



T.C.

SELÇUK ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

BOZON VE FERMİYON KARIŞIMLARININ TABAN DURUM ÖZELLİKLERİ

Muammer KIRMIZI

YÜKSEK LİSANS TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

Nisan-2011
KONYA
Her Hakkı Saklıdır

TEZ KABUL VE ONAYI

Muammer KIRMIZI tarafından hazırlanan "Bozon ve Fermiyon Karışımlarının Taban Durum Özellikleri" adlı tez çalışması 26/05/2011 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oy birliği ile Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı'nda YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri	**İmza**
Başkan Doç. Dr. Yusuf YAKAR	.....
Danışman Prof.Dr. Ülfet ATAV	.....
Üye Yrd. Doç. Dr. Hayreddin KÜÇÜKÇELEBİ	.....

Yukarıdaki sonucu onaylarım.

Prof. Dr. Bayram SADE
FBE Müdürü

TEZ BİLDİRİMİ

Bu tezdeki bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edildiğini ve tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada bana ait olmayan her türlü ifade ve bilginin kaynağına eksiksiz atıf yapıldığını bildiririm.

DECLARATION PAGE

I hereby declare that all information in this document has been obtained and presented in accordance with academic rules and ethical conduct. I also declare that, as required by these rules and conduct, I have fully cited and referenced all material and results that are not original to this work.

Muammer KIRMIZI

15 / 04/ 2011

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ

BOZON VE FERMİYON KARIŞIMLARININ TABAN DURUM ÖZELLİKLERİ

Muammer KIRMIZI

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Ülfet ATAV

2011, 56 Sayfa

Jüri
Prof. Dr. Ülfet ATAV
Doç. Dr. Yusuf YAKAR
Yrd. Doç. Dr. Hayreddin KÜÇÜKÇELEBİ

Bu çalışmada tuzaklanmış bir bozon-fermiyon karışımının taban durum özelliklerinin hesaplanması için kullanılabilecek yoğunluk fonksiyonelleri teorisine (DFT) dayalı bir yaklaşım sunulmuştur. Aynı zamanda böyle bir sistemin Thomas-Fermi (TF) yaklaşımı çerçevesinde nasıl incelenebileceği de tartışılmıştır. Elde edilen denklemlerin çözümü için bir algoritma hazırlanarak TF ve DFT yaklaşımları çerçevesinde sistemin taban durum bozon ve fermiyon yoğunluk dağılımları hesaplanmıştır.

Elde edilen sonuçlar kullanılarak bozon sayısı, fermiyon sayısı, bozon-fermiyon ve bozon-bozon etkileşme parametreleri oranı ve fermiyon, bozon kütleleri oranı gibi parametrelerin tuzak içerisinde bulunan bozon ve fermiyon yoğunluklarının davranışı üzerine olan etkileri tartışılmıştır.

Ayrıca, TF ve DFT yöntemleri ile yapılan hesaplama sonuçları değerlendirilerek TF yaklaşımının uygulanabilirliği, zayıf yönleri tartışılmıştır.

Anahtar Kelimeler: Bose-Einstein Yoğuşması (BEC), Bozon-Fermiyon Karışımları, Gross-Pitaevskii denklemi, Numerov yöntemi, Yoğunluk Fonksiyonelleri Teorisi (DFT).

ABSTRACT

MS THESIS

GROUND STATE PROPERTIES OF BOSON-FERMION MIXTURES

Muammer KIRMIZI

THE GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCE OF SELÇUK UNIVERSITY
THE DEGREE OF MASTER OF SCIENCE
IN PHYSICS

Advisor: Prof. Dr. Ülfet ATAV

2011, 56 Pages

Jury
Prof. Dr. Ülfet ATAV
Doç. Dr. Yusuf YAKAR
Yrd. Doç. Dr. Hayreddin KÜÇÜKÇELEBİ

In this study, an approach based on the Density Functional Theory (DFT) for the determination of ground state of a trapped boson fermion mixture is presented. Also, we have discussed that how one can analyse this system within the Thomas-Fermi (TF) approach. An algorithm was developed to solve the so obtained equations and the ground state boson and fermion density distributions of the system were calculated.

Considering the results obtained from these calculations we have discussed how the ground state boson and fermion density distributions of the system were influenced by the parameters such as the number of bosons, the number of fermions, ratio of boson-fermion and boson-boson interaction parameters and ratio of boson and fermion masses.

Furthermore, considering the results obtained by TF and DFT methods we have evaluated the applicability and weaknesses of TF method.,

Keywords: Bose-Einstein Condensation (BEC), Boson-Fermion Mixtures, Density Functional Theory (DEF), Gross-Pitaevskii Equation, Numerov Method.

ÖNSÖZ

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü'ne Yüksek Lisans tezi olarak sunulan bu çalışmada, etkileşen çok parçacık Bozon-Fermiyon karışımlarının taban durum özellikleri incelenmiştir. Bu durumda Kohn-Sham denklemlerinden türetilmiş ve yerel yoğunluk yaklaşımı içindeki enerji değişimini belirleyen, homojen olmayan Bose-Fermi karışımları için Yoğunluk Fonksiyonelleri Teorisi anlatılmıştır. Kohn-Sham denklemler sistemi sayısal olarak çözülmüş ve Bozon-Fermiyon yoğunluk dağılımına, elde edilen enerjinin özelliğine karar verilmiştir. Özellikle çökmeye karşı karışımın kararlılığı üzerinde Exchange-Correlation'dan dolayı oluşan itici potansiyel enerjinin etkisi incelenmiştir. Bu amaçla hesaplamalarda çok parçacık dalga fonksiyonu ile ilgilenmeyen ve sadece parçacıkların yoğunluğunun sistemi tanımlamak için yeterli olacağı fikrine dayanan Yoğunluk Fonksiyonelleri Teorisini (DFT) kullandık.

Tez çalışması sürecinde ilgi ve desteğini hiç esirgemeyen, kaynak temini konusunda her türlü yardım ve fedakârlığı gösteren, engin bilgi ve becerilerinden sonsuz yararlanma şansı vererek bu aşamaya gelmemde büyük pay sahibi olan danışmam hocam Prof. Dr. Ülfet ATAV'a çok teşekkür ederim.

Yüksek Lisans çalışmam boyunca her an yanımda olan, beni her zaman destekleyen annem Emine KIRMIZI ve babam İlyas KIRMIZI'ya ve çevirilerde beni bilgisinden esirgemeyen kardeşim Mehmet KIRMIZI'ya en içten sevgi ve şükranlarımı sunarım.

Son olarak çalışmalarım boyunca yardımlarımı esirgemeyen tüm arkadaşlarıma en derin duygularla teşekkür ederim.

Muammer KIRMIZI
KONYA-2011

İÇİNDEKİLER

ÖZET ..... **iv**

ABSTRACT ..... **v**

ÖNSÖZ ..... **vi**

İÇİNDEKİLER ..... **vii**

SİMGELER VE KISALTMALAR ..... **ix**

1.GİRİŞ **1**

2. BOSE-EİNSTEİN YOĞUŞMASININ TEORİSİ **7**

2.1. Etkileşmeyen Sistemlerde BEC 7

2.1.1. Geçiş Sıcaklığı 9

2.1.2. Yoğuşma Oranı 12

2.2. Etkileşen Sistemlerde BEC ve Gross-Pitaevskii Denklemi 13

2.3. Etkileşen Bozon Sistemleri İçin DFT 16

2.3.1. Kohn-Sham Denklemleri 18

3. TUZAKLANMIŞ BOZON FERMİYON KARIŞIMLARI **22**

3.1. Bozon-Fermiyon Karışımları İçin DFT 22

3.2.Thomas-Fermi Teorisi 25

4. SAYISAL HESAPLAMALAR **30**

4.2. Numerov Yöntemi 31

4.2.1. Zamandan Bağımsız Schrödinger Denkleminin Numerov Yöntemi ile Çözümü 32

5. SONUÇLAR VE TARTIŞMA **36**

KAYNAKLAR **44**

ÖZGEÇMİŞ **47**

SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler

h : Planck sabiti $h = 2\pi\hbar$ (J.s)

N : Toplam parçacık sayısı

T_c : Geçiş sıcaklığı (K)

μ : Kimyasal potansiyel (J)

Γ : Gama fonksiyonu

ζ : Riemann zeta fonksiyonu

a : s-dalga saçılma uzunluğu (m)

$\phi_0(r)$: Tek parçacık dalga fonksiyonu

$\psi(r)$: Yoğuşum dalga fonksiyonu

$n(r)$: Parçacık yoğunluğu

E_{xc} : Exchange-Correlation enerjisi

g_{BB} : Bozon-Bozon etkileşim parametresi

g_{BF} : Bozon-Fermiyon etkileşim parametresi

a_{BB} : Bozon-Bozon s-dalga saçılma uzunluğu

a_{BF} : Bozon-Fermiyon s-dalga saçılma uzunluğu

m_B : Bozon kütlesi (kg)

m_F : Fermiyon kütlesi (kg)

m_R : İndirgenmiş kütle (kg)

$\hat{T}_B$: Bozon kinetik enerjisi

$\hat{T}_F$: Fermiyon kinetik enerjisi

$\hat{V}_B(r)$: Bozon tuzaklama potansiyeli

$\hat{V}_F(r)$: Fermiyon tuzaklama merkezi

$\hat{H}$: Hamiltonian operatörü

Kısaltmalar

BEC : Bose-Einstein Yoğuşması

DFT : Yoğunluk Fonksiyonelleri Teorisi

LDA : Yerel Yoğunluk Yaklaşımı

TFA : Thomas-Fermi Yaklaşımı

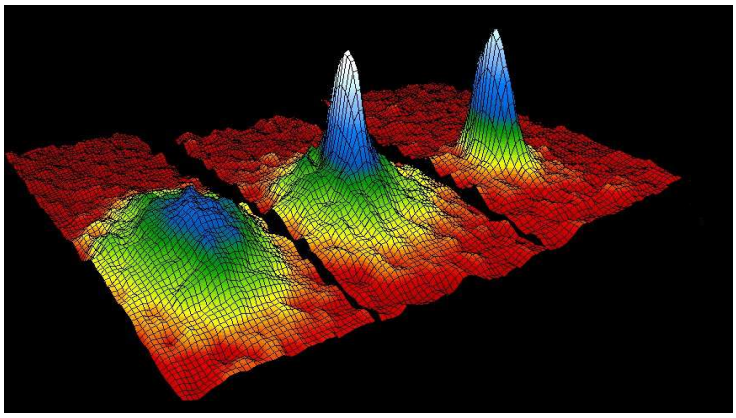
GP : Gross-Pitaevskii

1.GİRİŞ

1924 yılında Hintli fizikçi Sadyendra Nath Bose, klasik elektrodinamik sonuçlara hiç başvurmadan tamamıyla istatistik argümanlar kullanarak fotonlar için Planck dağılım yasasının türetilebileceğini gösterdiği bir makalesini yayınlanmasına destek olması için Einstein'e yolladı (Bose, 1924). Einstein bu makalenin önemini hemen kavradı ve makaleyi Almancaya çevirerek onun yayınlanmasını sağladı. Hemen sonra kendisi de bu konu üzerinde çalışarak bozonik parçacıkların kuantum teorisini geliştirdiği iki ayrı makale yayımladı. Bose'un fotonun kütlesiz parçacık olması nedeniyle fark edemediği bir fiziksel durumu Einstein fark etmiş ve sonlu kütleli, birbirleriyle etkileşmeyen bozonik parçacıkların düşük sıcaklıklarda bir faz geçişi göstermesi gerektiğini vurgulamıştır. Böylece Bose-Einstein istatistiği doğmuş oldu ve bu faz geçişi de Bose-Einstein Yoğuşması (BEC) olarak adlandırıldı.

Bose-Einstein yoğuşması Einstein tarafından öngörüldüğünden beri (Einstein, 1925) temel bir ilgi konusu olmuştur. Bose-Einstein Yoğuşması bu öngörüden ancak 70 yıl sonra 1995 yılında manyetik tuzaklarla sınırlanmış Rubidyum, Sodyum ve Lityum alkali atomlarının seyreltilmiş zayıf etkileşimli buharıyla yapılan bir seri deney sonucunda gözlemlenmiştir (Anderson ve ark. 1995, Davis ve ark. 1995, Bradley ve ark. 1995). Bu deneylerde ilk defa elde edilen, Bose-Einstein Yoğuşmasına uğramış atomik gazlar, kuantum olaylarını keşfetmek için makroskopik ölçekte eşsiz fırsatlar sağlar. Bu nedenle bozon sistemlerine ve BEC olayına olan ilgi son yıllarda oldukça artmıştır. Bose-Einstein yoğuşmasının hem bilimsel alanda hem de teknoloji uygulamalarında oldukça önemli gelişmelere bir taban oluşturacağı umulmaktadır.

Şekil 1.1'de tuzaklanmış atomik gazlarda Bose-Einstein Yoğuşmasının gözlemlendiği ilk deneylerden birinde (Anderson ve ark., 1995) elde edilen sonuçlar verilmektedir. Burada tuzaklanan atomların hız dağılımı verilmiştir. Yatay eksenler hızın x ve y bileşenlerini düşey eksen ise bu hıza sahip atomların sayısını gösterir. Soldaki şekil yoğuşma sıcaklığının biraz üzerindeki bir sıcaklıktaki rubidyum gazına karşılık olarak verilmiştir. Ortadaki şekil, yoğuşmanın meydana gelmesinden hemen sonrasını göstermektedir. Sağdaki şekil ise evaporative cooling (buharlaştırıcı soğutma) etkisi ortadan kaldırıldıktan sonraki yoğuşmanın biçimini göstermektedir.



Şekil 1.1. 1995 yılında rubidyum atomlarının yoğuşması deneyinden elde edilen hız dağılımının yayılma metoduyla gösterimi

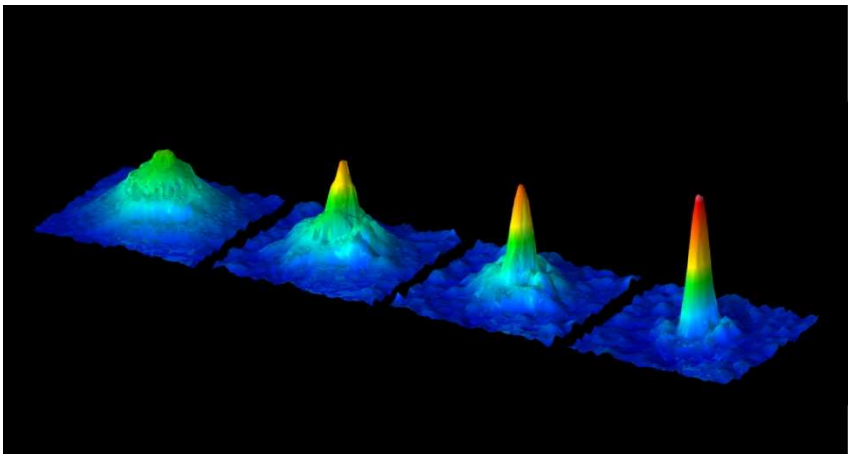
Kırmızı ile gösterilen yerler atom yoğunluğunun düşük olduğu, beyazla gösterilen yerler de atom yoğunluğunun en fazla olduğu bölgedir. Şekillerdeki dağılımların sıcaklığı soldan sağa doğru azalmaktadır. İlk şekil yoğuşma gözlemlenmeden hemen önceki dağılımı diğer ikisi ise yoğuşmanın oluştuğu durumu göstermektedir.

