



T.C.

SELÇUK ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

OPTİK ÖRGÜDE GENLEŞEN DİPOLAR BOSE GAZLARININ DİNAMİĞİ

Sevda AKTAŞ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Fizik Anabilim Dalı

Temmuz -2013
KONYA
Her Hakkı Saklıdır

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ

OPTİK ÖRGÜDE GENLEŞEN DİPOLAR BOSE GAZLARININ DİNAMİĞİ

Sevda AKTAŞ

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof.Dr. Ülfet ATAV

2013, 68 Sayfa

Jüri
Prof.Dr. Ülfet ATAV
Doç.Dr. Ercan TÜRKKAN
Doç.Dr. Mustafa KOYUNCU

Bu çalışmada harmonik bir dış tuzaklama potansiyeli göz önüne alınarak sistemin büyük bir çoğunluğunun Mott yalıtkan fazda olduğu durum elde edildikten sonra dış tuzaklama potansiyeli hem tek yönde hem de her iki yönde kaldırılarak sistemin adyabatik ve serbest genleşmesi incelenmiştir. Adyabatik genleşmede termodinamik denge korunarak tuzak yavaş yavaş kaldırılırken serbest genleşmede tuzak ani olarak kaldırılmıştır. Hem tek yönde hem de iki yönde gerçekleşen adyabatik genleşmede dipol etkileşimleri yokken sistem her yönde eşit bir yayılım gösterirken dipol etkileşimleri göz önüne alındığında her örgü konumunda ya tam sayıda parçacığın olduğu ya da hiç parçacığın olmadığı yarı kararlı durumlar gözlemlenmiştir. İki yönde serbest genleşmede dipol etkileşimleri yokken parçacıklar optik örgünün köşelerine doğru bir yayılım gerçekleştirirken dipol etkileşimlerinin negatif olması halinde beklendiği gibi çekici etkileşimden dolayı parçacıkların dağılmadığı gözlemlenmiştir. Dipol etkileşimleri pozitif olarak alındığında ise sistemin dağılması beklenirken bunun aksine ilk halini koruduğunu ve parçacıkların dağılmadığı görülmüştür. Sistemi bir arada tutan etkenin tuzak kaldırıldıktan sonra Mott yalıtkan fazının en dışındaki parçacıkların sistemden ayrılırken ters yönde uyguladığı bir itme kuvveti olduğu düşünülmektedir. Tek yönde serbest genleşmede ise dipol etkileşimleri yokken sistemin bant yapısına benzer özellikler gösterdiği ve dipol etkileşimleri varken iki yönde serbest genleşen Bose gazının davranışlarına benzer davranışlar gösterdiği görülmüştür.

Anahtar Kelimeler: Adiyabatik genleşme, Bose –Einstein yoğuşması, Bose-Hubbard Hamiltonyeni, Gutzwiller yaklaşımı, serbest genleşme.

ABSTRACT

MS THESIS

EXPANSION OF A DIPOLAR BOSE GAS IN A 2D OPTICAL LATTICE

Sevda AKTAŞ

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

Advisor: Prof.Dr. Ülfet ATAV
2013, 68 Pages

Jury
Prof.Dr. Ülfet ATAV
Doç.Dr. Ercan TÜRKKAN
Doç.Dr. Mustafa KOYUNCU

In this study a harmonic trapping potential is assumed as a confinement and initial state of the system is prepared in such a way that most of the system is in Mott insulator phase. After the trapping potential is removed in one and in two direction the free and the adiabatic expansion of the system are followed. The trapping potential is removed slowly maintaining the thermodynamic equilibrium for the adiabatic expansion and instantly for the free expansion. For one and two directional adiabatic expansion without the dipole-dipole interactions, the system shows a regular expansion dynamic. But when the dipole-dipole interactions are considered, the system shows a metastable state where each lattice site is occupied by one particle or by none. For two directional free expansion without the dipole-dipole interactions, the system shows an expansion through the corners of the lattice. But for negative dipole-dipole interactions as it is expected the system does not expand and almost maintains the initial state because of the attractive interactions. Surprisingly the system with positive dipolar interactions behaves almost like the system with negative dipolar interactions, i.e. maintains the initial distribution and do not expand. We believe that this is due to the bacward force applied by the few particles emitted from the surface. For one directional free expansion it is seen that the system shows band like structure without the dipole-dipole interactions and that the system shows behaviours like the behaviours it is seen in the two directional expansion when we consider the dipole-dipole interactions.

Keywords: Adiabatic expansion, Bose-Einstein condensation, Bose-Hubbard Hamiltonian, Gutzwiller approach, free expansion.

ÖNSÖZ

Bu çalışma Selçuk Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Anabilim Dalı öğretim üyesi **Prof.Dr.Ülfet ATAV** danışmanlığında Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü' ne yüksek lisans tez çalışması olarak sunulmuştur.

Yüksek lisans eğitimim boyunca ilminden faydalandığım, insani ve ahlaki değerleri ile de örnek edindiğim, yanında çalışmaktan onur duyduğum değerli hocam Prof.Dr. Ülfet ATAV'a bilgi ve tecrübelerinden yararlanırken göstermiş olduğu hoşgörü, ilgi ve alakadan dolayı teşekkürlerimi sunarım.

Ayrıca desteklerini benden hiçbir zaman esirgemeyen aileme de teşekkür ederim.

