrieffer, J. R. 1957. Theory of Superconductivity. Phys. Rev. **108**, 1175

Bose, S. N. 1924. Z. Phys. **26**, 178

Bradley, C. C., Sackett C. A. and Hulet, R. G. 1995. Evidence of Bose-Einstein Condensation in an atomic gas with attractive interactions. Phys. Rev. Lett. **75**, 1687.

Bransden, B. H., Joachin, C. J. 2000 Quantum Mechanics Prentice Hall, Harlow.

Brunetti, A. 2000 A fast and precise genetic algorithm for a non-linear fitting problem. Computer Physics Communications 124: 204-211.

Burke, K. and friends 2003. The ABC of DFT. http://dft.rutgers.edu/kieron/beta

Castro, C. F., António, C. A. C., Sousa, L. C. 2004 Optimisation of shape and process parameters in metal forging using genetic algorithms. Journal of Materials Processing Technology 146: 356-364.

Ceperley, D. M. 1978 Ground state of the fermion one-component plasma: A Monte Carlo study in two and three dimensions. Physical Review B 18: 3126-3138.

Ceperley, D. M., Alder, B. J. 1980 Ground state of electron gas by a stochastic method. Physical Review Letters 45: 566-569.

Chaudhury, P., Bhattacharyya, S. P. 1998 Numerical solutions of the Schrödinger equation directly or perturbatively by a genetic algorithm: test cases. Chemical Physics Letters 296: 51-60.

Chu, S. 1991. Laser Manipulation of Atoms & Particles. Science **253**, 361

Cohen-Tannoudji, C. and Philips, W. D. 1990. New mechanism for laser cooling. Physics Today 33

Coley, D. A. 2001 *An Introduction to Genetic Algorithms for Scientists and Engineers.* World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. Singapore.

Cornell, E. A., Wiemann, C. E. 2002. Nobel Lecture: Bose-Einstein Condensation in a dilute gas, the first 70 years and some recent experiments. Rev. Mod. Phys. **74**, 875

Dalfovo, F. Giorgini S., Pitaevskii L. and Stringari, S. 1999. Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases. Rev. Mod. Phys. **71**, 463

Davis, K. B., Mewes M. D., Andrews M. R., van Druten N. J., Durfee D. S., Kurn D. M. and Ketterle, W. 1995. Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms. Phys. Rev. Lett. **75**, 3969

Dobson, J. F. 1999 Electron density functional theory. International Journal of Modern Physics B 13: 511-523.

Einstein, A. 1924. Sitzber. Kgl. Preuss. Akad. Wiss. 261

Einstein, A. 1925. Sitzber. Kgl. Preuss. Akad. Wiss. 3.

Goldberg, D. E. 1999 Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning. Addison Wesley Longman, Inc. Reading, MA.

Greiner, W. 2001 Quantum Mechanics. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg.

Grigorenko, I., Garcia M. E., 2000 An evolutionary algorithm to calculate the ground state of a quantum system. Physica A 284: 131-139.

Gross, E. P. 1961. Structure of a quantized vortex in boson systems. Nuovo Cimento **20**, 454.

Guilherme, S. N. 1999. Density functional theory of the inhomogeneous Bose-Einstein condensate. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 32 4293-4299.

Gunnarson, O., Lundqvist B. I. 1976 Exchange and correlation in atoms, molecules and solids by the spin-density-functional formalism. Physical Review B 13: 4274-4298.

Gutowski, M. W. 1994 Smooth genetic algorithm. Journal of Physics A 27: 7893-7904.

Hansch, T., Schawlow, A. 1975. Cooling of gases by laser radiation. Opt. Commun. **13**, 68

Harbola, M. K., Banerjee, A. 2003 Many-electron problem in terms of the density: from Thomas-Fermi to modern density-functional theory. Journal of Theoretical and Computational Chemistry 2: 301-322.

Hedin, L., Lundqvist, B. I. 1971 Explicit local excahnge-correlation potentials. Journal of Physics C 4: 2064-2083.

Hess, H. F. 1986. Evaporative cooling of magnetically trapped and compressed spin-polarized hydrogen. Phys. Rev. B. **34**, 3476

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

Holland, J. H. 1975. Adaptation in Natural and Artificial Systems. University of Michigan, Ann Arbor, MI.

Homaifar, A., Lai, H. Y., McCormick, E. 1994 System optimization of turbofan engines using genetic algorithms. Applied Mathematical Modelling 18: Pages 72-83.

Hooft, G. 2002. Maddenin Son Yapıtaşları (Çeviri). TÜBİTAK Popüler Bilim Kitapları, Ankara.

Huang, K., Yang, C. N., 1957. Quantum-Mechanics Many Body Problem with Hard-Sphere Interaction. Physical Review 105: 767-775.

Judson, R. S., Jaeger, E. P., Treasurywala, A. M. 1994 A genetic algorithm based method for docking flexible molecules. Journal of Molecular Structure: Theochem 308: 191-206.

Kariuki, B. M., Serrano-González, H., Johnston, R. L., Harris, K. D. M. 1997 The application of a genetic algorithm for solving crystal structures from powder diffraction data. Chemical Physics Letters 280: 189-195.

Ketterle, W. 2002. Nobel Lecture: when atoms behave as waves: Bose-Einstein Condensation and the atom laser. Rev. Mod. Phys. **74**, 1131

Ketterle, W., Andrews, M. R., Davis, K. B., Durfee, D. S., Kurn, D. M., Mewes, M.-O. and van Druten, N. J. 1996. Bose-Einstein condensation of ultracold atomic gases. Physica Scripta T66, 31-37

Kim, E. S., Oh, C., Lee, S., Lee, B., Yun, I. 2001 Modeling and optimization of process parameters for GaAs/AlGaAs multiple quantum well avalanche photodiodes using genetic algorithms. Microelectronics Journal 32: 563-567.