Dalga fonksiyonlarının gösterdiği simetri özelliklerine göre tüm bilinen parçacıklar (elektron, proton, foton vs.) iki temel gruba ayrılır: Bozonlar ve Fermiyonlar. Fermiyonlar özdeş iki parçacığın yer değiştirmesine karşın dalga fonksiyonları antisimetrik olan ve spini Planck sabitinin buçuklu katsayılarıyla orantılı, yani $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ nin katları $(\hbar/2, 3\hbar/2 \ldots)$ olan parçacıklardır. (Burada h Planck sabiti olup, değeri 6.625×10^{-34} j.s dir). İki fermiyonun tüm kuantum sayıları aynı olamaz veya diğer bir deyişle iki fermiyon eş zamanlı olarak aynı kuantum durumunda bulunamaz. Bozonlar ise özdeş iki parçacığın yer değiştirmesine karşı dalga fonksiyonları simetrik olan ve spini Planck sabitinin tam sayı katlarıyla orantılı $(0, \hbar, 2\hbar \ldots\ldots)$ olan parçacıklardır. Birden fazla bozon aynı kuantum durumunu paylaşabilir. Yani tüm kuantum sayıları (spin, yük, açısal momentum vs.) aynı olsa bile eşzamanlı olarak aynı durumda bulunabilirler. Başka bir deyişle bozonlar aynı kuantum durumunda bulunmayı tercih ederken fermiyonlar farklı kuantum durumlarında bulunmayı tercih ederler. Fermiyonların aynı kuantum durumunda bulunamayacağı gerçeği Pauli dışarlama ilkesi olarak bilinir.

Aynı seviyede birden çok parçacık bulunabileceği için bozonlardan oluşan bir sistemde çok düşük sıcaklıklarda tüm parçacıkların en düşük enerji durumunda toplanması mümkündür. Sonuç olarak, bir bozon gazının sıfır enerjili bir yoğuşma yapması beklenebilir, yani gazı sıfır mutlak sıcaklığına kadar soğutabiliriz. Fermiyonlarda bu olamaz, yani aynı kuantum durumunda birden fazla fermiyon olamayacağı için, tüm fermiyonların taban durumunda toplanması dolayısıyla da, fermiyon gazının sıfır enerjili bir yoğuşma yapması mümkün değildir. Bozonların düşük sıcaklıklardaki davranışı fermiyonlardan oldukça farklıdır. Bose-Einstein Yoğuşumu: Çok sayıda tam sayı spinli bozonlardan oluşan bir gazın mutlak sıfır sıcaklığına çok yakın sıcaklıklara kadar soğutulması durumunda çok sayıda parçacığın aynı kuantum durumuna sahip olmaları olayıdır.

Bu yoğuşmanın Kuantum Mekaniği Yasalarının bir sonucu olduğu önemle vurgulanmalıdır. Esasen makroskobik olarak gözlemlenebilen bir kuantum davranışı olan Bose-Einstein Yoğuşumunun anlaşılması Modern Kuantum Teorisinin de daha iyi anlaşılmasını sağlayacaktır. Bu konunun süperiletkenlik, süperakışkanlık, nanoteknoloji, atom lazeri, ışığın yavaşlatılması gibi birçok yeni teknolojilerin gelişimine de ışık tutacağı düşünülmektedir.

Şekil 1.2. deki Bose-Einstein yoğuşması; Almanya da Max Planck Enstitüsündeki bir grup tarafından elde edilmiştir. Burada mavi renk atom yoğunluğunun düşük olduğu kırmızı renk ise atom yoğunluğunun yüksek olduğu bölgeleri göstermektedir. Şekillerin sıcaklık sıralaması Şekil 1.1. dekine benzer durumdadır. İlk şekilde yoğuşma henüz gerçekleşmemişken, ikinci şekilde yoğuşma



Şekil 1.2. Bose-Einstein yoğuşmasının gösterimi

olayı yeni başlamıştır. İkinci şekilde yoğuşma etrafında halen güçlü bir termal bulut gözlenmektedir. Son şekilde ise bu termal bulut hemen hemen kaybolmuş ve bütün bozonların taban durumunda toplanmasıyla neredeyse saf bir yoğuşma elde edilmiştir.

Bose-Einstein Yoğuşması'nın sadece bozonlarda gözlemlenebildiği günümüzde tam olarak doğru değildir. Bozonlar tam sayı spinli parçacıklardır. Örneğin fotonlar 0 spinli parçacıklardır. Ancak $1/2, 3/2 \ldots$ gibi yarım spinli fermiyonlar, örneğin elektronlar tam olarak aynı kuantum durumuna sahip olamazlar. Bu yüzdende bir atomda elektronlar, en alt enerji düzeyleri dolduktan sonra bir üst enerji düzeyine yerleşirler. Fakat ortamın sıcaklığı yeterince düşürüldükten sonra, üst enerji düzeyindeki fermiyonlar gidebilecekleri en alt düzeyleri işgal etmeye başlar. Sıcaklık daha da düşürülürse fermiyonlar da Bose-Einstein Yoğuşması yapar. Bu olayın örneği Helyum-3'te süperiletkenlerde ve bazı moleküllerde gözlenmiştir. Bu olayın basit olarak açıklaması yarım spinli elektronların çiftler oluşturarak toplamda tam sayı spinli bozonlar gibi davranmalarıdır. Yani fermiyonlarla yoğuşum elde etmenin tek yolu, fermiyonik atomların bozonlara benzemesi için çiftler halinde bulunmalarını sağlamaktır. Bu sayede iki yarım spinli fermiyonun çift oluşturmasıyla tam sayı spinli parçacıklar elde edilmiş olur. Bu çiftlerde aynı kuantum durumunda bulunabilirler.

Ancak son yıllarda bozon ve fermiyonların karışımlarının düşük sıcaklıklardaki davranışı oldukça ilgi çekmektedir. Fermiyonlarla bozonlar arasındaki etkileşmeler, sistemin davranışında değişik etkilere yol açmaktadır.

Bozon-fermiyon karışımlarının tuzaklanması için kullanılan ve son yıllarda çok ilgi çeken bir potansiyel optik örgülerdir. Bir optik örgüde tuzaklanmış olan ultra soğuk atomlardan oluşan bir sistemin süper katı, Mott yalıtkanı ve süper akışkan gibi farklı fazlarda bulunabileceği (Morsch ve Oberthaler 2006, Giorgini, ve ark. 2008) görülmüştür. Optik örgü içerisinde ki atomlar bozon, fermiyon ya da ikisinin karışımı olabilir. Bozonlarla fermiyonlar arasındaki etkileşim parametrelerinin bağıl şiddetine bağlı olarak sistem yukarıda belirtilen fazlardan birisine girebilir. Son zamanlarda, fermiyon-Bozon etkileşimlerinin Feshbach rezonansı kullanılarak geniş bir aralıkta ayarlanabileceği gösterilmiştir (Best ve ark., 2009). Bu buluş bozon-fermiyon karışımlarında oluşabilecek çeşitli kuantum fazlarının incelenmesi için yeni bir yaklaşım oluşturur. Raman ve ark. (1999) 87Rb-40K bozon-fermiyon karışımı üzerinde yaptıkları deneysel çalışmalarda faz dağılımının bozon-fermiyon karışımı içinde kritik

süper akışkan hızının görüntülenmesiyle incelenebileceğini göstermişlerdir (Raman ve ark. 1999). Iskin ve Freericks (2009) hafif fermiyonlar ve ağır bozonlardan oluşan bir karışımın bir optik örgü üzerindeki davranışını deneysel olarak incelemişler, momentum dağılımı ve sıcaklığa bağlı ortalama kinetik enerjileri belirlemişlerdir. Gene bir optik örgü içerisindeki bozon-fermiyon karışımının kuantum faz yapısı Gu ve ark.(2009) tarafından ortalama alan yaklaşımına dayalı Bose-Fermi-Hubbard modeline uygun bir hamiltonyen kullanılarak teorik olarak incelenmiştir.

Deneysel olarak da gerçekleştirilebilen çift kuyu (double-well) potansiyeli içinde güçlü etkileşen tek boyutlu bozon-fermiyon karışımlarının davranışı da ilgi çekicidir. Bu sistemlerin taban durum özelliklerini incelemek için Luttinger akışkan teorisi kullanılabilir (Cazalilla ve Ho 2003, Mathey ve ark. 2004). Bozon ve fermiyon kütlelerinin farklı olması durumunda ise karışımın davranışını incelemek için sayısal yaklaşımlar kullanılabilir (Rizzi ve Imambekov, 2008). Girardeau ve Minguzzi (2007) güçlü etkileşime sahip böyle bir bozon-fermiyon karışımının çift kuyu potansiyeli içindeki taban durumunun davranışını indirgenmiş tek parçacık yoğunluk matrisi yaklaşımını kullanarak incelemişlerdir. Bozon ve fermiyon yoğunluklarının ve bozon-fermiyon etkileşim parametresinin ayarlanabildiği bir sistemin adyabatik soğutma karşısındaki tepkisi etkileşim parametresine bağlı olarak Sorensen ve ark. (2009) tarafından incelenmiştir.

Yakın zamanda Subaşı ve ark. (2009) tarafından yapılan bir diğer çalışmada iki boyutlu disk şeklindeki bir harmonik osilatör potansiyeli içinde bulunan bozon-fermiyon karışımlarının taban durum özellikleri ortalama alan yaklaşımı çerçevesinde incelenmiş ve bozonlar ve fermiyonlar arsındaki etkileşim potansiyelinin çekici olması halinde sistemin çökmeye karşı kararlı halde kaldığı ancak bozonlar ve fermiyonların uzaysal olarak ayrıştıkları bulunmuştur.

Tuzaklanmış çok parçacık bozon sistemlerinde exchange-correlation enerjisinin göz önüne alınması için yoğunluk fonksiyonel teorisi Nunes tarafından kullanılmıştır (Nunes, 1999). Daha sonra Kim ve Zubarev (2003) de çok parçacık bozon sistemlerinin incelenmesinde yoğunluk fonksiyonel teorisinden yararlanmıştır.

Son yıllarda büyük ilgi gören bozon-fermiyon karışımlarının taban durum özelliklerinin incelendiği çalışmalarda parçacıklar arası etkileşim potansiyeli bir ortalama alan yaklaşımı çerçevesinde ele alınmakta ve özellikle fermiyonların tuzak

içerisindeki dağılımının elde edilmesinde Thomas-Fermi modeline dayalı yaklaşımlar kullanılmaktadır. Bu çalışmada, harmonik bir tuzak içerisinde bulunan bozon-fermiyon karışımlarının taban durum özellikleri yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA) kullanılarak yoğunluk fonksiyonelleri teorisi çerçevesinde incelenmiştir. Aynı zamanda hesaplamalar Thomas-Fermi yaklaşımı kullanılarak da tekrarlanmıştır. Elde edilen sonuçlar karşılaştırıldığında Thomas-Fermi yaklaşımının hem tuzaklanmış atomik bulutun kenarlarına yaklaşıldığında hem de tuzak merkezindeki fermiyon dağılımının belirlenmesinde yetersiz kaldığı gözlenmiştir. Bu açıdan özellikle güçlü uzaysal ayrışmaların gözlendiği hafif fermiyon ağır bozon karışımı gibi sistemlerde Thomas-Fermi yaklaşımının kullanılmasın dikkate değer hatalara yol açabileceği sonucuna ulaşılmıştır.

Tezin bundan sonraki bölümlerinde önce BEC olayının teorisi etkileşmeyen ve etkileşen sistemler için sunulacaktır. Daha sonra yoğunluk fonksiyonel teorisi sunularak, yoğunluk fonksiyonel teorisinin çok parçacık bozon sistemlerine ve bozon-fermiyon karışımlarına nasıl uygulanabileceği tartışılacaktır. Daha sonra bu çerçevede elde edilen çiftlenmiş diferansiyel denklemler takımının sayısal çözümü için uygun bir algoritma sunulmasının ardından, son olarak, yapılan hesaplamalardan elde edilen sonuçlar karşılaştırılarak genel bir değerlendirme yapılacaktır.

2. BOSE-EİNSTEİN YOĞUŞMASININ TEORİSİ

2.1. Etkileşmeyen Sistemlerde BEC

Alkali atomlar için kullanılan manyetik tuzakları karakterize eden sınırlayıcı potansiyelin şeklinin iyi bir yaklaşımla kuadratik olduğu kabul edilebilir, yani

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

şeklinde yazılabilir. Bu durumda sistemin Hamiltoniyeni

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

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 Hamiltoniyenlerinin 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 tam sayılardır. Denk.(2.1)'deki potansiyelle sınırlandırılmış N tane etkileşmeyen bozonun taban durumu olan $\phi(r_1, \cdots, r_N)$, 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

$$\phi(r_1, \cdots, r_N) = \prod_i \phi_0(r_i) \tag{2.4}$$

şeklinde verilir. Buradaki $\phi_0(r)$

$$\phi_0(r) = \left(\frac{m\omega_{ho}}{\pi\hbar}\right)^{3/4} \exp\left[-\frac{m}{2\hbar}\left(\omega_x x^2 + \omega_y y^2 + \omega_z z^2\right)\right] \tag{2.5}$$

şeklindedir ve

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

osilatör frekanslarının geometrik ortalamasıdır. Yoğunluk dağılımı $n(r) = N|\varphi_0(r)|^2$ 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 davranışını tanımlayan önemli bir karakteristik uzunluktur. 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 yarı çapı 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 dağılımı termal bulut yoğunluğu yaklaşımıyla kabaca bir sonuç elde edilir. Eğer $V_{ext}(r) = (1/2)m\omega_{ho}^2 r^2$ ise Gaussyen ergisinin genişliği $R_T = a_{ho}(k_B T/\hbar\omega_{ho})^{1/2}$ dir ve bu a_{ho}'dan daha büyüktür. Bose dağılım fonksiyonun kullanımı ile termal bulut için elde edilen bu sonuç fazla değişmez.

Sınırlandırıcı alanın şekli aynı zamanda 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 $r_\perp = (x^2 + y^2)^{1/2}$ 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 denklem (2.5)

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

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

Eksenel simetrik bir tuzağın seçimi, yoğuşmanın varlığını göstermek için momentum dağılımı analizinden daha güçlü kanıtlar ortaya koyar. Bu noktayı anlamak için (2.8) denklemindeki dalga fonksiyonunun Fourier dönüşümünü yapalım:

$\tilde{\varphi}_0(p) \propto \exp\left[-a_\perp^2\left(p_\perp^2 + \lambda^{-1}p_z^2\right)/2\hbar\right]$. Bu ifadeden ortalama eksenel ve radyal genişlikler hesaplanabilir. Bunların oranı,

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

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 eş bölüşüm ilkesine göre momentum uzayında izotropik olacaktı. Yani yoğuşum bulutunun dağılımında tuzak anizotropisi ile orantılı bir anizotropinin ortaya çıkması BEC'in elde edildiğinin bir belirtisidir (Anderson ve ark. 1995, Davis ve ark. 1995).