Sevda AKTAŞ
KONYA-2013

İÇİNDEKİLER

ÖZET ..... **iv**

ABSTRACT ..... **v**

ÖNSÖZ ..... **vi**

İÇİNDEKİLER ..... **vii**

SİMGELER VE KISALTMALAR ..... **viii**

1. GİRİŞ **1**

2. OPTİK ÖRGÜLER VE BOSE-EİNSTEİN YOĞUŞMASI **4**

2.1. Optik Örgüler 4
2.1.1. Bose-Einstein Yoğuşması 7
2.1.1.1. Atomları Tuzaklama ve Soğutma 10
2.1.1.2. Manyetik Tuzaklar 11
2.1.1.4. Magneto-Optik Tuzaklar 13
2.1.1.5. Lazer ile Soğutma 14
2.1.1.6. Buharlaştırarak Soğutma 15

3. BOSE- HUBBARD HAMİLTONYENİ **16**

3.1. Bose-Hubbard Modelinde Süper Akışkan-Mott Yalıtkan Kuantum Faz Geçişi . 20
3.1.1. Dipolar Bose Gazı 26
3.1.1.1. Genişletilmiş Bose-Hubbard Modeli 28

4. HUBBARD MODELLERİ: TEORİK METODLAR **31**

4.1. Gutzwiller Ortalama Alan Yaklaşımı 31
4.1.1. Dinamik Gutzwiller Yaklaşımı 32
4.1.1.1. Perturbative Ortalama Alan Yaklaşımı 34
4.1.1.2. Yarı Kararlı Durumlar (Metastable States) 35

5. SONUÇLAR VE YORUMLAR **38**

5.1. İki Yönde ve Tek Yönde Adyabatik Genleşen Bose Gazının Dinamiği 38
5.1.1. İki Yönde ve Tek Yönde Serbest Genleşen Bose Gazının Dinamiği 45
5.1.1.1. İki Yönde Adyabatik ve Serbest Genleşen Bose Gazının Karşılaştırılması 53
5.1.1.2. Tek Yönde Adyabatik ve Serbest Genleşen Bose Gazının Karşılaştırılması 55

KAYNAKLAR **57**

ÖZGEÇMİŞ **59**

SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler

λ	lazer ışınlarının dalga boyu
ρ	atom yoğunluğu
T	sıcaklık
H	hamiltonyen
$\vec{d}$	elektrik dipol moment vektörü
$\vec{\varepsilon}$	elektrik alan vektörü
E	enerji
α	polarizasyon katsayısı
W	frekans
$\hbar$	plank sabiti
q	dalga numarası
V	etkin potansiyel enerji
V_0	sabit
λ_{dB}	de Broglie dalga boyu
m	kütle
k_B	Boltzman sabiti
ξ	Riemann zeta fonksiyonu
T_c	kritik sıcaklık
N_0	taban durumdaki parçacık sayısı
N	sistemdeki toplam parçacık sayısı
C_i	sabit
μ_i	manyetik moment
B	manyetik alan
μ_B	Bohr magnetonu
e	elektron yükü
m_e	elektron kütlesi
V_{ext}	dış potansiyel enerjisi
$\hat{\psi}$	dalga fonsiyonu
g	parçacıklar arası temas enerjisi
μ	kimyasal enerji
V_{opt}	optik potansiyel enerjisi
V_{ho}	harmonik osilatör enerjisi
π	pi sayısı
ϕ_n	tek parçacık dalga fonksiyonları baz seti
$\hat{a}$	yok etme operatörü
$\hat{a}^+$	yaratma operatörü
w_α	wannier fonksiyonu
J	tünelleme terimi
U	parçacıklar arası etkileşim enerjisi
$\hat{n}_i$	i konumundaki parçacıkların sayı operatörü

U_{dd}	dipol-dipol enerjisi
C_{dd}	dipolar etkileşim sabiti
μ_0	permeabilite
ε_0	permitivite
$V_{i,j}$	farklı konumlardaki dipol etkileşim enerjisi
$f_n^{(i)}$	i konumunun n tane atom tarafından işgal edilme olasılık genliğini
φ_i	i konumundaki düzen parametresi
L	sistemin lagrangianı

Kısaltmalar

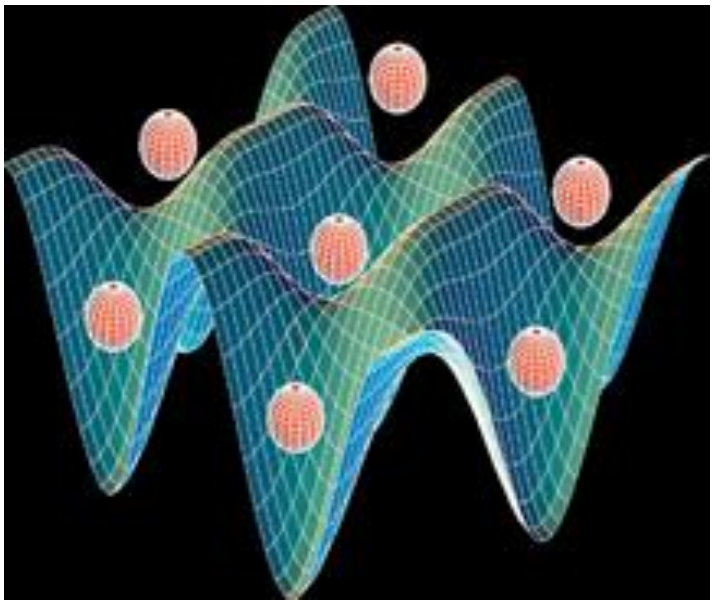
BEY	Bose-Einstein yoğuşması
ext	dış
opt	optik
ho	harmonik osilatör
BH	Bose-Hubbard
dd	dipol-dipol
eBH	genişletilmiş Bose-Hubbard
MF	ortalama alan
H.c	Hermityen konjuge

1. GİRİŞ

Bozonlar spini tam sayı olan parçacıklardır. Aynı tür bozonlardan oluşan bir sistem için dalga fonksiyonu herhangi iki parçacığın yer değiştirmesi durumunda simetriktir. Spinleri tam sayı olmayan ve antisimetrik dalga fonksiyonlarına sahip olan fermiyonların tersine bozonlar aynı tek parçacık durumunu işgal edebilirler.