Kohn, W., Sham, L. J. 1965 Self-consistent equations including exchange and correlation effects. Physical Review 140: A1133-A1138.

Kudla, A. 2004 Application of the genetic algorithms in spectroscopic ellipsometry. Thin Solid Films 455-456: 804-808.

Kulkarni, A. J., Krishnamurthy, K., Deshmukh, S. P., Mishra R. S. 2004 Microstructural optimization of alloys using a genetic algorithm. Materials Science and Engineering A 372: 213-220.

Krane, K. S. 2001. Nükleer Fizik I (Çeviri Editörü: Başar Şarer) Palme Yayıncılık, Ankara.

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

Liu, L. J., Zhao, L., Mao, Y. D., Yu, D., Xu, J. W., Li, Y.X. 2000 Using evolutionary algorithm to calculate the ground-state energy of double-electron atoms in a uniform magnetic field (B <= 10(9) G). International Journal of Modern Physics C 11: 183-194.

London, F. 1938. On the Bose-Einstein condensation. Phys. Rev. **54**, 947.

Merzbacher, E. 1998 Quantum Mechanics. John Wiley & Sons, Inc. New York.

Monroe, C., Swann, W., Robinson, H. and Wieman, C. 1990. Very cold trapped atoms in a vapor cell. Phys. Rev. Lett. **65**, 1571.

Nagy, A. 1998 Density functional theory and application to atoms and molecules. Physics Reports 298: 1-79.

Nakanishi, H., Sugawara, M. 2000 Numerical solution of the Schrodinger equation by a microgenetic algorithm. Chemical Physics Letters 327 429-438.

Parr, R. G., Yang, W. 1989. Density-Functional Theory of Atoms and Molecules, Oxford University Press, New York.

Perdew, J. P., Kurth, S. 2003 Density functionals for non-relativistic coulomb systems in the new century. Lecture Notes on Physics 620: 1-55.

Perdew, J. P., Wang, Y. 1992 Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy. Physical Review B 45: 13244-13249.

Perdew, J. P., Zunger, A. 1981 Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems. Physical Review B 23: 5048-5079.

Pethick, C. J., Smith, H. 2001 Bose-Einstein Condensation in Dilute gases, Cambridge University Press.

Petrich, W., Andeson, M. H., Ensher, J. R. and Cornell, E. A., 1995. Stable, Tightly Confining Magnetic Trap for Evaporative Cooling of Neutral Atoms. Phys. Rev. Lett. **74**, 3352

Phillips, C., Karr,C.L., Walker, G. 1996 Helicopter flight control with fuzzy logic and genetic algorithms. Engineering Applications of Artificial Intelligence 9: 175-184.

Pitaevskii, L. P. 1961. Vortex lines in an imperfect Bose gas. Zh. Eksp. Teor.Fiz. **40**, 646 (1961 Sov. Phys. JETP **13**, 451)

Pullan, W.J. 1997 Genetic operators for the atomic cluster problem. Computer Physics Communications 107: 137-148.

Saha, R., Chaudhury, P., Bhattacharyya, S. P. 2001 Direct solution of Schrodinger equation by genetic algorithm: test cases. Physics Letters A 291 397-406.

Samanta, B. 2004 Artificial neural networks and genetic algorithms for gear fault detection. Mechanical Systems and Signal Processing 18: 1273-1282.

See, J., Dollfus, P., Galdin, S. 2002 Comparison of a density functional theory and Hartree treatment of silicon quantum dot. Journal of Applied Physics 92: 3141-3146.

Springborg, M. 2000 Methods of electronic-structure calculations. John Wiley & Sons Ltd, Chichester.

Stwalley, W. C. and Nosanov, L. H. 1976. Possible “New” Quantum Systems. Phys. Rev. Lett. **36**, 910.

Şafak, H., Şahin, M., Gülveren, B., Tomak, M. 2003 Efficiency of genetic algorithm and determination of ground state energy of impurity in a spherical quantum dot. International Journal of Modern Physics C 14: 775-784.

Şahin, M., Tomak, M. 2002 Self-consistent calculation of semiconductor heterojunctions using quantum genetic algorithm. International Journal of Modern Physics B 16: 3883-3893.

Şahin, Ö., Sayan, P., Bulutcu, A. N. 2000 Application of genetic algorithm for determination of mass transfer coefficients. Journal of Crystal Growth 216: 475-482.

Şen, Z., Öztopal, A., Şahin A.D. 2001 Application of genetic algorithm for determination of Angstrom equation coefficients. Energy Conversion and Management 42: 217-231.

Thijssen, J. M. 1999. Computational Physics. Cambridge University Press.

Wanschura, T., Coley, D. A., Migowsky, S. 1996 Ground-state energy of the ±J spin glass with dimension greater than three. Solid State Communications 99: 247-248.

Wigner, E., Seitz, F. 1933 On the constitution of metallic sodium. Physical Review 43: 804-810.

Wu, T. T. 1959. Ground State of a Bose System of Hard Spheres. Physical Review 115: 1390-1404.

Venugopal, V., Narendran, T.T. 1992 A genetic algorithm approach to the machine-component grouping problem with multiple objectives. Computers & Industrial Engineering 22: 469-480.

Yang, X., Gen, M. 1994 Evolution program for bicriteria transportation problem. Computers & Industrial Engineering 27: 481-484.

Zacharias, C. R., Lemes, M. R., Pino, A. D. 1998 Combining genetic algorithm and simulated annealing: a molecular geometry optimization study. Journal of Molecular Structure-Theochem 430: 29-39.