2.1.1. Geçiş Sıcaklığı

T_c geçiş sıcaklığı, yoğuşmanın başladığı sıcaklık yani en düşük enerji durumunda makroskobik ölçekte doluluk gözlemlenen en yüksek sıcaklık olarak tanımlanır. Parçacık sayısı N, yeterince büyükse, denk.(2.3)'deki sıfır nokta enerjisi ihmal edilebilir ve böylece en düşük enerji $\varepsilon_{\min}$ sıfıra eşitlenir. Bu durumda uyarılmış durumlardaki parçacık sayısı;

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

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, bu kimyasal potansiyel için bütün parçacıkların uyarılmış durumlara yerleştirilebilmesi şartıyla belirlenir. Bu da:

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

şeklindedir. Buradaki $g(\varepsilon)$; enerji durum yoğunlugudur. 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 fonksiyonu 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 $\Gamma(\alpha)$ ve Riemann zeta $\zeta(\alpha)$ fonksiyonları listelenmiştir.

Şimdi (2.12) denkleminden

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

ifadesi bulunur. Üç boyutlu bir harmonik potansiyeli için α=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)'den geçiş sıcaklığı için

α	$\Gamma(\alpha)$	$\zeta(\alpha)$
1	1	∞
1.5	$\sqrt{\pi}/2 = 0.0886$	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	$15\sqrt{\pi}/8 = 3.323$	1.127
4	6	$\pi^4/90 = 1.082$

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

$$kT_C = \frac{\hbar\varpi N^{1/3}}{[\zeta(3)]^{1/3}} \approx 0.94\hbar\varpi N^{1/3} \tag{2.15}$$

sonucu elde edilir. Burada ϖ üç osilatör frakansının geometrik ortalamasıdır.

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

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 homojen bir Bose gazına denk gelen α degeri $3/2$ olup, $C_{3/2}$ sabiti $C_{3/2} = \frac{Vm^{3/2}}{2^{1/2}\pi^2\hbar^3}$ 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 homojen 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 α=2' dir ve denk.(2.12)'deki integral sonludur. ϖ ile göstereceğimiz faz uzayı yoğunluğunu tanımlamak kullanışlıdır. Bu yoğunluk, termal de Broglie dalga boyunun küpüne ($\lambda_T^3 = \left(2\pi\hbar^2/mkT\right)^{3/2}$) eşit bir hacim içindeki parçacık sayısı olarak tanımlanır.

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

Gaz klasik ise bu ifade tek parçacıklı durumların doluluğunun bir ölçüsüdür. Dolu durumların çoğu kT civarında veya daha düşük bir enerjiye sahiptir. Faz uzayı yoğunluğu, parçacık yoğunluğu ve bir hacim başına düşen dolu durumların sayısı arasındaki orandır. Böylelikle Bose-Einstein faz degişimi denk.(2.18)'e göre $\varpi = \zeta(3/2) \approx 2.612$ oldugunda ortaya çıkar .

Bir harmonik osilatör potansiyelindeki parçacıklar için iyi tanımlı bir faz geçişinin varlığı kT'den daha düşük 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'den daha az olabileceği anlamına gelir. T_C, denk.(2.15) ile verildiğinden şartımız $N^{1/3} >> 1$ şeklindedir.

2.1.2. Yoğuşma Oranı

Geçiş sıcaklığının altındaki sıcaklıklarda denk.(2.10) ile verilen μ=0 için uyarılmış durumlarda bulunan 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

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

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

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

şeklinde yazılabilir. Yoğuşumdaki parçacıkların sayısı böylece

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

yada

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

ifadesiyle verilir. Üç boyutlu bir kutudaki parçacıklar için $(\alpha = 3/2)$ dir 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 $(\alpha = 3)$, yoğuşumdaki 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).

2.2. Etkileşen Sistemlerde BEC ve Gross-Pitaevskii Denklemi

Etkileşen sistemlerde Bose-Einstein yoğuşmasını incelemek için kullanılan çeşitli yöntemler vardır. Bunlardan bir tanesi Bogoliubov yaklaşımıdır (Bogoliubov, 1947). Bu yaklaşım; mutlak sıfır sıcaklığındaki zayıf etkileşimli bozon gazları için geliştirilmiştir. Taban duruma karşılık gelen dalga fonksiyonunun bir düzen parametresi olarak değerlendirildiği bu yaklaşımda üst seviyedeki bozonların katkısı bir pertürbasyon olarak değerlendirilir. Makroskopik yoğuşma durumunda Bogoliubov yaklaşımında kullanılan taban durum dalga fonksiyonu Gross-Pitaevskii (GP) denklemi ile verilir. GP düşük yoğunlukta yoğuşan atomların fazla olduğu durumlarda, BEC olayının ortalama-alan teorisini oldukça iyi tanımlayan bir denklemdir ve Gross ve Pitaevskii tarafından farklı yaklaşılarla ayrı ayrı türetilmiştir (Pitaevskii, 1961; Gross, 1961).

İki parçacık arasında düşük enerjilerdeki etkileşim potansiyeli, momentum temsilinde bir sabit olarak kabul edilebilir ve bu potansiyel $U_0 = 4\pi\hbar^2 a/m$ şeklinde yazılır. Burada a, s-dalgası saçılma uzunluğudur. Koordinat uzayında bu potansiyel $U_0\delta(r-r')$ şeklindeki bir temas etkileşimine karşılık gelir ki burada r ve r' iki parçacığın konumlarıdır. Çok parçacık durumlarının enerjisini araştırmak için bir Hartree veya ortalama alan yaklaşımı kullanırsak ve dalga fonksiyonunun tek parçacık dalga fonksiyonlarının simetrik bir çarpımı olduğunu varsayarsak tamamen yoğuşmuş durumda, tüm bozonlar, aynı en düşük enerjili tek parçacık durumundadır. Bu durumda parçacık sisteminin dalga fonksiyonunu şu şekilde yazabiliriz.

$$\Psi(r_1, r_2, ...r_N) = \prod_{i=1}^{N} \phi(r_i) \tag{2.27}$$

Burada tek parçacık dalga fonksiyonu $\phi_0(r)$ olağan şekilde aşağıdaki gibi normalize edilir.

$$\int dr|\phi_0(r)|^2 = 1 \tag{2.28}$$

Bu dalga fonksiyonu iki atom birbirine yakınken atomlar arası etkileşimden kaynaklanan korelasyonları içermez. Bu etkiler elimine edilmiş ve sadece kısa dalga boylu etkileri tanımlayan etkin temas potansiyeli $U_0\delta(r-r')$ dikkate alınmıştır. Ortalama alan yaklaşımında, parçacıklar arası ortalama mesafeden daha kısa olan uzunluk ölçeklerinde etkin olan etkileşimler açık olarak dikkate alınmaz. Etkin etkileşim bu yüzden U_0'a eşittir ve sistemin etkin hamiltoniyen operatörü.

$$H=\sum_{i=1}^{N}\left[\frac{p_i^{\,2}}{2m}+V(r_i)\right]+U_0\sum_{i<j}\delta(r_i-r_j) \tag{2.29}$$

şeklinde yazılabilir. Burada *V(r)* dış potansiyelidir. Bu durumda sistemin taban durumunun enerjisi aşağıdaki formülle verilir.

$$E=N\int dr\left[\frac{\hbar^2}{2m}\left|\nabla\phi(r)\right|^2+V(r)\left|\phi(r)\right|^2+\frac{(N-1)}{2}U_0\left|\phi(r)\right|^4\right] \tag{2.30}$$

Hartree yaklaşımında, tüm atomlar dalga fonksiyonunu $\phi_0(r)$ olarak gösterdiğimiz durumdadırlar. Gerçek bir dalga fonksiyonunda bazı atomlar küçük atomlar arası mesafelerdeki korelasyonlar nedeniyle konumla daha hızlı değişim gösteren uyarılmış durumlarda olacaktır ve bu nedenle $\phi_0(r)$ durumundaki atomların toplam sayısı *N*'den az olacaktır. Ancak düzenli homojen bozon gazı için mikroskobik teoriden elde edilen yoğuşum içindeki parçacıkların sayısındaki bağıl azalma, (buna etkileşimler nedeniyle yoğuşumun zayıflaması denir) $(na^3)^{1/2}$ mertebesindedir ve burada *n* parçacık yoğunluğudur. Parçacıklar arası mesafenin bir ölçüsü olarak parçacık başına düşen ortalama hacime sahip bir kürenin r_s yarıçapını kullanabiliriz. Bu yarıçapla yoğunluk arasındaki ilişki,

$$n=\frac{1}{(4\pi/3)r_s^{\,3}} \tag{2.31}$$

denklemi ile verilir. Zayıflama bu yüzden $(a/r_s)^{3/2}$ mertebesindedir ki bu tipik olarak yapılan ilk deneylerde yüzde bir civarında veya daha azdır. Bu nedenle etkileşimler nedeniyle yoğuşumun zayıflaması çoğu durumda ihmal edilebilir. Ancak daha sonraki deneylerde s-dalga saçılma uzunluğunun çok büyük değerlerine ulaşılmıştır ve dolayısıyla yoğuşmanın zayıflaması daha önemli hale gelmiştir. Çok parçacık bozon sistemlerinde parçacıklar arası etkileşim sonucunda üst seviyelere uyarılma oranları Kuantum Monte Carlo (QMC) yöntemleriyle incelenmiştir (DuBois ve Glyde 2001, DuBois ve Glyde 2003, Sakhel ve ark. 2002, DuBois 2002), ve zayıf

etkileşen sistemler için sonuçların genel olarak öngörülen $(a/r_s)^{3/2}$ davranışı ile uyumlu olduğu gözlenmiştir. Son zamanlarda yapılan bir diğer çalışmada geniş ölçekli Monte Carlo simülasyonları kullanılarak homojen olmayan sistemlerde yoğunluğun değişiminin etkileri ve tuzaklanmış Bose-Einstein yoğuşumu üzerindeki sonlu boyut etkileri incelenmiştir (Kragset ve ark., 2006).

İlk olarak homojen bir Bose gazını ele alalım. *V* hacimli bir sistemde, temel durumda bir parçacığın dalga fonksiyonu $1/V^{1/2}$'dir ve bu nedenle bozonlarının tümü aynı tek parçacık durumunda olan bir sistemin enerjisi, bozon çiftleri yapmak için olası yolların sayısı *N* (*N*-1)/2 ile bir parçacık çiftinin etkileşim enerjisinin çarpımıdır. Bu yaklaşımda ortalama alan etkileşim enerjisi

$$E_{et} = \frac{N(N-1)}{2V} U_0 \approx \frac{1}{2} V n^2 U_0 \tag{2.32}$$

şeklindedir. Burada $n=N/V$ dir. Ayrıca, son ifadeyi yazarken $N >> 1$ olduğunu varsaydık. Yoğuşmuş durumun dalga fonksiyonu

$$\psi(r) = N^{1/2} \phi(r) \tag{2.33}$$

şeklindedir ve parçacıkların yoğunluğu ise aşağıdaki ifade ile verilir.

$$n(r) = |\psi(r)|^2 \tag{2.34}$$

Ve $1/N$ çarpanlarının sadeleştirilmesiyle sistemin enerjisi aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$E(\psi) = \int dr \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \psi(r)|^2 + V(r) |\psi(r)|^2 + \frac{1}{2} U_0 |\psi(r)|^4 \right] \tag{2.35}$$

Toplam parçacık sayısının,

$$N = \int dr |\psi(r)|^2 \tag{2.36}$$

sabit olması koşulu altında (2.35) denklemi ile verilen enerjiyi minimum yapan $\psi(r)$ dalga fonksiyonu varyasyonel yöntemle elde edilir. Bu işlem kolay bir şekilde Lagrange çarpanları yöntemi ile ele alınabilir. Standart varyasyonel hesap kullanılarak, minimum enerjili durum için,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(r) + V(r) \psi(r) + U_0 \, |\psi(r)|^2 \psi(r) = \mu \psi(r) \tag{2.37}$$

denklemi kolayca elde edilir. Burada kimyasal potansiyel μ parçacık sayısının sabitliğini temin eden Lagrange çarpanıdır.

Bu denklem zamandan bağımsız Gross-Pitaevskii denklemidir. Bu bir Schrödigner denklemi formuna sahiptir ki burada parçacıklara etki eden toplam potansiyel; $V(r)$ dış potansiyelini ve diğer bozonlarca üretilen ortalama alanı hesaba katan doğrusal olmayan $U_0|\psi(r)|^2$ ifadesinin toplamıdır. Burada ki öz değerin kimyasal potansiyel olduğunu, normal (lineer) Schrödinger denklemi için olduğu gibi parçacık başına hareket enerjisi olmadığını vurgulamak uygun olacaktır. Tamamı aynı durumda bulunan etkileşmeyen parçacıklar için kimyasal potansiyel parçacık başına enerjiye eşitti; fakat etkileşen parçacıklar için durum böyle değildir.

2.3. Etkileşen Bozon Sistemleri İçin DFT

Moleküllerin veya katıların yapılarının anlaşılmasında, kuantum mekaniğinin insanı hayrete düşürecek bir biçimde hızlı gelişimine karşın, elde edilmiş olan denklemlerin analitik veya sayısal çözümlerinde birçok zorluklarla karşılaşılmıştır. İlkesel olarak, kuantum mekaniksel bir dalga fonksiyonu, verilen bir fiziksel sistem hakkında bilginin tümünü kapsamaktadır.

İki boyutlu bir kare potansiyel veya bir hidrojen atomu hali için, sistemin dalga fonksiyonunu elde etmek için, Schrödinger denklemini kesin olarak çözebiliyoruz ve buradan, sistemin izin verilen tüm enerji hallerini saptayabiliyoruz. Ne yazık ki, Schrödinger denklemini *N* parçacıklı bir sistem için çözmemiz, genellikle olanak dışı olarak kalmaktadır. Bu tür problemlerin çözümüne ulaşılmasında, bazı yaklaşımlarda bulunmak zorunluluğu vardır.

1998 yılında kimya bilim alanında Nobel ödülünü kazanmış olan Walter Kohn, 1964 yılında P.Hohenberg ile yapmış olduğu bir çalışmada çok cisimli dalga fonksiyonunun temel bir değişken olarak alınmasının problemi oldukça güçleştirdiğini öne sürerek, onun yerine, yer ve zamanın bir fonksiyonu olan elektron yoğunluğunu varyasyonel bir yaklaşım çerçevesinde temel değişken olarak almıştır. Elektron yoğunluğunun çok yararlı bir fonksiyonel olduğunu bildiren Hohenberg-Kohn'un ileri sürdükleri bu kurama göre; herhangi bir sistemin yük yoğunluğu, sistemin tüm temel hal özelliklerini saptamaktadır. Bu durumda, çok elektronlu bir sistemin toplam temel hal enerjisi, yoğunluğun bir foksiyonelidir. Böylece, elektron yoğunluk fonksiyoneli biliniyorsa, elektronlar ve çekirdeklerden oluşan bir sistemin toplam enerjisi de aynı zamanda biliniyor demektir.

Böylece *N* parçacıklı bir sistemin, Schrödinger denkleminin yaklaşık bir çözümünün elde edilmesinde yararlanılan bir yöntem olan Yoğunluk Fonksiyonel Teorisinin (DFT) basit bir biçimde tanımını vermiş oluyoruz.