Bir optik örgü, ters yönde ilerleyen iki veya daha fazla lazer ışınının girişim desenleriyle oluşturulan etkin periyodik bir potansiyeldir. Bu potansiyel içerisinde atomlar hapsedildiğinde kristale benzer bir yapı elde edilir, ve bu nedenle optik örgüler ışığın yapay bir kristali olarak değerlendirilebilir. Lazer ışınlarının dalga boyları (λ_i) kristalin uzaysal periyodikliğini belirler.

1998 yılında, Anderson ve Kasevich tarafından ilk kez bir optik örgüde Bose – Einstein yoğuşması deneysel olarak gerçekleştirildi (Anderson ve Kasevich 1998). Optik örgü sistemlerinde örgü yüksekliği atomların hapsedilmesinde önemli bir yere sahiptir. Örgü yüksekliği kendisini oluşturan lazer alanının yoğunluğu değiştirilerek ayarlanabilir. Bu sistemlerde atomların termal enerjisinin örgünün yükseklik enerjisini geçmemesi ve böylece örgü içerisinde hapsedilebilmesi için gerekli olan ultra soğuk sıcaklıklara ulaşmak zorunludur.



Şekil 1.1. Bir optik örgü potansiyelinin simulasyonu

Periyodik optik örgüdeki ultra soğuk atomların davranışları periyodik kristaldeki elektronların davranışlarına çok benzerdir. Bir kristalde iyonize olmuş atomların Coulomb potansiyeli oluşturması yerine optik örgüde atomlar AC–stark etkisi üzerinden periyodik lazer ışığı ile etkileşir ve etkin bir periyodik potansiyel oluşturur. Her iki sistemde benzerlikler olmasına rağmen optik örgü sistemleri deneysel ve teorik olarak maddenin katı haline karşılık gelen doğal kristal örneklerinden daha basittir. Bu, optik örgülerde safsızlıkların ve örgü bozukluklarının olmaması ile açıklanabilir. Örneğin, doğal kristallerde elektron-phonon etkileşimleri olurken optik örgülerde atom-phonon etkileşimlerinin olmaması safsızlıkların optik örgülerde yer almamasından kaynaklanır.

Bu çalışmada optik örgülerde tutulan ultra soğuk bozonik atomların dinamik davranışının incelenmesi için Bose-Hubbard modeli kullanılmıştır. Hubbard modeli ilk olarak ultra soğuk fermiyonlar içeren bir optik örgü için 1963 yılında J.Hubbard tarafından tanıtılması ve 1968 yılında Lieb ve Wu tarafından analitik olarak bir boyutta çözülmesi ile ortaya çıkmıştır (J.Hubbard 1963, Lieb ve Wu 1968). Benzer şekilde 1989 yılında M.P.A. Fisher ve ark. tarafından bir optik örgüde kısa mesafede etkileşen bozonları tanımlamak amacı ile Bose-Hubbard Hamiltonyeni geliştirilmiştir (M.P.A Fisher ve ark. 1989). Eğer fermiyonların bozonik molekül oluşturacak şekilde birleşmelerine izin verilirse, bir örgüde tuzaklanmış atomik fermi gazının Bardeen-Cooper-Schriffer teorisi ile tanımlanan süper iletken fazından Bose-Einstein yoğuşmasına geçişini tam olarak açıklamak için kullanılan Fermi-Bose-Hubbard Hamiltonyenine ulaşılır.

Geleneksel olarak, katı haldeki kristallerin dengeden kolay bir şekilde çok fazla uzaklaştırılamamasından dolayı Hubbard ve Bose-Hubbard modelleri gibi yoğun madde hamiltonyen çalışmaları hemen hemen yalnızca sistemin durağan taban durum özelliklerine odaklanır. İyonize olmuş atomlar sayesinde elektron üzerinde oluşan potansiyel ya da elektron-elektron etkileşimi değiştirilemez. Sistem parametreleri doğal olarak oluşur ve fizikçilerin ilk görevi sistemin taban durumunu belirlemektir.

Bose-Hubbard modeli kullanılarak düşük sıcaklıklarda optik bir örgü üzerinde bir bozon sisteminin süper akışkan ve Mott yalıtkan fazları arasındaki kuantum faz geçişi ilk kez Fisher ve ark. tarafından tahmin edildi (Fisher ve ark. 1989). Bu kuantum faz geçişi örgü yüksekliğinin kritik bir değerinde gerçekleşir. Yeterince düşük bir örgü potansiyeli için eğer atomların kinetik enerjisi atom-atom enerjisinden fazla ise süper akışkan çok parçacık taban durum elde edilir. Yoğuşma fazladır ve lokalize olmayan tek parçacık orbitallerin geniş ölçüde işgal edilmesinden dolayı sistemde uzun mesafede faz

uyumluluğu vardır. Fakat örgü yüksekliği artırıldıkça tek parçacık durumları her bir örgü noktası etrafında hızlı bir şekilde lokalize olurlar ve böylece Mott yalıtkan çok parçacık taban durum elde edilir.