DFT genellikle fermiyonlardan oluşan sistemlerin elektronik yapılarının özelliklerinin hesaplanmasında kullanılan yaygın bir yöntemdir. Ayrıca etkileşen sistemlerde Bose-Einstein Yoğuşmasının incelenmesinde de kullanılan güçlü bir yöntemdir. Esasen GP denklemi yerel yoğunluk yaklaşımı çerçevesinde DFT teorisinden elde edilebilir. DFT'nin gerçek sistemlere uygulanmasında Kohn-Sham denklemleri pratik hesaplamalar için kullanışlı bir temel oluşturur. DFT temelde fermiyonlar için geliştirilmiş bir teoridir ve bozon sistemlerinde kullanımı oldukça azdır. Ancak bozon gazları içinde oldukça iyi sonuçlar vermektedir. DFT teorisinin temelleri Kohn ve arkadaşlarının 1960'lı yılların ortalarında yaptıkları çalışmalarla atılmıştır (Hohenberg ve Kohn 1964, Kohn ve Sham 1965).

Hohenberg ve Kohn (1964) dış potansiyel alanında hareket eden etkileşimli bir gazın taban durum enerjisinin parçacık yoğunluğu $n(r)$'ye bağlı fonksiyonel ile hesaplanabileceğini göstermişlerdir. Bu fonksiyonel dış potansiyelin şekline bağlı değildir ve tüm elektronik sistemlere uygulanabilir. Hohenberg ve Kohn teorisinin temeli, taban durumda sistemin enerjisinin minimum olma ilkesine dayanır. Prensip olarak verilen herhangi bir dış potansiyel için, enerji fonksiyonellerini minimum yapan yoğunluk fonksiyonu $n(r)$ kolayca hesaplanabilir ve bu parçacık yoğunluğu sistemin taban durumuna karşılık gelir. Taban durum yoğunluğu, *N*-parçacıklı Schrödinger denkleminin en düşük enerjili çözümü için sistemin bulunabileceği tek uzaysal dağılımı temsil eder. Yani tek bir taban durum yoğunluğundan çok parçacık dalga fonksiyonu elde edilir. Böylece yoğunluk kullanılarak sistemin elektron sayısı, taban-durum dalga fonksiyonu ve diğer tüm elektronik özellikleri belirlenebilir (Hohenberg ve Kohn 1964).

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

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} + \hat{U} = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{N}\nabla_i^2 + \sum_{i=1}^{N}V(r_i) + \sum_{i\neq j=1}^{N}U(r_{ij}) \tag{2.38}$$

olarak yazılabilir. Burada $\hat{T}$ kinetik enerjiyi, $\hat{U}$ parçacıklar arasındaki etkileşme potansiyelini ve $\hat{V}$ dış potansiyeli tanımlayan operatörlerdir. Sistemin taban durumundaki bütün fiziksel özellikleri parçacık yoğunluğu $n(r)$ cinsinden

tanımlanabileceği için sistemin bu Hamiltonyene karşılık gelen toplam enerjisinin beklenen değeri $E[n]=\langle\psi[n(r)]|\hat{H}|\psi[n(r)]\rangle$

$$\begin{aligned} E[n] &= T[n]+V[n]+U[n] \\ E[n] &= T[n]+U[n]+\int n(r)V(r)d^3r \end{aligned} \tag{2.39}$$

parçacık yoğunluğunun bir fonksiyoneli şeklinde yazılabilir. Sabit *N* parçacığa sahip bir sistem için doğru taban durum yoğunluğu

$$\int n(r)d^3r = N \tag{2.40}$$

şartı göz önüne alınarak enerjinin minimum değerinin bulunması ile mümkündür.

$$E[n]=\min_{\{n(r)\}}\left\{T[n]+U[n]+\int n(r)V(r)d^3r\right\} \tag{2.41}$$

Minimum enerjinin elde edilmesi ile buna uygun taban-durum yoğunluğu bulunur. Buradan taban-durum dalga fonksiyonu kolayca elde edilir. Taban-durum dalga fonksiyonu üzerinden ortalama değeri kullanılarak herhangi bir fiziksel gözlenebilir hesaplanabilir.

$$A=\langle\psi_0|\hat{A}|\psi_0\rangle \tag{2.42}$$

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

2.3.1. Kohn-Sham Denklemleri

Uygulamada DFT'nin kullanılması Kohn-Sham denklemleri sayesinde mümkün olmuştur. Kohn ve Sham (1965) ve Kohn (1999) DFT'nin etkileşimli çok parçacıklı sistemlerin elektron yoğunluğunun tek parçacık teorisinden elde edilmesini sağlayan güçlü bir yöntem olduğunu göstermişlerdir. Kohn-Sham teorisi sadece taban-durum için

değil bunun yanında zamana bağlı süreçler ve uyarılmış durumlar için de hesaplama olanağı ve bazı kavramsal avantajlar sağlar(Kohn 1999).

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

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

$$E[n] = T[n] + \int d^3 r n(r) V(r) \tag{2.43}$$

E'nin yoğunluğa göre değişimi aşağıdaki denklemle verilir:

$$\frac{\delta T[n]}{\delta n(r)} + V(r) = \lambda n(r) \tag{2.44}$$

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

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V(r) \right] \psi_k(r) = \varepsilon_k \psi_k(r) \tag{2.45}$$

Taban-durum yoğunluğu

$$n(r) = \sum_{k=1}^{N} \left| \psi_k(r)^2 \right| \tag{2.46}$$

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

Etkileşen birçok parçacık sistemi için ise etkileşimleri içeren enerji fonksiyoneli aşağıdaki şekilde genelleştirilebilir.

$$E[n] = T[n] + \int d^3 r n(r) V(r) + \frac{1}{2} \int d^3 r \int d^3 r_1 n(r_1) U(r_{12}) n(r) + E_{xc}[n] \tag{2.47}$$

İlk terim etkileşimsiz parçacıkların kinetik enerji fonksiyonelini, ikincisi dış potansiyelden kaynaklanan enerjiyi, üçüncüsü ise Hartree enerjisini gösterir. Son terim

ilk üç terimde hesaplanamayan tüm katkıları içeren değiş-tokuş ve korelasyon (Exchange Correlation) enerjisidir. Burada tüm bilinmeyen etkileşim enerjilerini içeren E_{xc} için herhangi bir yaklaşım yapılmadığına dikkat edilmelidir. E_{xc} dalga fonksiyonunun şekline değil parçacık yoğunluğuna bağlı bir fonksiyoneldir. Bu nedenle denklemdeki tüm terimler yoğunluğa bağlı yazılabilmiştir. Etkileşimli parçacıklar için kinetik enerji ve parçacıklar arası etkileşme, yoğunluğa açık bir ifade ile bağlı değildir. Bu yüzden sadece yoğunluğa bağlı olan etkileşimsiz gazların kinetik fonksiyonu ayrılabilir ve kinetik enerji E_{xc}'nin bir parçası olarak ele alınabilir. Bu denklemin yoğunluğa göre değişimi alındığında

$$\frac{\delta T[n]}{\delta n(r)} + \frac{\delta E_{xc}[n]}{\delta n(r)} + \int d^3 r_1 n(r_1) U(r_{12}) + V(r) = \lambda n(r) \tag{2.48}$$

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

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{etk}(r) \right] \psi_k(r) = \varepsilon_k \psi_k(r) \tag{2.49}$$

olur. Buradaki V_{etk} ;

$$V_{etk}(r); = V(r_1) + \frac{\delta E_{xc}[n]}{\delta n(r_1)} + \int d_3 r_1 n(r_1) U(r_{12}) \tag{2.50}$$

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

$$E[n] = \sum_{k=1}^{N} \varepsilon_k - \int d^3 r_1 d^3 r_2 n(r_1) U(r_{12}) n(r_2) + E_{xc}[n] - \int d^3 r_1 V_{xc}[n(r_1)] n(r_1) \tag{2.51}$$

Değiş-tokuş ve korelasyon potansiyeli ise

$$V_{xc}[n(r)] = \frac{\delta E_{xc}[n]}{\delta n(r)} \tag{2.52}$$

şeklinde tanımlanır. Denk.(2.46), (2.49), (2.50), (2.51) ile verilen ifadeler yoğunluk fonksiyonel teorisi ile hesaplama sürecini tanımlar. $V_{xc}[n(r)]$ ile verilen değiş-tokuş ve korelasyon potansiyelinin bilinmesi halinde kapalı bir takım oluşturan bu denklemler ilk kez Kohn ve Sham (1965) tarafından türetilmiştir. Tam formu bilinmeyen değiş-tokuş ve korelasyon potansiyeli yoğunluğun bir fonksiyonudur, fakat dış potansiyele bağlı bir

katkı olarak alınabilir. Bu bağlılık, her bir fiziksel sistemin kendine özgü bir değiş-tokuş ve korelasyon enerji fonksiyonuna sahip olduğunu gösterir.

3. TUZAKLANMIŞ BOZON FERMİYON KARIŞIMLARI

Bu bölümde etkileşen, Bozon-Fermiyon karışımlarını ele alacağız. Bu sistemleri incelemek üzere önce Kohn-Sham denklemlerinden türetilmiş ve yerel yoğunluk yaklaşımı çerçevesinde homojen olmayan Bose-Fermi karışımları için Yoğunluk Fonksiyonel Teorisini sunacağız. Bu teori temel olarak enerjinin minimum olması ilkesine uygun şekilde varyasyonel olarak belirlenir. Bu yaklaşım sonucunda Bozon-Fermiyon karışımları için Kohn-Sham tipi bir denklemler sistemi oluşturacağız ve bu sistemin sayısal çözümü için bir algoritma sunacağız. Bu algoritmanın uygulanmasıyla elde edeceğimiz bozon-fermiyon yoğunluk dağılımları bir sonraki bölümde sunularak elde edilen sonuçlar üzerinde kullanılan yaklaşımların ve parçacıklar arası etkileşmelerin rolleri tartışılacaktır.

3.1. Bozon-Fermiyon Karışımları İçin DFT

Bu bölümde homojen olmayan Bozon-Fermiyon sistemlerinde Yoğunluk Fonksiyonelleri Teorisinin (DFT) nasıl uygulanacağını kısaca ele alacağız. Daha sonra elde edilen ortalama alan yaklaşımını daha geliştirmek üzere Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (LDA) kullanılarak türetilen Exchange-Correlation fonksiyonunu da hesaba katacağız.

İki cisim etlileşmesine sahip etkileşen bozonların ve spini kutuplanmış fermiyonların seyrek, homojen olmayan sistemini s-dalgası saçılma uzunluğu yaklaşımını kullanarak incelemeye başlayalım. Buna göre parçacıklar arası potansiyeller;

$$U_{BB}(\left|r-r^{1}\right|)=g_{BB}\delta(r-r^{1}) \tag{3.1}$$

$$U_{BF}(\left|r-r^{'}\right|)=g_{BF}\delta(r-r^{'}) \tag{3.2}$$

Fermiyon-Fermiyon etkileşimleri ihmal edilecek kadar az olduğundan

$$U_{FF}(\left|r-r^{'}\right|)=0 \tag{3.3}$$

alınabilir.

Bozon-bozon etkileşim parametresi $g_{BB}=4\pi\hbar^{2}a_{BB}/m_{B}$ dır. Burada a_{BB} bozon-bozon s-dalgası saçılma uzunluğudur ve m_{B} bozon kütlesidir. Bozon-fermiyon etkileşim parametresi $g_{BF}=2\pi\hbar^{2}a_{BF}/m_{R}$ şeklindedir. Burada a_{BF} bozon-fermiyon s-

dalgası saçılma uzunluğudur ve $m_R = m_B m_F /(m_B + m_F)$ indirgenmiş kütledir (m_F fermiyon kütlesidir). Böyle bir sistem için Hamiltonian operatörü:

$$\hat{H} = \hat{T}_B + \hat{T}_F + \hat{V}_B + \hat{V}_F + \hat{W}_{BB} + \hat{W}_{BF}, \tag{3.4}$$

şeklindedir. Burada ki kinetik ve potansiyel enerji operatörleri;

$$\hat{T}_B = -\int dr\hat{\Phi}^{\dagger}(r)\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m_B}\hat{\Phi}(r); \quad \hat{V}_B = \int dr\hat{\Phi}^{\dagger}(r)V_B\hat{\Phi}(r),$$

$$\hat{T}_F = -\int dr\hat{\Psi}^{\dagger}(r)\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m_F}\hat{\Psi}(r); \quad \hat{V}_F = \int dr\hat{\Psi}^{\dagger}(r)V_F\hat{\Psi}(r),$$

$$\hat{W}_{BB} = \frac{1}{2}\int\int drdr'\hat{\Phi}^{\dagger}(r)\hat{\Phi}^{\dagger}(r')U_{BB}\hat{\Phi}(r')\hat{\Phi}(r),$$

$$\hat{W}_{BF} = \int\int drdr'\hat{\Phi}^{\dagger}(r)\hat{\Psi}^{\dagger}(r')U_{BF}\hat{\Psi}(r')\hat{\Phi}(r). \tag{3.5}$$

ifadeleri ile verilir.

Burada $\hat{T}_B$ ve $\hat{T}_F$ bozon ve fermiyon kinetik enerjilerini gösterir. $\hat{V}_B(r)$ ve $\hat{V}_F(r)$ bozon ve fermiyon tuzaklama potansiyellerini gösterir $\hat{W}_{BB}$ ve $\hat{W}_{BF}$ ise etkileşim enerjilerini veren operatörlerdir. $\hat{\Phi}(r)$ ve $\hat{\psi}(r)$ bozon ve fermiyon alan operatörleridir.

Sistemin taban durumu $|g\rangle$ olsun. Bu durumda $E_0 \overset{def}{=} < g|\hat{H}|g >$ taban durum enerjisini, $n_B(r) \overset{def}{=} < g|\hat{\Phi}^{\dagger}(r)\hat{\Phi}(r)|g >$ bozon yoğunluğunu ve $n_F(r) =< g|\hat{\Psi}^{\dagger}(r)\hat{\Psi}(r)|g >$ fermiyon yoğunluğunu verir. Hohenberg-Kohn teoremi, etkileşim potansiyelleri düşünüldüğünde taban durumu enerjisinin sadece yoğunluklara bağlı olduğunu garanti eder. Genel olarak $E_0 = E_0[n_B, n_F]$ fonksiyonelinin tam açık ifadesi bilinmemektedir. Fakat Kohn-Sham yaklaşımı takip edilerek oldukça iyi sonuçlar elde edilebilir.

Bu çerçevede taban durum enerji fonksiyoneli;

$$E_0 = T_B^{ref}[n_B, n_F] + T_F^{ref}[n_B, n_F] + \int drV_B n_B + \int drV_F n_F$$

$$+ \frac{g_{BB}}{2}\int drn_B^{\,2} + g_{BF}\int drn_B n_F + E_{XC}[n_B, n_F], \tag{3.6}$$

şeklinde ifade edilebilir.

Kohn-Sham formalizmi için referans sisteminde bozonlar için $T_B^{ref}[n_B, n_F]$ ve fermiyonlar için $T_F^{ref}[n_B, n_F]$ enerji fonksiyonellerinin kinetik kısımları aşağıdaki gibi tanımlanmıştır:

$$T_B^{ref}[n_B, n_F] = -N_B \int d^3 r \phi^*(r) \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_B} \phi(r),$$

$$T_F^{ref}[n_B, n_F] = -\sum_{i=1}^{N_F} \int d^3 r \psi_i^*(r) \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_F} \psi_i(r), \tag{3.7}$$

burada N_B ve N_F bozonların ve fermiyonların toplam sayılarıdır ve $\phi(r)$ ve $\psi_i(r)$ sembolleri etkileşmeyen referans sisteminin $\phi[n_B, n_F](r)$ ve $\psi_i[n_B, n_F](r)$ bozon ve fermiyon fonksiyonel orbitallerinin kısa gösterimidir.

Denk.(3.6) ile verilen taban durum enerji fonksiyonelini minimum yapmak üzere standart varyasyonel hesap kullanılarak aşağıdaki Schrödinger denklemine benzeyen çiftlenmiş denklemler takımı elde edilebilir. Bu denklemler Bozon-Fermiyon sistemlerini tanımlamak için kullanacağımız Kohn-Sham denklemleridir.

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_B} + V_B + \frac{4\pi\hbar^2 a_{BB}}{m_B} n_B + \frac{2\pi\hbar^2 a_{BF}}{m_R} n_F + \frac{\delta E_{XC}}{\delta n_B} \right] \phi = \mu_{B\phi}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_F} + V_F + \frac{2\pi\hbar^2 a_{BF}}{m_R} n_B + \frac{\delta E_{XC}}{\delta n_F} \right] \psi_i = \varepsilon_i \psi_{i,} \tag{3.8}$$

Bu denklemlerde yer alan bozon ve fermiyon yoğunlukları $n_B(r) = N_B |\phi(r)|^2$ ve $n_F(r) = \sum_{i=1}^{N_F} |\psi_i(r)|^2$ şeklindedir. Burada $n_F(r)$ deki toplam, en düşük (ε_i) enerjilere sahip N_F tek parçacık durumları üzerindendir. Şimdi E_{xc} enerjisi için $n_B(r)$ ve $n_F(r)$ yoğunluklarındaki homojen bir sistemin $E_{xc}^{\text{hom}}(n_B(r), n_F(r))$ Exchange-Correlation enerjisi üzerinden bir integrali kullanarak LDA yaklaşımına geçeceğiz.

$$E_{XC}[n_B, n_F] \approx \int dr E_{xc}^{\text{hom}}(n_B, n_F). \tag{3.9}$$

Bu tanımlamayla, fonksiyonel türevler normal kısmi türevlere dönüşür, yani

$$\frac{\delta E_{xc}}{\delta n_B} = \frac{\partial E_{xc}^{\text{hom}}}{\partial n_B}; \frac{\delta E_{xc}}{\delta n_F} = \frac{\partial E_{xc}^{\text{hom}}}{\partial n_F} \tag{3.10}$$

Burada homojen sistemin Exchange-Corelation enerjisi yoğunluğu E_{xc}^{hom} için bozon-fermiyon saçılma uzunluğu a_{BF} nin ikinci mertebesine kadar olan bir ifade türetilmiştir.

$$E_{XC}^{\text{hom}}(n_B, n_F) = \frac{2\hbar^2 a_{BF}^2}{m_R} f(\delta) k_F n_F n_B \tag{3.11}$$

Burada, $k_F = (6\pi^2 n_F)^{1/3}$ fermi momentumuna karşılık gelen dalga sayısı ve $\delta = (m_B - m_F)/(m_B + m_F)$ olmak üzere $f(\delta)$ sadece bozon ve fermiyon kütlesine bağlı boyutsuz fonksiyondur;

$$f(\delta) = 1 - \frac{3+\delta}{4\delta} + \frac{3(1+\delta)^2(1-\delta)}{8\delta^2} \ln \frac{1+\delta}{1-\delta'} \tag{3.12}$$

3.2.Thomas-Fermi Teorisi

DFT teorisinin gelişimi doğrultusunda ilk fikirler Thomas-Fermi (TF) modelinden (Thomas 1927, Fermi 1927) kaynaklanır. TF modeli her ne kadar çok basitleştirilmiş bir model olsa da çok sayıda parçacık içeren sistemler için doğru sonuçlar verir. Bu modeldeki temel varsayım, birçok parçacık sistemindeki parçacık dağılımının istatistiksel olarak ele alınabileceğidir. Buna göre parçacıklar altı-boyutlu faz uzayında ve etkin bir potansiyel alanı için de istatistiksel bir dağılım gösterirler. Etkin potansiyel, sınırlandırıcı potansiyelin ve söz konusu parçacıklar arasındaki etkileşimleri temsil eden bir potansiyelin toplamından oluşur.

TF modeli orijinal olarak elektronlara uygulanmıştır ve elektron yoğunluğunu bulmak için uzayın, çok sayıda l kenar uzunluklu $\Delta V = l^3$ hacimli kübik hücrelerden oluştuğu varsayılır. Her hücrede ΔN tane elektron bulunduğu ve bunların mutlak sıfır sıcaklığında etkileşmeyen fermiyonlar gibi davrandığı düşünülür. Tüm hücreler birbirinden bağımsızdır; ayrıca ΔN sayısı hücreden hücreye değişebilir, ancak bir hücredeki elektron sayısı sabittir.

Böyle bir hücre içindeki bir parçacık için enerji düzeyleri şu şekilde verilir

$$\varepsilon(n_x, n_y, n_z) = \frac{h^2}{8ml^2}\left(n_x^2, n_y^2, n_z^2\right)$$

$$= \frac{h^2}{8ml^2} R^2 \tag{3.13}$$

Burada n_i kuantum sayıları, 0,1,2,3,… gibi tam sayılardan oluşur; denk.(3.13)'deki ikinci eşitlik ise R niceliğini tanımlar. Yüksek kuantum sayılarında, yani büyük R değerleri için, enerjisi ε'den küçük olan ayrık enerji düzeylerinin sayısı yaklaşık olarak faz uzayında kaplanan hacim kadardır ve buradaki enerji seviyeleri için n_i lerin sadece pozitif değerleri söz konusu olduğundan kaplanan hacim R yarıçaplı kürenin 1/8'ine eşittir.

$$\phi(\varepsilon) = \frac{1}{8}\left(\frac{4\pi}{3} R^3\right) = \frac{\pi}{6}\left(\frac{8ml^2\varepsilon}{h^2}\right)^{3/2} \tag{3.14}$$

Buna göre ε ile $\varepsilon + \delta\varepsilon$ aralığındaki enerji düzeylerinin sayısı $(\delta\varepsilon)^2$ ve daha yüksek mertebeli terimler bir kenara bırakılırsa

$$g(\varepsilon)\Delta\varepsilon = \phi(\varepsilon + \delta\varepsilon) - \phi(\varepsilon)$$

$$= \frac{\pi}{4}\left(\frac{8ml^2}{h^2}\right)^{3/2} \varepsilon^{1/2}\delta\varepsilon \tag{3.15}$$

şeklindedir. Burada $g(\varepsilon)$ durum yoğunluğu olarak bilinir. $T \neq 0$ için ε enerjili düzeyin dolu olma olasılığı, $\beta = 1/k_B T$ olmak üzere, Fermi-Dirac dağılım fonksiyonu ile verilir:

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon - \mu)}} \tag{3.16}$$

Burada k_B Boltzmann sabiti, μ ise kimyasal potansiyeldir. Mutlak sıfırda, yani $\beta \to \infty$ için denk.(3.16) ifadesi bir basamak fonksiyonuna dönüşür

$$f(\varepsilon) = \begin{cases} 1, & \varepsilon < \varepsilon_F \\ 0, & \varepsilon > \varepsilon_f \end{cases} \tag{3.17}$$

Burada ε_F Fermi enerjisi olup kimyasal potansiyel μ'nün sıfır-sıcaklık limitidir. Denk.(3.17)'ye göre Fermi enerjisi, mutlak sıfırda, dolu $(\varepsilon < \varepsilon_F)$ ve boş $(\varepsilon > \varepsilon_F)$ yörüngeler arasında kesin bir sınır oluşturur.

Şimdi bir hücredeki toplam enerjiyi bulalım; bunun için, denk.(3.15) ve denk.(3.17) yardımıyla, tüm enerji düzeylerinin katkısını toplarız:

$$\Delta E = 2\int \varepsilon f(\varepsilon) g(\varepsilon)$$

$$= 4\pi \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} l^3 \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon^{3/2} d\varepsilon$$

$$= \frac{8\pi}{5}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} l^3 \varepsilon_F^{5/2} \qquad (3.18)$$

Sonuçta, denk.(3.18) ifadesini buluruz. Buradaki 2 çarpanı spinden kaynaklanmaktadır. Her enerji düzeyinde α ve β spinli iki elektron bulunmaktadır.

Fermi enerjisi ile hücredeki elektron sayısı arasında ise şu bağıntı vardır:

$$\Delta N = 2\int f(\varepsilon) g(\varepsilon) d\varepsilon$$

$$= \frac{8\pi}{3}\left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} l^3 \varepsilon_F^{3/2} \qquad (3.19)$$

Denk.(3.18) ve denk.(3.19)'dan ε_F'yi elimine edersek,

$$\Delta E = \frac{3}{5}\Delta N \varepsilon_F$$

$$= \frac{3h^2}{10m}\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{2/3} l^3 \left(\frac{\Delta N}{l^3}\right)^{5/3} \qquad (3.20)$$

ifadesini buluruz. Her hücredeki elektron yoğunluğu $\rho = \Delta N / l^3 = \Delta N / \Delta V$ olduğundan denk.(3.20) ifadesi kinetik enerjiyi elektron yoğunluğu cinsinden vermektedir. Toplam kinetik enerjiyi bulmak için tüm hücrelerden gelen katkıları toplamalıyız. $\Delta V \to 0$ limitinde $\rho = \Delta N / \Delta V = \rho(\vec{r})$ sonlu kalacağından, toplam yerine integral alırsak atomik birimlerde, aşağıdaki denklemi buluruz.

$$T_{TF}[\rho] = C_F \int \rho^{5/3}(\vec{r}) d\vec{r} \tag{3.21}$$

Burada $C_F = \frac{3}{10}(3\pi^2)^{2/3} = 2{,}871$'dir. (3.21) ifadesi ünlü Thomas-Fermi kinetik enerji fonksiyonelidir.

Şimdi denk.(3.21) ifadesini atomdaki elektronlara uygulayalım. Kinetik enerji gibi, elektron-çekirdek çekici etkileşme enerjisi ve elektron-elektron itici Coulomb etkileşme enerjisi de $\rho(\vec{r})$ elektron yoğunluğunun bir fonksiyonelidir (Parr ve Yang 1989). Böylece bir atomun toplam enerjisini sadece $\rho(\vec{r})$ cinsinden yazabiliriz:

$$E_{TF}[\rho(\vec{r})] = C_F \int \rho^{5/3}(\vec{r}) d\vec{r} - Z \int \frac{\rho(\vec{r})}{r} d\vec{r} + \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(\vec{r}_1)\rho(\vec{r}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \tag{3.22}$$

Denk.(3.22) ifadesi atomlar için Thomas-Fermi modelinin öngördüğü enerji fonksiyonelidir. Bu ifadede değiş-tokuş ve korelasyon terimleri yer almamaktadır.

Toplam elektron sayısı *N*, $\int \rho(\vec{r}) d\vec{r} = N$ 'ye göre şu şekildedir:

$$N = N[\rho(\vec{r})] = \int \rho(\vec{r}) d\vec{r} \tag{3.23}$$

Şimdi göz önüne alınan atomun taban durumu için, elektron yoğunluğunun, denk.(3.23) koşuluna uygun olarak, $E_{TF}[\rho]$ enerji fonksiyonelini minimum yaptığını varsayalım. Denk.(3.22) koşulunun sağlanması, Lagrange çarpanları metoduyla gerçekleştirilebilir. Başka bir deyişle taban-durumu elektron yoğunluğu aşağıdaki varyasyon ilkesini sağlamalıdır:

$$\delta\left\{E_{TF}[\rho] - \mu_{TF}\left(\int \rho(\vec{r}) d\vec{r} - N\right)\right\} = 0 \tag{3.24}$$

Bu ise bizi Euler-Lagrange denklemine götürür (Parr ve Yang 1989):

$$\mu_{TF} = \frac{\delta E_{TF}[\rho]}{\delta \rho(\vec{r})} = \frac{5}{3} C_F \rho^{2/3}(\vec{r}) - \phi(\vec{r}) \tag{3.25}$$

Burada $\phi(\vec{r})$, $\vec{r}$ noktasındaki elektrostatik potansiyel olup çekirdek ile tüm elektron dağılımından kaynaklanmaktadır:

$$\phi(\vec{r}) = \frac{Z}{r} - \int \frac{\rho(\vec{r}_2)}{|\vec{r} - \vec{r}_2|} d\vec{r}_2 \tag{3.26}$$

TF modelinde denk.(3.25) ifadesi denk.(3.23) ile verilen koşul dikkate alınarak çözülür ve buradan elde edilen elektron yoğunluğu denk.(3.22)'de yerine konularak toplam enerji bulunur.

Ne yazık ki TF modeli, moleküllere uygulandığında başarısız olmaktadır. Bu başarısızlığın temelinde TF modelinin istatistiksel dağılımın geçerli olduğu varsayımına dayalı olması yatar. İlke olarak bu varsayım ancak çok fazla sayıda parçacık içeren sistemlere uygulandığı zaman geçerli olur. TF modelinin taban durumları için DFT içerisinde bir ilk yaklaşım olarak değerlendirilebileceği gösterilmiştir (Hohenberg ve Kohn 1964).