" ***Belirli bir sıcaklığın altında ve termodinamik dengede olan bir Bose gazı için parçacıkların sıfır olmayan bir oranı en düşük enerjili tek parçacık durumunu işgal etmelidir***" öngörüsü Einstein tarafından 1925 yılında ortaya atılmıştır ve Bose-Einstein yoğuşması (BEY) olarak adlandırılan bu öngörü 1995 yılında deneysel olarak doğrulanmıştır. Termodinamik dengeye ulaşmak için gerekli yoğunluk ve sıcaklıklarda hemen hemen bütün maddelerin katı halde olması Einstein'ın öngörüsünün deneysel olarak ispatlanmasında karşılaşılan temel problem olmuştur. Helyum sıvıları, *"sıvılar yeterince düşük sıcaklıklara kadar soğutulduğunda katılaşır"* kuralına uymazlar. Çünkü ^4He atomu düşük kütlesi ve bir soy gaz olması sebebiyle kristalleşmenin üstesinden gelecek kadar büyük bir sıfır nokta enerjisine sahiptir. Lambda noktası olarak adlandırılan kritik bir sıcaklığın altında sıvı ^4He birçok dikkate değer özeliğe sahip olan süper akışkan fazına geçiş yapar.

Sistemi oldukça düşük yoğunluklara getirme ve sistemin tekrar birleşmesine ve katılaşmasına fırsat vermeyecek şekilde hızlı bir biçimde soğutma çözümü atomik gazlarda Bose–Einstein yoğuşmasını başarılı bir şekilde ortaya çıkardı. Ultra düşük yoğunluklarda BEY elde edebilmek için sistemi oldukça düşük sıcaklıklara getirmek gerekliydi ve bu amaçla lazerle soğutma ve buharlaştırarak soğutma gibi yöntemler geliştirildi. Tipik olarak deneylerde elde edilen yoğunluk ve sıcaklık değerleri $\rho < 10^{15}\ atom/cm^3$, $T < 1\mu K$ şeklindedir ve kritik sıcaklıklar 20nK ile $1\mu K$ arasında yer alır.

Atomik gazlarda Bose-Einstein yoğuşması ilk kez 1995 yılında gerçekleştirildi. JILA (Joint Institute for Laboratory Astrophysics)'da Eric Cornell ve Carl Wiemann ^{87}Rb atomları ile Bose Einstein yoğuşmasını gerçekleştiren ilk grup oldu (Cornell ve ark. 1995). Onları ^{23}Na atomları ile MIT (Massachusetts Institute of Technology)'den Wolfgang Ketterle ve ark. (Wolfgang Ketterle ve ark. 1995) ve ^3Li atomları ile Rice Üniversitesinden Randy Hulet ve ark. takip etti (Randy Hulet ve ark. 1995). MIT'de 1998 yılında atomik hidrojen Dan Kleppner ve ark. tarafından yoğuşturuldu (Dan Kleppner ve ark. 1998). Bose-Einstein yoğuşmasını deneysel olarak elde etmek için ilk kez kullanılan atom hidrojen atomu olmasına rağmen, yapısından dolayı ilk elde edilen

Bose-Einstein yoğuşması hidrojen olamamıştır ama hidrojen üzerine yapılan deneyler, alkali atomların manyetik tuzaklanmasında ve buharlaştırılarak soğutulmasında kullanılan birçok deneysel tekniğin geliştirilmesinde ve başlatılmasında öncü temel bir role sahip olmuştur.

2. OPTİK ÖRGÜLER VE BOSE-EİNSTEİN YOĞUŞMASI

2.1. Optik Örgüler

Bir atom elektrik alana maruz kaldığı zaman elektrik dipol momenti kazanır ve enerji seviyelerinde bir kayma meydana gelir. Bu etki deneylerde lazerler tarafından üretilen güçlü elektrik alanları kullanılarak atomları soğutmak ve bu soğuk atomları tuzaklamak için büyük ölçüde kullanılmaktadır. Bu amaçla kullanılan elektrik alanları zamana bağlı olarak değişir ama biz burada etkileri karşılaştırmak için ilk olarak zaman içerisinde sabit kalan elektrik alanı göz önüne alacağız.

Bir elektrik alanı içerisinde bulunan atomun enerjisi pertürbasyon teorisi kullanılarak hesaplanabilir. Elektrik alan sabitken atom ve elektrik alan arasındaki etkileşim enerjisi dipol yaklaşımı kullanılarak elde edilebilir. Atom ve elektrik alanı arasındaki etkileşim aşağıdaki hamiltonyen ile ifade edilir.

$$H = -\vec{d} \cdot \vec{\varepsilon} \tag{2.1}$$

Burada,

$$d = -e\sum_{j} r_j \tag{2.2}$$

elektronlar için elektrik dipol moment operatörüdür. e elektron yükü ve r_j atomik çekirdeğe göre elektronların konum operatörüdür. Denklemdeki toplam atomdaki bütün elektronlar üzerinden alınır ama genellikle en dış kabuktaki elektronlar önemlidir. Dış alan yokluğunda atomun dipol momenti simetriden dolayı yok olur ve sonuç olarak enerjinin ilk terim katkısı da ortadan kalkar. Enerjinin açılımından gelen ilk terim ikinci mertebedendir ve bu terim taban durum için aşağıdaki gibi ifade elde edilir.

$$\Delta E = -\sum_n \frac{\langle n | H | 0 \rangle^2}{E_n - E_0} \tag{2.3}$$

Bu gösterimde paydadaki enerjiler pertürbe olmayan atom içindir ve toplam bütün üst enerji seviyeleri üzerinden alınır. Taban durum için paydadaki tüm enerjiler pozitif olduğundan dolayı taban durum enerjisinde ikinci terim katkısı negatiftir.