4. SAYISAL HESAPLAMALAR

Şimdi küresel simetrik bir sistem için (3.8) denkleminde verilen Kohn-Sham denklem takımını, bu tanımladığımız E_{XC}^{hom} enerjisi ile birlikte ele alacağız. Burada hem bozonlar hem de fermiyonlar için tuzaklama potansiyellerinin küresel simetriye sahip olduğunu varsayarsak bu potansiyeller sırasıyla $V_B(r)=\left(m_B\omega_B^2 r^2\right)/2$ ve $V_F(r)=\left(m_F\omega_F^2 r^2\right)/2$ şeklinde yazılabilir. Tuzaklama potansiyelinin küresel simetriye sahip olması sonucunda dalga fonksiyonları da $Y_{lm}(\Theta,\Phi)$ küresel harmonik fonksiyonları cinsinden

$$\phi(r)=\frac{u(r)}{r}Y_{00}\quad ;\quad \psi_{nlm}(r)=\frac{u_{nl}(r)}{r}Y_{lm}, \tag{4.1}$$

şeklinde yazılabilir. Burada $u(r)$ ve $u_{nl}(r)$ dalga fonksiyonunun radyal kısmıdır ve $\int dru^2(r)=1,\ \int dru_{nl}^2(r)=1$ şeklinde normalize edilmişlerdir. Bu durumda (3.8) denklemiyle verilen Kohn-Sham denklemleri küresel simetrik bir sistem için aşağıdaki şekli alır

$$\left[-\frac{1}{2m_B}\frac{d^2}{dr^2}+\frac{m_B}{2}\omega_B^2 r^2+\frac{4\pi a_{BB}}{m_B}n_B(r)+\frac{4\pi a_{BF}}{m_R}n_F(r)+\frac{2a_{BF}^2 f(\delta)}{m_R}n_F(r)k_F(r)\right]u(r)=\mu_B u(r) \tag{4.2a}$$

$$\left[-\frac{1}{2m_F}\frac{d^2}{dr^2}+\frac{l(l+1)}{2m_F r^2}+\frac{m_F}{2}\omega_F^2 r^2+\frac{2\pi a_{BF}}{m_R}n_B(r)+\frac{8a_{BF}^2 f(\delta)}{3m_R}n_B(r)k_F(r)\right]u_{nl}(r)=\varepsilon_{nl}u_{nl}(r) \tag{4.2b}$$

Burada n radyal fonksiyonların düğüm sayılarını gösterir. Normalize edilmiş yoğunluk dağılımları $\tilde{n}_B(r)=4\pi r^2 n_B(r)$ ve $\tilde{n}_F(r)=4\pi r^2 n_F(r)$ radyal fonksiyonlar cinsinden şöyle yazılabilir;

$$\tilde{n}_B(r)=N_B u^2(r) \tag{4.3}$$

$$\tilde{n}_F(r)=\sum_{\varepsilon_{nl}\le\mu_F}(2l+1)u_{nl}^2(r) \tag{4.4}$$

4.1. Kohn-Sham Denklemlerinin Çözümü

Denk.(4.2)'de verilen Kohn-Sham denklemleri ile yukarıdaki (4.3) ve (4.4) denklemleri kapalı, lineer olmayan bir diferansiyel denklem takımı oluşturur. Bu diferansiyel denklemler takımının çözümü iteratif bir yaklaşımla elde edilebilir. Başlangıç için bozon-fermiyon etkileşimi göz önüne alınmadan Thomas-Fermi yaklaşımı kullanılarak bulunan yoğunluk dağılımları $n_B(r)$ ve $n_F(r)$ için iyi bir tahmin oluşturulur. Sonra bu ilk tahminler denklem (4.2)'deki bozon ve fermiyon yoğunlukları olarak kullanılır ve bu durumda (4.2) denklemleri lineer özdeğer denklemlerine indirgenir. Bu denklemler uygun bir sayısal yöntemle çözülerek $u(r)$ ve $u_{n\ell}(r)$ radyal fonksiyonları elde edilir. Bu çalışmada denk.(4.2) ile verilen diferansiyel denklemlerin çözümü için Numerov Yöntemi kullanılırken özdeğerin belirlenmesi için basit sekant (kiriş) algoritması kullanılmıştır. $u(r)$ ve $u_{n\ell}(r)$ radyal fonksiyonları bilindiğinde ε_{nl} enerjileri en düşük yeterince $u_{n\ell}(r)$ radyal fonksiyonu kullanılarak (4.3) ve (4.4) denklemlerinden yeni bozon ve fermiyon yoğunluk dağılımları belirlenir.

Elde edilen bu yoğunluk dağılımları başlangıçtaki dağılımlarla karşılaştırılır. Eğer bunlar yaklaşık olarak aynı ise kendi içinde tutarlı bir çözüme ulaşılmış demektir ve işlem sona erer. Eğer değilse, başlangıçtaki ve sonuçtaki yoğunlukların bir dış bükey kombinasyonu kullanılarak $n_{B(F)}^{yeni}(r) = (1-x)n_{B(F)}^{ilk} + xn_{B(F)}^{sonuç}$ şeklinde yeni bozon ve fermiyon yoğunlukları tanımlanır, istenilen seviyede tutarlılık sağlanana kadar bu işlemler tekrarlanır. Burada x sayısı yakınsama sağlanacak şekilde 0 ile 1 arasında seçilir.

Eğer fermiyonların sayısı N_F büyükse bu işlem son derece zaman alıcıdır ve dahil edilebilecek olan ε_{nl} durumlarının sayısı sınırlandırılmalıdır. Bu sebeple $N_F \geq 1000$ olduğunda fermiyon dağılımının elde edilmesi için Thomas-Fermi yaklaşımının kullanılması daha uygun olacaktır.

4.2. Numerov Yöntemi

Bir kutuda parçacık ve harmonik osilatör gibi bir kaç potansiyel haricinde, fizikte karşılaşılan potansiyellerin birçoğu için Schrödinger denkleminin çözümünün analitik olarak verilmesi mümkün değildir. Bundan dolayı Schrödinger denkleminin

çözümü için birçok sayısal yöntem geliştirilmiştir. Schrödinger denklemini çözmek için en çok kullanılan yöntemlerden birisi de Numerov yöntemidir (Avdelas ve ark. 2000, Bieniasz 2002).

Numerov yöntemi, bir boyutlu, değişken katsayılı ikinci mertebe diferansiyel denklemlerin sayısal çözümü için 1920'li yıllarda Numerov isimli bir Rus astronom tarafından bulunmuş olan bir yöntemdir. O günden günümüze kadar bu yöntem üzerine birçok çalışma yapılmıştır, bir boyutlu Schrödinger denkleminin çözümünde hızlı ve yüksek hassasiyetli sonuçlar vermesi sebebiyle bu yöntem özellikle son on yılda birçok çalışmada kullanılmıştır (Avdelas ve ark. 2000, Killingbeck ve Jolicard 1999, Tselyaev 2004). Bir yöntemin kalitesi yöntemin doğruluğu ve hesaplama etkinliğinden anlaşılır. Numerov yönteminin bu alanlardaki başarısı bilinmekle birlikte geliştirilmesi ve çok boyutlu sistemlere de uygulanabilmesi yönünde halen aktif çalışmalar devam etmektedir (Tsitouras ve Simos 2002, Tsitouras 2003).

4.2.1. Zamandan Bağımsız Schrödinger Denkleminin Numerov Yöntemi ile Çözümü

Schrödinger denklemi bir kutudaki parçacık ve harmonik osilatör gibi çok az örnek için tam olarak analitik çözülebilmektedir. Birçok potansiyel enerji fonksiyonu $V(x)$ için bir parçacıklı bir boyutlu Schrödinger denklemi tam olarak çözülememektedir. Numerov yöntemi rastgele bir $V(x)$ poyansiyeli için bir boyutlu bir parçacıklı Schrödinger denkleminin bağlı durumlarına karşılık gelen özdeğer ve özfonksiyonları elde etmek için kullanılabilir. Şimdi bu amaçla kullanacağımız Numerov yönteminin kısa bir tanımını vereceğiz.

Schrödinger denklemini çözmek istediğimiz aralığı çok sayıda eşit aralıklı adıma bölerek bir örgü oluşturduğumuzu ve örgü noktalarına karşılık gelen her bir x değerini x_n şeklinde etiketlediğimizi varsayalım. Bu durumda herhangi bir $f(x)$ fonksiyonunun böyle bir örgü noktası etrafında Taylor serisine açılımı

$$f(x_n \pm s) = f(x_n) \pm f'(x_n)s + f''(x_n)s^2 \pm \frac{1}{6} f'''(x_n)s^3 + \frac{1}{24} f^{(iv)}(x_n)s^4 \pm \frac{1}{120} f^{(v)}(x_n)s^5 + \ldots\ldots \quad (4.5)$$

şeklinde verilir. Bu eşitliği bir $+s$ bir de $-s$ için yazarak taraf tarafa toplarsak ve s in yeterince küçük olduğu varsayımı çerçevesinde s^6 ve daha sonraki ifadeleri ihmal edersek

$$f(x_n + s) + f(x_x - s) \approx 2f(x_n) + f''(x_n)s^2 + \frac{1}{12} f^{(iv)}(x_n)s^4 \quad (4.6)$$

ifadesini elde ederiz. Eğer oluşturduğumuz örgünün adım aralığını s olarak alırsak $x_n - s$, x_n ve $x_n + s$ ardışık iki aralığın uç noktalarıdır. Bu noktalardaki f fonksiyonunun değerlerini ise

$$f_{n-1} \equiv f(x_n - s), \quad f_n \equiv f(x_n), \quad f_{n+1} \equiv f(x_n + s)$$

biçimin de etiketleyelim. Bu etiketlemeye göre denk.(4.6)

$$f_{n+1} \approx -f_{n-1} + 2f_n + f_n''s^2 + \frac{1}{12} f_n^{(iv)}s^4 \quad (4.7)$$

halini alır. Bu noktada biz fonksiyon olarak dalga fonksiyonları ile ilgileneceğimiz için denk.(4.7)'de f yerine ψ yerleştirelim.

$$\psi_{n+1} \approx -\psi_{n-1} + 2\psi_n + \psi_n''s^2 + \frac{1}{12}\psi_n^{(iv)}s^4 \quad (4.8)$$

Denk.(4.8)'i kullanabilmek için ψ'' ve $\psi^{(iv)}$ün değerlerini bilmemiz gerekiyor. Bunun için Schrödinger denklemini kullanırsak

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

$$\psi'' = m\hbar^{-2}[2V(x) - 2E]\psi$$

$$\psi'' = G\psi \quad (4.9)$$

$$G'' = m\hbar^{-2}[2V(x) - 2E] \quad (4.10)$$

ifadelerini elde ederiz.

$\psi^{(iv)}s^4$ ifadesini elde edebilmek için denklem (4.8)'de f gördüğümüz yere ψ'' yazarız. Daha sonra eşitliğin her iki yanını s^2 ile çarparsak

$$\psi''_{n+1}s^2 \approx -\psi''_{n-1}s^2 + 2\psi''_n s^2 + \psi_n^{(iv)}s^4 + \frac{1}{12}\psi_n^{(iv)}s^6 \tag{4.11}$$

ifadesine ulaşırız. Ayrıca son ifade de s^6'lı terimleri yine ihmal edersek ve $\psi^{(iv)}s^4$ terimini eşitliğin sol tarafına çekersek

$$\psi_n^{(iv)}s^4 \approx \psi''_{n+1}s^2 + \psi''_{n-1}s^2 - 2\psi''_n s^2 \tag{4.12}$$

sonucunu elde ederiz. Denk.(4.9) ile verilen ifadeyi burada kullanırsak eşitliğin son hali

$$\psi_n^{(iv)}s^4 \approx G_{n+1}\psi_{n+1}s^2 + G_{n-1}\psi_{n-1}s^2 - 2G_n\psi_n s^2 \tag{4.13}$$

olur. Denk.(4.8)'de denk.(4.9) ve (4.13)'ü kullanırsak

$$\psi_{n+1} \approx -\psi_{n-1} + 2\psi_n + 2G_n\psi_n s^2 + \frac{1}{12}\left[G_{n+1}\psi_{n+1}s^2 + G_{n-1}\psi_{n-1}s^2 - 2G_n\psi_n s^2\right] \tag{4.14}$$

denklemini elde ederiz. Bu son denklemde ψ_{n+1}'i çözersek

$$\psi_{n+1} \approx \frac{2\psi_n - \psi_{n-1} + 5G_n\psi_n s^2/6 + G_{n-1}\psi_{n-1}s^2/12}{1 - G_{n+1}s^2/12} \tag{4.15}$$

sonucunu buluruz. Bu denklem bize, verilen iki başlangıç değerinden başlayarak (ψ_0 ve ψ_1), $n = 2,3,4\ldots$ için bütün ψ_n değerlerini hesaplayabilme imkanı sağlar.

Denk.(4.15)'i kullanabilmek için ilk önce tahmini bir E_{tah} enerji değeri alırız. Tahmini enerji özdeğeri için ψ_0 ve ψ_1 değerleri denk.(4.15)'de kullanılarak ψ_2 bulunur. ψ_1 ve ψ_2 kullanılarak ψ_3 bulunur. Bu şekilde ilerleyerek dalga fonksiyonunun verilen aralığın diğer ucundaki değeri elde edilir. Bu değerin, aralığın bu ucu için verilen sınır koşulunu sağlaması gerekir. Eğer sağlamıyorsa tahmini enerji değeri E_{tah} için daha uygun bir değer belirleyerek yeni E_{tah} değeri için bütün işlemleri tekrarlarız. Bu noktada yeni enerji değerlerinin belirlenmesi için değişik algoritmalar uygulanabilir.

Bu şekilde ilerlenerek diğer uçta da sınır koşulu sağlandığında enerji özdeğeri ve bu özdeğere karşılık gelen dalga fonksiyonu elde edilmiş olur.

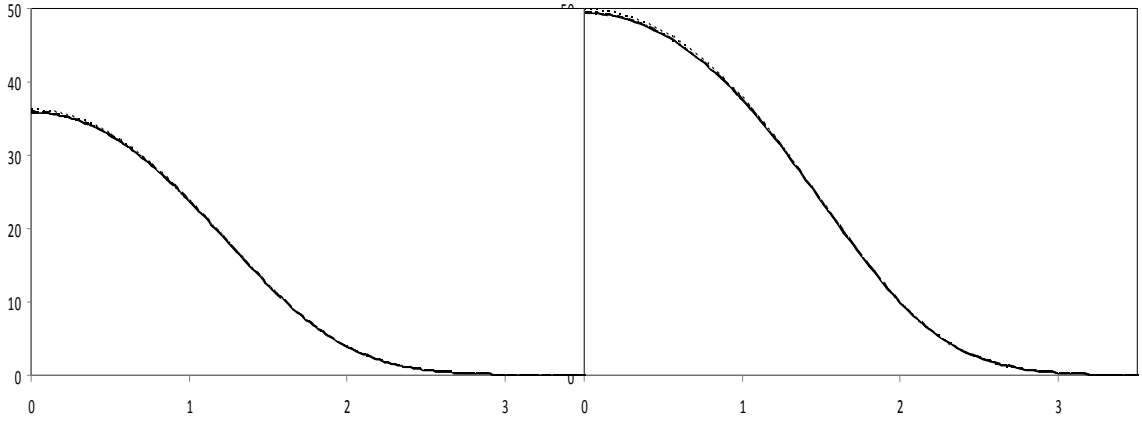
Bu şekilde elde edilen dalga fonksiyonları önce normalize edilir. Daha sonra en küçük enerji özdeğerinden başlanarak fermiyonlar sırası ile her bir enerji seviyesine seviyelerin açısal momentumun z bileşeninden gelen $2\ell+1$ dejenerasyon katsayısı da göz önünde bulundurularak denk.(4.3) ten yeni bozon yoğunluk dağılımı ve denk.(4.4) ten yeni fermiyon yoğunluk dağılımı elde edilir. Bundan sonra yukarıda belirtildiği gibi bu yoğunluk dağılımlarının yakınsamasına bakılır.

5. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Bu bölümde, bozon fermiyon karışımları için üçüncü bölümde denk.(3.8)'de verilen çiftlenmiş diferansiyel denklemlerin dördüncü bölümde tartışılan algoritmaların kullanımıyla çözülmesi ile elde edilen sonuçlar sunulacaktır. Diferansiyel denklemlerin sayısal olarak çözülmesi aşamasında karşılaşılan Schrödinger denklemi benzeri özdeğer denkleminin çözümünde Numerov yöntemi kullanılmıştır.

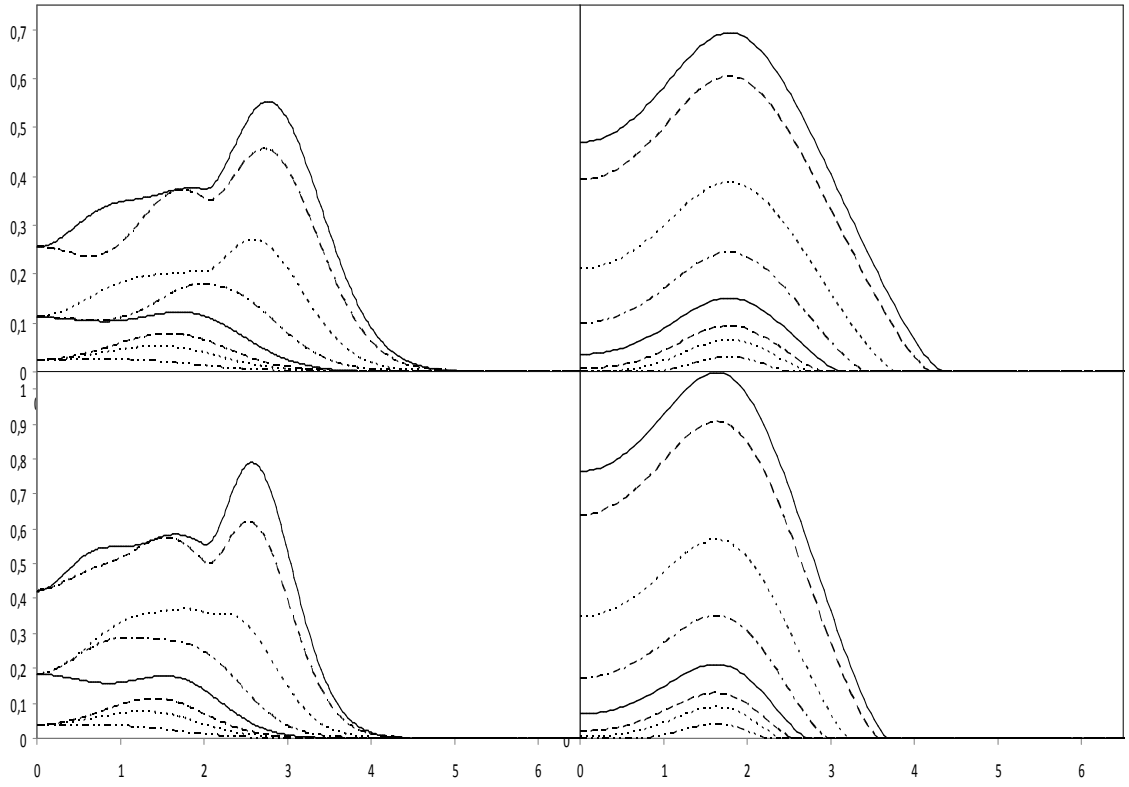
Tüm hesaplamalarda bozon-bozon etkileşimi için s dalgası saçılma uzunluğu olarak Rubidyum atomları ile yapılan deneylerde gözlenen $a_{BB} = 4.33x10^{-3}\ell_B$ değeri kullanılmıştır, burada ℓ_B bozonlar için harmonik tuzağın karakteristik uzunluğudur. Tuzakta bulunan fermiyonların spinlerinin $\frac{1}{2}$ olduğu varsayılmıştır ve tuzak potansiyeli spin ile doğru orantılı olduğundan fermiyonlar için tuzaklama potansiyeli bozonlar için olan potansiyelin yarısı kadar alınmıştır. Tüm denklemler bozonlar için harmonik tuzağın karakteristik uzunluğu ($\ell_B = \sqrt{\frac{\hbar}{m_B\omega_B}}$) ve karakteristik enerji ($\hbar\omega_B$) cinsinden ifade edilmiştir. Bu şartlar altında bozon ve fermiyonların uzaysal dağılımları tuzak içerisinde bulunan bozon ve fermiyon sayılarının yanı sıra fermiyon ve bozon kütleleri oranı $\eta_m = \frac{m_F}{m_B}$ ve bozon-fermiyon etkileşim parametresi ile bozon-bozon etkileşim parametresinin oranına $\eta_a = \frac{a_{BF}}{a_{BB}}$ bağlıdır.

Parçacıklar arasındaki etkileşim parametrelerinin oranının, parçacıkların kütleleri oranının değişik değerleri için ve değişik bozon ve fermiyon sayıları için hesaplamalar, hem Thomas-Fermi yaklaşımı kullanılarak hem de doğrudan (3.8) denklemleri çözülerek DFT teorisi çerçevesinde tuzak içerisindeki bozon ve fermiyon dağılımları ile birlikte bozon ve fermiyonlar için kimyasal potansiyeller elde edilmiştir. Elde edilen sonuçlar aşağıda ki grafiklerde sunulmuştur. Yoğunluk dağılımlarının sunulduğu tüm grafiklerde yatay eksen bozonlar için harmonik osilatör uzunluğu ℓ_B cinsinden tuzak merkezinden olan mesafedir düşey eksen ise parçacık yoğunluğunu göstermektedir.



Şekil 5.1 Çeşitli etkileşim parametreleri oranları, kütle oranları ve fermiyon sayıları için tuzak içerisindeki bozon dağılımları. Soldaki panel tuzak içerisinde 500 bozon bulunması ve sağdaki panel tuzak içerisinde 1000 bozon bulunması durumu içindir. (η_a , η_m , N_F) değişkenlerinin (0.5 , 0.5 , 5), (0.5 , 2.0 , 5), (2.0 , 2.0 , 5) (0.5 , 0.5 , 50), (0.5 , 2.0 , 50), (2.0 , 2.0 , 50) değerleri için sonuçlar yer almaktadır.

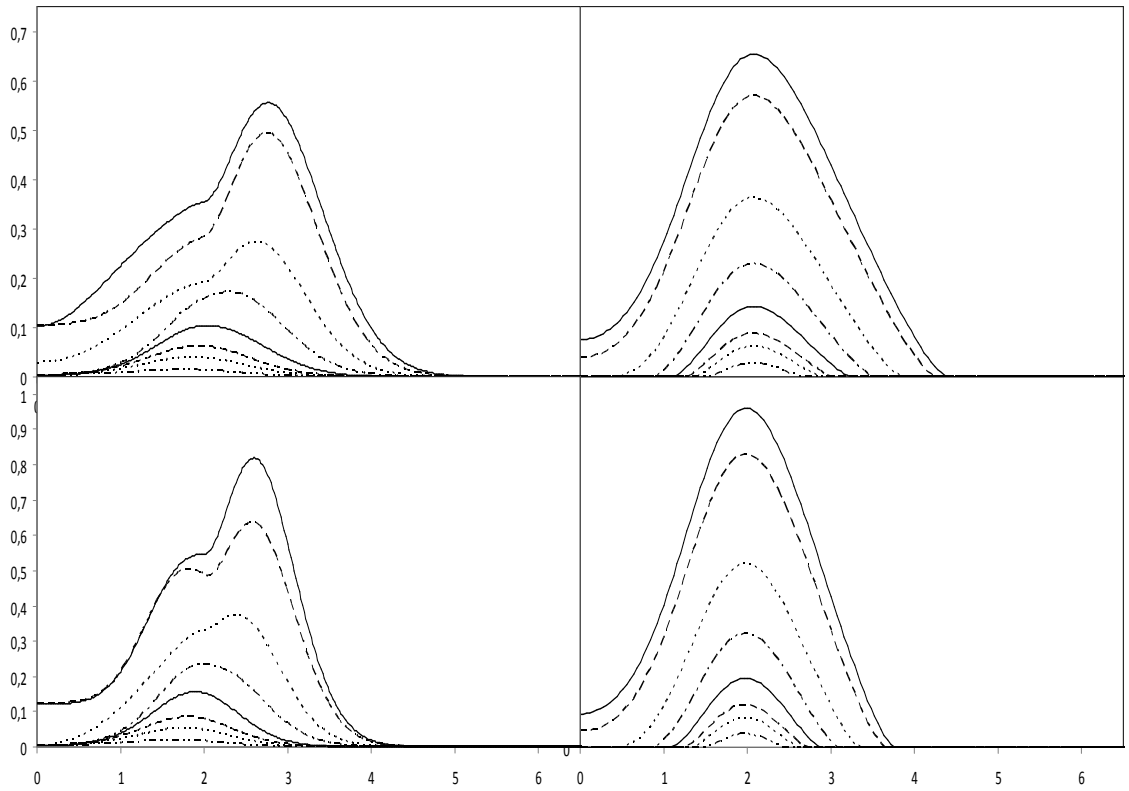
Şekil 5.1 de çeşitli fermiyon sayıları, etkileşim parametreleri oranları ve kütle oranları için tuzak içerisindeki bozon dağılımları sunulmuştur. Soldaki panelde tuzak içerisinde 500 bozon bulunması ve sağdaki panelde tuzak içerisinde 1000 bozon bulunması durumu için değişik kütle oranlarına ve değişik etkileşim parametreleri oranlarına karşılık gelen bozon dağılımları sunulmuştur. Şekilden de görüleceği gibi bu parametrelerin değişimi bozon dağılımını neredeyse etkilememektedir. Grafikte verilen dağılımlar arasında şekilde ayırt edilemeyecek kadar küçük farklılıklar vardır. Benzer durum elde edilen bozon kimyasal potansiyelleri içinde geçerlidir. Ayrıca fermiyon dağılımı için TF yaklaşımının kullanılması da bozon dağılımını etkilememektedir. Dolayısıyla tuzakta bulunan bozonların fermiyonların varlığından çok fazla etkilenmedikleri söylenebilir. Buna karşın bozonların tuzak içerisindeki dağılımları fermiyonlara etki eden net tuzaklama potansiyelini değiştirir. Bu tuzaklama potansiyelinde meydana gelen net değişim etkileşim parametreleriyle doğrudan orantılıdır. Ayrıca fermiyonların kütlelerindeki bir değişim fermiyonlar için karakteristik tuzak uzunluğunu ve dolayısıyla fermiyonların dağılımını güçlü bir şekilde değiştirir. Dolayısıyla yukarıda bahsedilen parametrelerin Fermiyon dağılımları üzerinde daha belirgin etkiler göstermesi beklenir.



Şekil 5.2 N_B =500 ve η_a =1.0 için tuzak içerisindeki fermiyon dağılımları. Her bir paneldeki çizgiler aşağıdan yukarıya doğru sırasıyla N_F =1, 3, 5, 10, 20, 40, 80, 100 içindir. Üstteki iki panelde η_m =1.0 ve alttaki iki panelde η_m =2.0 alınmıştır. Soldaki paneller DFT teorisi kullanılarak, sağdaki paneller ise TF yaklaşımı kullanılarak yapılan hesaplamaların sonuçlarını içermektedir.

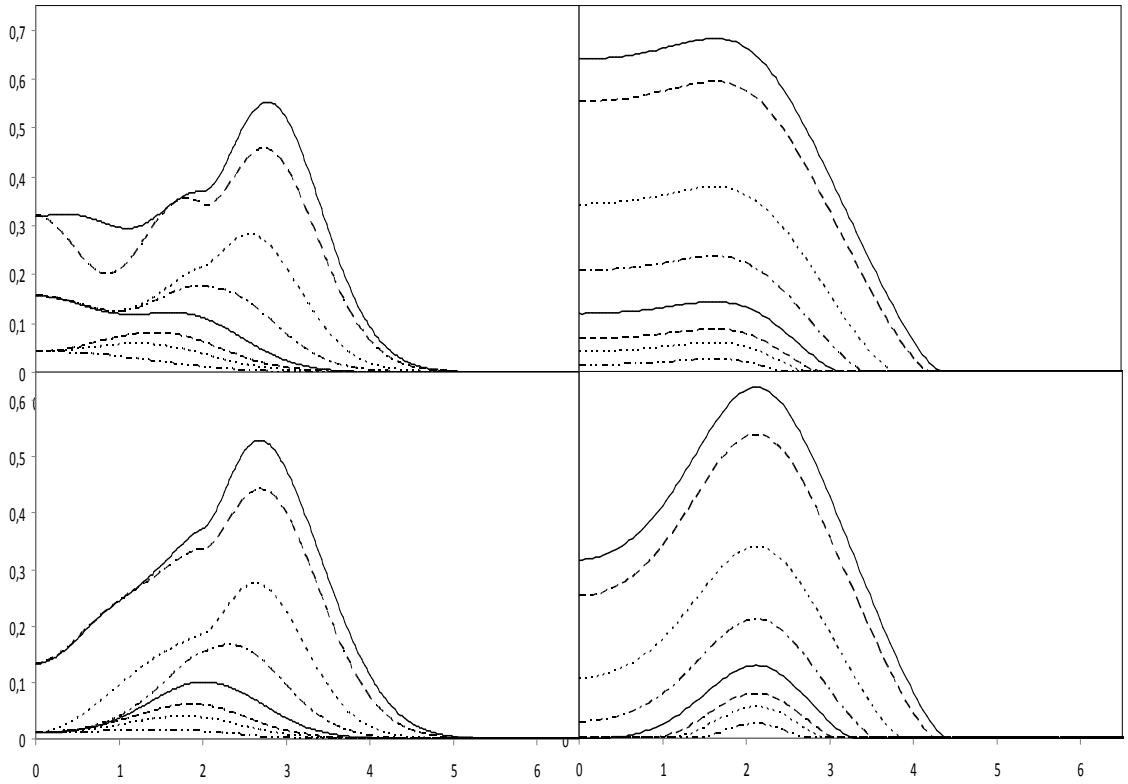
Şekil 5.2 de N_B=500, η_a =1.0 ve değişik fermiyon sayıları için elde edilen sonuçlar sunulmuştur. Üstteki panellerde kütleler oranı η_m =1.0 ve alttaki panellerde η_m =2.0 dır. Soldaki paneller DFT teorisi çerçevesinde elde edilen sonuçları verirken sağdaki paneller TF yaklaşımı kulanılarak elde edilen sonuçları vermektedir. Üst ve alt panellerin karşılaştırılmasından da görüleceği gibi fermiyonların kütlelerinin artması fermiyon dağılımının büzülmesine ve tuzak merkezindeki fermiyon yoğunluklarının artmasına sebep olmaktadır. Sadece s seviyeleri için tuzak merkezinde fermiyon bulunma olasılığı sıfırdan farklı olduğu için tam denklemlerin kullanıldığı duruma karşılık gelen soldaki panellerde tuzak merkezindeki fermiyon yoğunluğu sadece yeni bir s seviyesine bir fermiyonun yerleştiği durumlarda değişmekte ve bu sebeple tuzak merkezindeki yoğunluk kesikli olarak artmaktadır. TF yaklaşımı tabiatı gereği bu kabuk yapısını algılayamamakta ve merkezdeki fermiyon yoğunluğu için sürekli bir değişim

öngörmektedir. Ayrıca şekil 5.2 de solda ve sağda bulunan paneller karşılaştırıldığında TF yaklaşımının fermiyonların daha merkeze toplu olmasını öngördüğü gözlenmektedir. Ortaya çıkan bu hata fermiyon sayısının artması ile de kaybolmamaktadır. TF yaklaşımının fermiyon sistemini homojen bir sistem kabul etmesine karşın burada ilgilendiğimiz sistem sınırlandırılmış bir sistemdir. TF yaklaşımı sınırlardan gelen katkıları hesaba katma yeteneğine sahip olmadığı için bu farklılıklar ortaya çıkmaktadır.