Enerji durumları ayrıca polarizasyon terimi ile de hesaplanabilir. Bunun için elektrik alanda meydana gelen bir değişimden dolayı enerjide meydana gelen değişim kullanılır ve bu enerji değişimi aşağıdaki gibi ifade edilir.

$$dE = -\left\langle \vec{d} \right\rangle \cdot d\vec{\varepsilon} \tag{2.4}$$

Dipol momentin beklenen değeri aşağıdaki gibi ifade edilirse,

$$\left\langle \vec{d} \right\rangle = \alpha \vec{\varepsilon} \tag{2.5}$$

elektrik alanın atomun enerjisine katkısı aşağıdaki gibi olur.

$$\Delta E = -\frac{1}{2}\alpha \varepsilon^2 \tag{2.6}$$

(2.3) ve (2.6) denklemleri kullanılırsa polarizasyon katsayısı α, aşağıdaki gibi elde edilir.

$$\alpha = -\frac{\partial^2 \Delta E}{\partial \varepsilon^2} = \sum_n \frac{2 |\langle n | d_i | 0 \rangle|^2}{E_n - E_0} \tag{2.7}$$

Burada i elektrik alanın yönelimini gösterir.

Elektrik alan zaman içerisinde değişiyor ise aşağıdaki şekilde ifade edilir.

$$\varepsilon(t) = \varepsilon_0 \cos wt \tag{2.8}$$

Bu durumda ise frekansa bağlı polarizasyon katsayısı aşağıdaki gibi elde edilir.

$$\alpha(w) = \sum_n \left|\langle n \mid d_i \mid 0\rangle\right|^2 \left(\frac{1}{E_n - E_0 + \hbar\omega} + \frac{1}{E_n - E_0 - \hbar\omega} \right)$$
$$= \sum_n \frac{2(E_n - E_0)\left|\langle n \mid d_i \mid 0\rangle\right|^2}{(E_n - E_0)^2 - (\hbar\omega)^2} \qquad (2.9)$$

Burada paydadaki enerjiler pertürbe olmayan atomların enerji seviyeleridir, E_0 taban durum enerjisidir ve toplam bütün üst enerji seviyeleri üzerinden alınır.

Bir boyutlu optik örgü oluşturmanın en kolay yolu aynı frekanslı ve zıt yönlerde ilerleyen iki lazer ışınını üst üste bindirmektir. Lineer polarize olmuş iki ışının elektrik alan vektörleri z ekseni yönünde ise toplam alan aşağıdaki gibi ifade edilir.

$$\varepsilon_z = \varepsilon_0 \cos(qx - wt) + \varepsilon_0 \cos(-qx - wt) = 2\varepsilon_0 \cos qx \cos wt \qquad (2.10)$$

Atomun enerji seviyelerindeki kayma aşağıda verilen zamanla değişen ortalama elektrik alanın karesi ile orantılıdır (ortalama elektrik alanı bir osilasyon periyodu üzerinden alınmıştır).

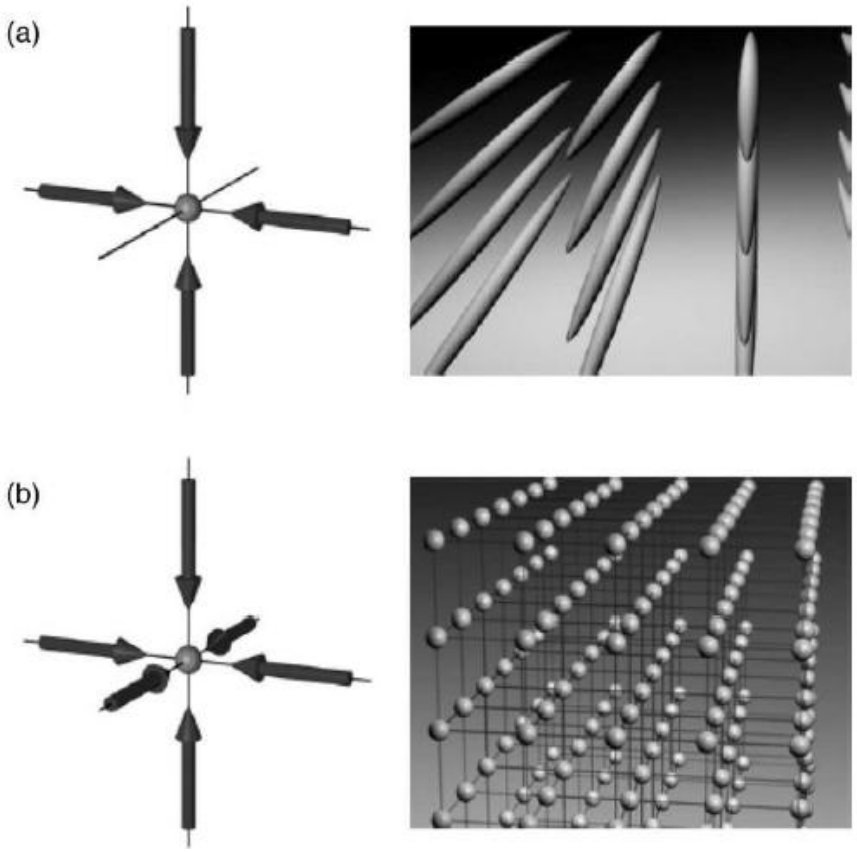
$$\left\langle \varepsilon_z^2 \right\rangle_t = 2\varepsilon_0^2 \cos^2 qx = \varepsilon_0^2 (\cos 2qx + 1) \qquad (2.11)$$

Enerji kayması π/q periyodu ile x yönünde periyodiktir. Periyot lazer ışığının dalga boyu ($\lambda = 2\pi/q$) cinsinden ifade edildiği zaman $\lambda/2$ olur. Bu durumda uzaya bağlı etkin potansiyel enerjiyi aşağıdaki formda yazabiliriz.

$$V = \frac{V_0}{2} \cos 2qx = \frac{V_0}{2} \cos\left(\frac{2\pi x}{d} \right) \qquad (2.12)$$

Burada $d = \pi/q = \lambda/2$ periyot ve V_0 bir sabittir. Enerji bariyer yüksekliği (V_0) lazer yoğunluğuna ve polarizasyon katsayısına bağlıdır.

Aynı şekilde daha yüksek boyutlu optik örgüler farklı dalga vektörlerine sahip ikiden fazla lazer ışını üst üste bindirilerek oluşturulabilir. Şekil 2.1.' de iki ve üç boyutlu optik örgü potansiyel geometrileri yer almaktadır.



Şekil 2.1. optik potansiyel gösterimi. (a) iki boyutlu kare optik örgü. (2) üç boyutlu kübik bir örgü.

2.1.1. Bose-Einstein Yoğuşması

Einstein periodik sınır şartlarıyla L^3 hacimli kübik bir kutu içerisinde etkileşmeyen ve relativistik olmayan N tane bozondan oluşan bir sistemi göz önüne alarak bu sistemin termodinamik limitte yani,

$$\frac{N}{L^3} = \rho = \text{sabit iken} \quad N, \quad L \to \infty \,, \tag{2.13}$$

limitinde belirli bir kritik T_c sıcaklığında, bir faz geçişi yapacağını öngördü. T_c sıcaklığı termal de Broglie dalga boyu $\lambda_{dB}(T) = \left(2\pi\hbar^2 / mk_B T\right)^{\frac{1}{2}}$ cinsinden şöyle tanımlanır.

$$\rho\lambda_{dB}{}^3(T_c) = \xi(3/2) = 2.612.... \tag{2.14}$$

Buradaki $\xi(\alpha) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^\alpha}$ fonksiyonu Riemann Zeta fonksiyonudur.

Bu faz geçişi için düzen parametresi, taban durumdaki parçacıkların sayısının sistemdeki toplam parçacık sayısına oranı N_0/N ile verilir.

T_c' den daha düşük olan sıcaklıklar için bu oran, N_0/N, termodinamik limitte sonlu kalır, buna rağmen T_c' den daha büyük sıcaklıklar için bu oran sıfıra gitmeye eğilimlidir.

$$T > T_c \qquad \frac{N_0}{N} \to 0 \tag{2.15}$$

$$T < T_c \qquad \frac{N_0}{N} \to 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{\frac{3}{2}} \tag{2.16}$$

Bose-Einstein yoğuşması ilk kez rubidyum, sodyum ve lityum atomları ile deneysel olarak gerçekleştirildikten sonra ^1H, ^7Li, ^{23}Na, ^{39}K, ^{41}K, ^{52}Cr, ^{85}Rb, ^{87}Rb, ^{133}Cs, ^{170}Yb, ^{174}Yb ve ^4He atomları ile de gerçekleştirilmiştir. Ayrıca ^6Li ve ^{40}K gibi fermiyonik atomlardan oluşan moleküller de Bose-Einstein yoğuşmasına uğratılmıştır. Seyreltik kuantum gazları parçacık yoğunluğu gibi bazı fiziksel özellikler yönünden diğer gazlar, sıvılar ve katılardan ayrılır. Bose-Einstein yoğuşmasına uğramış bir atomik bulutun merkezindeki parçacık yoğunluğu 10^{13}-10^{15} cm^{-3} iken oda sıcaklığında ve atmosfer basıncında hava içerisindeki moleküllerin yoğunlu 10^{19} cm^{-3}, sıvı ve katılarda atom yoğunluğu 10^{22} cm^{-3} ve atomik çekirdekteki nükleonların yoğunluğu ise 10^{38} cm^{-3} tür.

Böyle düşük yoğunluklu sistemlerde kuantum olaylarını gözlemleyebilmek için sıcaklığın 10^{-5} mertebesinde veya daha düşük olması gerekir. Seyreltik gazlarda Bose-

Einstein yoğuşmasını gözlemleyebilmek amacıyla alkali metal atomlarını soğutmak için lazerle soğutma yöntemleri geliştirilmiştir. Lazerle soğutma yöntemleri istenilen yüksek yoğunluk ve düşük sıcaklıklara ulaşmak için yeterli olamayınca yüksek enerjili atomların tuzaktan uzaklaştırılarak geride kalan atomların soğutulduğu buharlaştırarak soğutma yöntemi geliştirilmiştir.