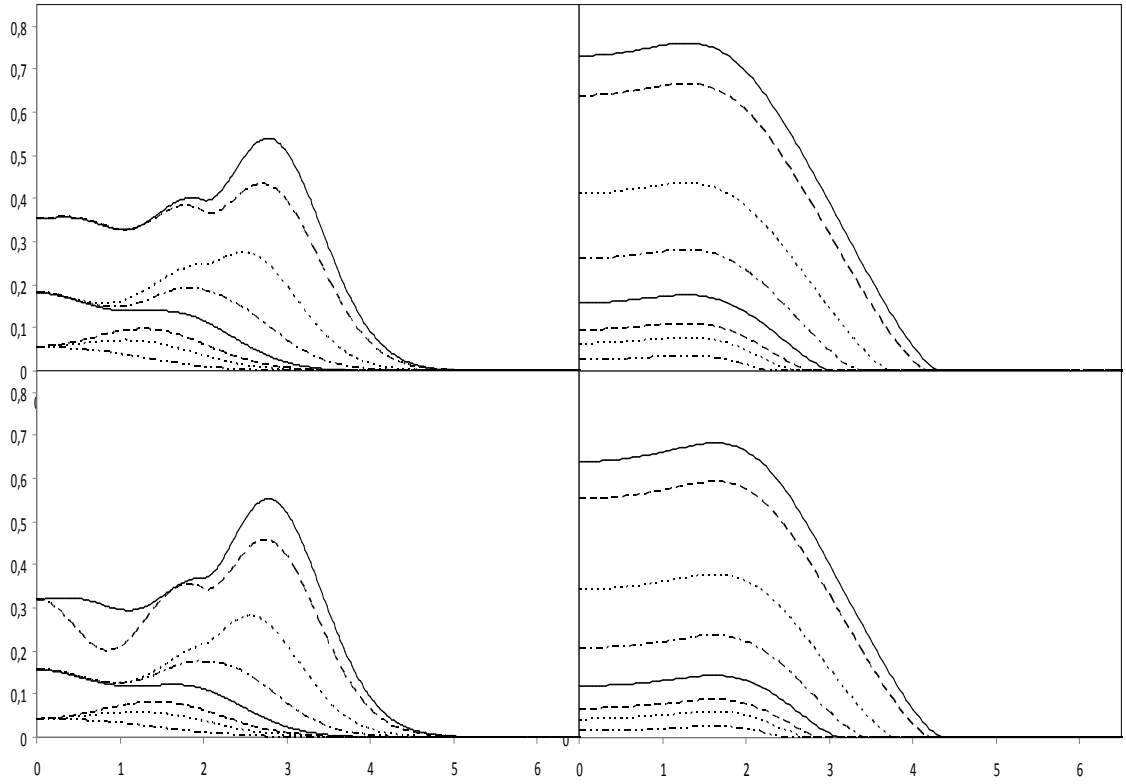
Şekil 5.3 N_B =500 ve η_a =2.0 için tuzak içerisindeki fermiyon dağılımları. Her bir paneldeki çizgiler aşağıdan yukarıya doğru sırasıyla N_F =1, 3, 5, 10, 20, 40, 80, 100 içindir. Üstteki iki panelde η_m =1.0 ve alttaki iki panelde η_m =2.0 alınmıştır. Soldaki paneller DFT teorisi kullanılarak, sağdaki paneller ise TF yaklaşımı kullanılarak yapılan hesaplamaların sonuçlarını içermektedir.

Şekil 5.3 de verilen grafikler etkileşim parametreleri oranının η_a=2.0 olması haricinde şekil 5.2 ile aynıdır. Şekil 5.3 ile şekil 5.2 karşılaştırıldığında bozonlarla fermiyonlar arasındaki etkileşimlerin artması halinde hem TF hesaplamalarında hem de DFT hesaplamalarında fermiyonların merkezden uzaklaştıkları görülmektedir. Etkileşim parametresinin daha da arttığı ve fermiyon kütlesinin daha küçük olduğu durumlarda bozonların ve fermiyonların birbirinden ayrışması ve bozonlar merkezde toplanırken fermiyonların yüzeyde bir kabuk oluşturması beklenebilir. Bu genel tartışmalar çerçevesinde TF yaklaşımından elde edilen sonuçlarla DFT teorisinden elde edilen sonuçlar nitel olarak benzer davranışları göstermekle birlikte, nicel olarak iki yöntem arasında önemli farklar bulunduğu şekil 5.2 ve 5.3 ten açıkça görülmektedir.

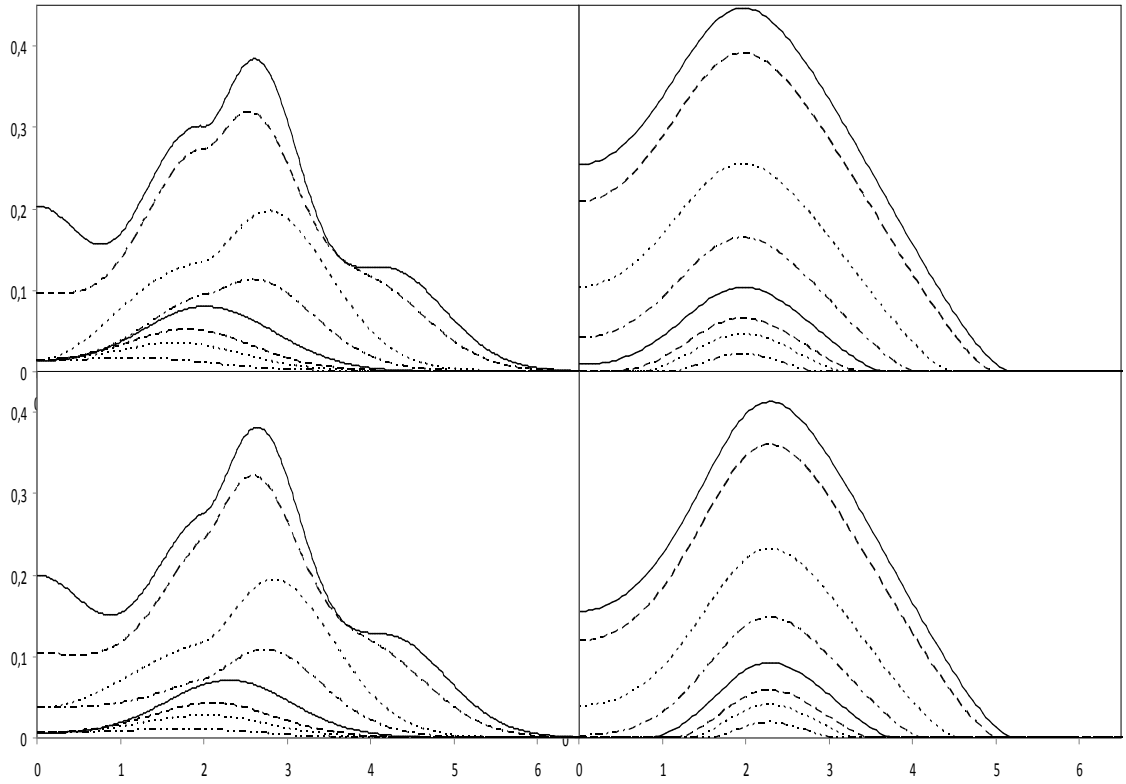


Şekil 5.4 N_B =1000 ve η_m =1.0 için tuzak içerisindeki fermiyon dağılımları. Her bir paneldeki çizgiler aşağıdan yukarıya doğru sırasıyla N_F =1, 3, 5, 10, 20, 40, 80, 100 içindir. Üstteki iki panelde η_a=0.5 ve alttaki iki panelde η_a=1.0 alınmıştır. Soldaki paneller DFT teorisi kullanılarak, sağdaki paneller ise TF yaklaşımı kullanılarak yapılan hesaplamaların sonuçlarını içermektedir.

Bozonlarla fermiyonlar arasındaki etkileşim parametresinin artmasının etkileri şekil 5.4 te daha açık bir şekilde görülebilir. Şekil 5.4 te önceki iki şekle benzer yapıdadır ancak bu sefer tuzakta bulunan bozon sayısı N_B=1000, ve kütleler oranı η_m=1.0 dır. Üstteki panellerde etkileşim parametreleri oranı η_a=0.5 ve alttaki panellerde η_a=1.0, diğer Bu şekilde şekil 5.2 ve 5.3 e benzerdir Etkileşim parametresinin artışıyla birlikte tuzak merkezindeki fermiyon yoğunluğunda güçlü bir çökme gözlenmekte ve fermiyonlar merkezden uzağa doğru yayılmaktadır. Burada da TF ve DFT yaklaşımlarından elde edilen sonuçlar nitel olarak benzemektedir. Ancak DFT teorisinde tuzak merkezindeki fermiyon yoğunluğu çok daha hızlı azalırken, TF yaklaşımı bu kadar güçlü bir tepki göstermemektedir.



Şekil 5.5 η_a=0.5 ve η_m=1.0 için tuzak içerisindeki fermiyon dağılımları. Her bir paneldeki çizgiler aşağıdan yukarıya doğru sırasıyla N_F =1, 3, 5, 10, 20, 40, 80, 100 içindir. Üstteki iki panelde N_B =500 ve alttaki iki panelde N_B =1000 alınmıştır. Soldaki paneller DFT teorisi kullanılarak, sağdaki paneller ise TF yaklaşımı kullanılarak yapılan hesaplamaların sonuçlarını içermektedir.



Şekil 5.6 η_a=1.0 ve η_m=0.5 için tuzak içerisindeki fermiyon dağılımları. Her bir paneldeki çizgiler aşağıdan yukarıya doğru sırasıyla N_F =1, 3, 5, 10, 20, 40, 80, 100 içindir. Üstteki iki panelde N_B =500 ve alttaki iki panelde N_B =1000 alınmıştır. Soldaki paneller DFT teorisi kullanılarak, sağdaki paneller ise TF yaklaşımı kullanılarak yapılan hesaplamaların sonuçlarını içermektedir.

Şekil 5.5 ve Şekil 5.6 da tuzakta bulunan bozon sayısının fermiyon dağılım üzerine olan etkileri incelenmiştir. Şekil 5.5 te η_a=0.5 ve η_m=1.0 dır, şekil 5.6 da ise η_a=0.5 ve η_m=1.0 dır. Her iki şekilde de üstteki panellerde tuzaktaki bozon sayıları N_B=500 ve alttaki panellerde N_B=1000 alınmıştır. Şekil 5.5 ve 5.6 nın incelenmesinden görüleceği gibi tuzak içerisinde bulunan bozon sayısının fermiyon dağılımı üzerindeki etkisi oldukça zayıftır. Buna karşın şekil 5.5 ve şekil 5.6 karşılaştırıldığında daha önce belirtildiği gibi etkileşim parametresinin artması ve fermiyon kütlesinin azalması halinde tuzak merkezinde bulunan fermiyon yoğunluğu hızla düşmektedir.

Sonuç olarak bu çalışmada tuzaklanmış bir bozon-fermiyon karışımının taban durum özellikleri TF ve DFT yaklaşımları kullanılarak incelenmiştir. Bozon sayısı, fermiyon sayısı, bozon-fermiyon ve bozon-bozon etkileşme parametreleri oranı, fermiyon ve bozon kütleleri oranı gibi parametrelere bağlı olarak tuzak içerisinde bulunan bozon ve fermiyon yoğunluklarının nasıl davrandığı belirlenmiştir.

Ayrıca, TF ve DFT yöntemleri ile yapılan hesaplama sonuçları değerlendirilerek TF yaklaşımının uygulanabilirliği, zayıf yönleri ve başarısız olmasının nedenleri tartışılmıştır.

KAYNAKLAR

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

Avdelas, G., Konguetsof, A., Simos, T.E. 2000. A generalization of Numerov's method for the numerical solution of the Schrodinger equation in two dimensions. Computers & Chemistry 24, 577-584.

Best T, Will S, Schneider U ve ark., 2009. Role of Interactions in Rb-87-K-40 Bose-Fermi Mixtures in a 3D Optical Lattice. Physical Review Letters 102, 030408.

Bieniasz, L.K., 2002. Use of the Numerov method to improve the accuracy of the spatial discretisation in finite-difference electrochemical kinetic simulations. Computers & Chemistry 26, 633-644.

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

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

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

Cazalilla, M.A. ve Ho, A.F., 2003. Instabilities in binary mixtures of one-dimensional quantum degenerate gases. Physical Review Letters 91, 150403.

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

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

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

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

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

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

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

Giorgini, S., Pitaevskii, L.P., Stringari, S., 2008. Theory of ultracold atomic Fermi gases. Reviews of Modern Physics 80, 1215-1274.

Girardeau, M.D. ve Minguzzi, A. 2007. Soluble models of strongly interacting ultracold gas mixtures in tight waveguides. Physical Review Letters 99, 230402.

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

Gu, S.J., Cao, J.P., Chen, S. ve ark., 2009. Quantum phase transition and elementary excitations of a Bose-Fermi mixture in a one-dimensional optical lattice. Physical Review B 80, 224508.

Hohenberg, P. ve Kohn W. 1964 Inhomogeneous Electron Gas. Physical Review 136(3B), 864–871.

Iskin, M. ve Freericks, J.K., 2009. Dynamical mean-field theory for light-fermion-heavy-boson mixtures on optical lattices. Physical Review A 80, 053623.

Killingbeck, J.P. ve Jolicard G., 1999. The eighth order Numerov method. Physics Letters A 261, 40-43.

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

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

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

Kragset, S., Babaev, E., Sudbo, A., 2006. Thermal fluctuations of vortex matter in trapped Bose-Einstein condensates. Physical Review Letters 97, 170403.

Mathey, L., Wang, D.W., Hofstetter, W., ve ark. 2004. Luttinger liquid of polarons in one-dimensional boson-fermion mixtures. Physical Review Letters 93, 120404.

Morsch, O., Oberthaler, M., 2006. Dynamics of Bose-Einstein condensates in optical lattices. Reviews of Modern Physics 78, 179-215.

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

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

Pethick, C.J., ve Smith, H. 2001 Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases. 1st ed. Cambridge University Pres. New York, USA

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

Raman, C., Kohl, M., Onofrio, R., ve ark., 1999. Evidence for a critical velocity in a Bose-Einstein condensed gas. Physical Review Letters 83, 2502-2505.

Rizzi, M., Imambekov, A., 2008. of one-dimensional Bose-Fermi mixtures with unequal masses. Physical Review A 77, 023621.

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

Sorensen, O.S., Nygaard, N., Blakie, P.B., 2009. Adiabatic cooling of a tunable Bose-Fermi mixture in an optical lattice. Physical Review A 79, 063615.

Subasi, A.Ll, Sevincli, S., Vignolo, P., ve ark., 2009. Two-dimensional boson-fermion mixtures. Physical Review A 79, 063632.

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

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

Tselyaev, V.I., 2004. A generalized Numerov method for linear second-order differential equations involving a first derivative term. Journal of Computational and Applied Mathematics 170, 103-120.

Tsitouras, C., 2003. Explicit Numerov type methods with reduced number of stages. Computers & Mathematics with Applications 45, 37-42.

Tsitouras, C., Simos, T.E., 2002. High algebraic, high phase-lag order embedded Numerov-type methods for oscillatory problems. Applied Mathematics and Computation 131, 201-211.

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı	**:**	Muammer KIRMIZI
Uyruğu	**:**	T.C.
Doğum Yeri ve Tarihi	**:**	Gökhüyük Köyü/Seydişehir-01.03.1985
Telefon	**:**	(332 586 6015
Faks	**:**	
e-mail	**:**	muammer_kirmizi@hotmail.com

EĞİTİM

Derece		**Adı, İlçe, İl**	**Bitirme Yılı**
Lise	:	Seydişehir Ybancı Dil Ağırlıklı Lisesi, Seydişehir	2003
Üniversite	:	Selçuk Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Konya	2008
Yüksek Lisans	:	Selçuk Üniversitesi, Fen Bilimleri Ensttitüsü, Fizik Anabilim Dalı, Konya	2011
Doktora	:		