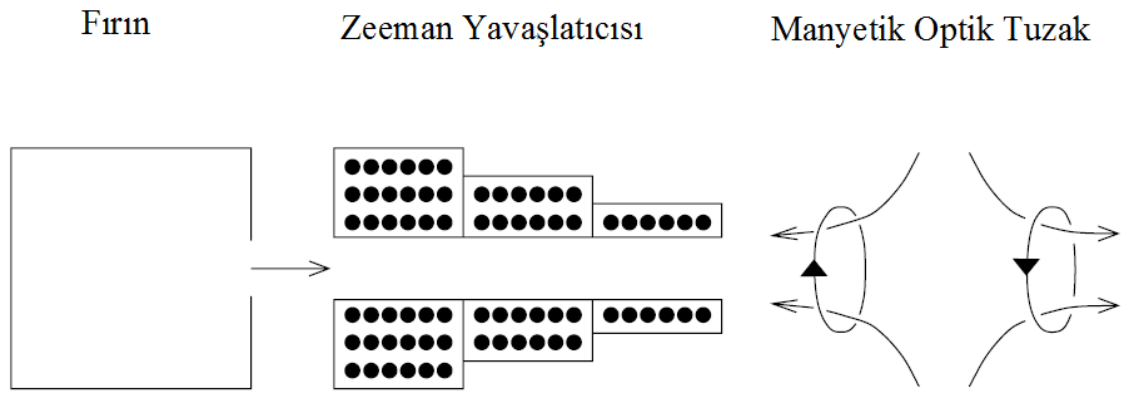
Kuantum olaylarını incelemek için soğuk gaz bulutlarının birçok avantajı vardır. Zorunlu olarak bütün atomların aynı kuantum durumunu paylaştıkları zayıf etkileşimli bir Bose-Einstein yoğuşması, atomlar için Hartree- Fock teorisine benzer bir ortalama alan teorisi ile tanımlanabilir. Atomlar arasındaki güçlü bağ etkileşimlerinden dolayı ^4He sıvısı için ortalama alan yaklaşımı kullanılamaz. Gazlar seyreltik olmasına rağmen düşük sıcaklığın bir sonucu olarak etkileşimler katılarda, kuantum sıvılarında ve çekirdekte meydana gelen olayların seyreltik gazlarda da ortaya çıkmasında önemli bir rol oynar. Böyle sistemlerde atomlar arasındaki etkileşimler lazerler ve manyetik alanları ile değiştirilebildiği için deneysel çalışmalarda ilgi çekmektedir. Ayrıca bu sistemlerde mikroskopik uzunluk ölçeklerinin büyük olmasından dolayı yoğuşmanın dalga fonksiyonunun yapısının direkt olarak optiksel anlamda incelenebilmesi seyreltik soğuk gaz sistemlerinin diğer bir avantajıdır. Sonuç olarak bu sistemler girişim olayları ve atom optik çalışmaları için ideal sistemlerdir.

Einstein' in " *belirli bir sıcaklığın altında parçacıkların sıfır olmayan bir oranı en düşük enerjili tek parçacık durumunu işgal etmelidir* " önerisinden sonra 1938 yılında Fritz London süper akışkan ^4He sıvısı ve Bose-Einstein yoğuşması arasındaki bağlantıyı açıkladı (F.London, 1938). Süper akışkan ^4He sıvısı Bose-Einstein yoğuşmasının ilk örneğidir ve bu konunun fiziksel temellerinin anlaşılmasında önemli bir role sahip olmuştur. Helyum atomları arasındaki güçlü etkileşim en düşük enerjili tek parçacık durumundaki parçacık sayısını azalttır. Bu sonuç daha yüksek oranda yoğuşma elde etmek için zayıf etkileşen Bose gazlarının araştırılmasına neden olmuştur. Bose-Einstein yoğuşmasını elde etmedeki zorluk birçok maddenin düşük sıcaklıklarda gaz yerine katı halde ya da bazen helyum izotopları gibi sıvı halde bulunmalarıdır. 1959 yılında Hecht (C.E.Hecht, 1959) hidrojenin zayıf etkileşimli Bose gazına iyi bir örnek olacağını söyledi. İki hidrojen atomu arasındaki etkileşimin bir bağ oluşturamayacak kadar az olduğu için düşük sıcaklıklarda manyetik alan içerisinde bulunan hidrojen atomlarından oluşan bir gaz molekül oluşturmaya karşı koyacak ve gaz halinde kalmaya devam edecektir. Hidrojenin yapısı lazer ile soğutmaya uygun olmadığı için diğer

soğutma yöntemlerinin de geliştirilmesi üzerine hidrojen 1998 yılında Bose-Einstein yoğuşmasına uğratılmıştır. Sonuç olarak deneysel soğutma ve tuzaklama yöntemleri geliştikçe Bose-Einstein yoğuşması örnekleri çoğalmıştır.

2.1.1.1. Atomları Tuzaklama ve Soğutma

Lazerin gelişimi soğuk atomik gazların üretilmesi için güçlü metotların geliştirilmesine yol açmıştır. Tipik bir deneyde kullanılan soğutma sistemi şekil 2.2.' de şematik olarak gösterilmektedir.



Şekil 2.2. Alkali atomları tuzaklamak ve soğutmak için kullanılan tipik bir deney düzeneği.

800 m s $^{-1}$ hızına denk gelen 600 K civarında bir sıcaklık ile fırından çıkan bir sodyum atomları demeti 30 m s^{-1} hızına denk gelen 1 K civarında bir sıcaklığa sahip olarak Zeeman yavaşlatıcısından çıkar. Zeeman yavaşlatıcısında atomik demetin tersi yönünde bir lazer ışını hareket eder ve foton emiliminden dolayı oluşan radyasyon kuvveti atomları yavaşlatır. Doppler etkisinden dolayı atomik hız değiştiği için laboratuar referans çerçevesinde atomik geçiş frekansı genellikle sabit kalmaz. Fakat Doppler ve Zeeman etkilerinin birbirlerini dengeleyeceği şekilde bir homojen olmayan manyetik alan uygulanır ve böylece atomik geçiş frekansı sabit tutulur. Zeeman yavaşlatıcısından çıkan atomlar bir manyetik optik tuzak (MOT) tarafından tutulabilmelerine yeterli olacak kadar düşük bir hıza sahip olurlar ve burada lazer ışığı etkileşimleri ile 100 μK'ne kadar soğutulurlar. Diğer deneylerde MOT, atomların direk olarak buhar halinde yakalandığı ikinci bir MOT' dan transfer edilen atomlar tarafından doldurulur. MOT' da yeterli sayıda atom (genellikle 10^{10}) toplandıktan sonra bir manyetik tuzak açılır ve lazer ışınları kapatılır. Böylece atomlar saf bir manyetik tuzak içerisine hapsedilir. Bu

aşamada atomların yoğunluğu oldukça düşüktür ve gaz hala çok dejenere değildir. Bose-Einstein yoğuşmasını gerçekleştirmedeki son adım ise buharlaştırarak soğutma yöntemidir. Bu aşamada yüksek enerjili atomların geride kalan atomların ortalama enerjisini azaltacak şekilde sistemi terk etmeleri sağlanır.

2.1.1.2. Manyetik Tuzaklar

Nötr atomların manyetik tuzaklanması Zeeman etkisi ile gerçekleşir. Atomik enerji seviyeleri manyetik alana bağlıdır ve bu yüzden homojen olmayan bir alandaki atom sürekli değişen bir potansiyel görür. Kolaylık için manyetik alan içerisinde enerji seviyelerinin lineer olduğunu düşünürsek herhangi bir i seviyesinde bulunan atomun enerjisi aşağıdaki gibi ifade edilir.

$$E_i = C_i - \mu_i B \tag{2.17}$$

Burada μ_i i seviyesinin manyetik momenti ve C_i ise bir sabittir. Böylece atomun enerjisine eklenen manyetik potansiyel enerji - $\mu_i B$ kadar olur. Manyetik moment pozitif ise atom onu alanın daha yüksek olduğu bölgelere doğru iten bir kuvvet ile karşı karşıya kalırken, manyetik moment negatif olduğu zaman ise alanın daha düşük olduğu bölgelere doğru iten bir kuvvet ile karşı karşıya kalır. Bu nedenle pozitif manyetik momentli seviyeler yüksek alana yönelen, negatifli olanlar ise alçak alana yönelen olarak adlandırılır.

Manyetik tuzakların enerji derinliği Zeeman enerjisi, $\mu_i B$, ile belirlenir. Atomik manyetik momentler sıcaklık biriminde 0.67 K/T ya denk gelen Bohr magnetonu ($\mu_B = e\hbar / 2m_e$) seviyesindedir. Ultra soğuk gazlarla yapılan deneylerde kullanılan manyetik alanlar 1 tesla' dan daha az olduğu için manyetik tuzakların derinliği de 1 kelvin' den daha azdır. Bu yüzden atomların manyetik tuzaklarda tutulabilmesi için önceden tuzağın derinlik mertebesine kadar soğutulmaları gerekir.

Manyetik tuzaklar yerel maksimum ya da yerel minimum olmak üzere iki farklı manyetik alan konfigürasyonu ile oluşturulabilir. Elektrik akımının olmadığı bölgelerde manyetik alanda yerel maksimumu elde etmek mümkün olmadığı için yerel minimumun kullanımı daha uygundur ve sonuç olarak manyetik momenti negatif olan atomlar tuzaklanır.

Manyetik alan konfigürasyonlarına ve işlevlerine göre manyetik tuzaklar birbirlerine göre farklılık gösterirler. Bu tuzaklardan bazıları dört kutuplu tuzak, zamanla dönen potansiyel tuzak (time-averaged orbiting potential, TOP), manyetik şişe ve Ioffe-Pritchard tuzağı, ve mikro tuzaklardır. Manyetik alanın bütün yönlerde uzaklıkla lineer bir şekilde değiştiği dört kutuplu tuzakta bazı noktalarda manyetik alan sıfırlanır. Böyle bir manyetik alan akım yönleri birbirine zıt olan ve karşılıklı yerleştirilmiş bir çift Helmholtz bobini ile oluşturulabilir. Dört kutuplu tuzağın dezavantajı tuzağın merkezinde manyetik alanın sıfırlanmasıdır. Atomların değişen manyetik bir alan içerisinde spin yönelimleri değiştiği için atomlar bu sıfır noktalarından geçerken spin yönelimleri manyetik momentleri pozitif olacak şekilde değişebilir. Bu durumda pozitif manyetik momentli atomlar manyetik alanın yüksek olduğu bölgelere doğru yöneleceklerinden dolayı tuzaktan atılırlar. Bu olay tuzakta depolanacak olan atom sayısını azaltır. Tuzaktaki bu boşluklar (manyetik alanın sıfır olduğu noktalar) birkaç yöntem ile kapatabilir. Bunlardan bir tanesi dört kutuplu tuzağa bir ilave manyetik alan eklemektir. Bu şekilde yeniden düzenlenen dört kutuplu tuzak zamanla dönen potansiyel tuzak (TOP) olarak adlandırılır. TOP tuzak manyetik alan içerisinde oluşan anlık boşlukları yok eder. Eklenen bu ilave alanın frekansı manyetik alt seviyeler arasındaki geçiş frekansından daha düşük olmalıdır. Bu koşul atomun anlık manyetik alan içerisinde aynı kuantum durumunda kalmasını sağlar. Böylece manyetik alt seviyeler arasında bir geçiş gerçekleşmez ve tuzaktan atom kaybı önlenmiş olur.

Manyetik alanda yerel minimum (sıfır olmayan) noktası manyetik şişe ve Ioffe-Pritchard tuzağı kullanılarak da oluşturulabilir. Bu tuzakta dört kutuplu tuzağın tersine Helmholtz bobinlerindeki akım aynı yöndedir.

2.1.1.3. Optik Tuzaklar

Lazer ışınının frekansı atomik geçiş frekansından daha düşük olursa atomun taban durum enerjisi minimum olur ve böylece atomlar tuzaklanabilir. Tuzağın derinliği enerji kaymasının büyüklüğü ile belirlenir.

Optik tuzağın avantajı taban durumdaki alkali atomların gördüğü potansiyelin manyetik alt seviyelerden bağımsız olmasıdır. Bu alkali atomun taban durumunun s durumunda olmasından kaynaklanır. Manyetik alanda potansiyelin manyetik alt seviyelere bağlı olmasından dolayı manyetik tuzaklarda sadece manyetik momenti negatif olan atomlar tuzaklanabilir. Manyetik tuzaklar kullanıldığında enerji Zeeman

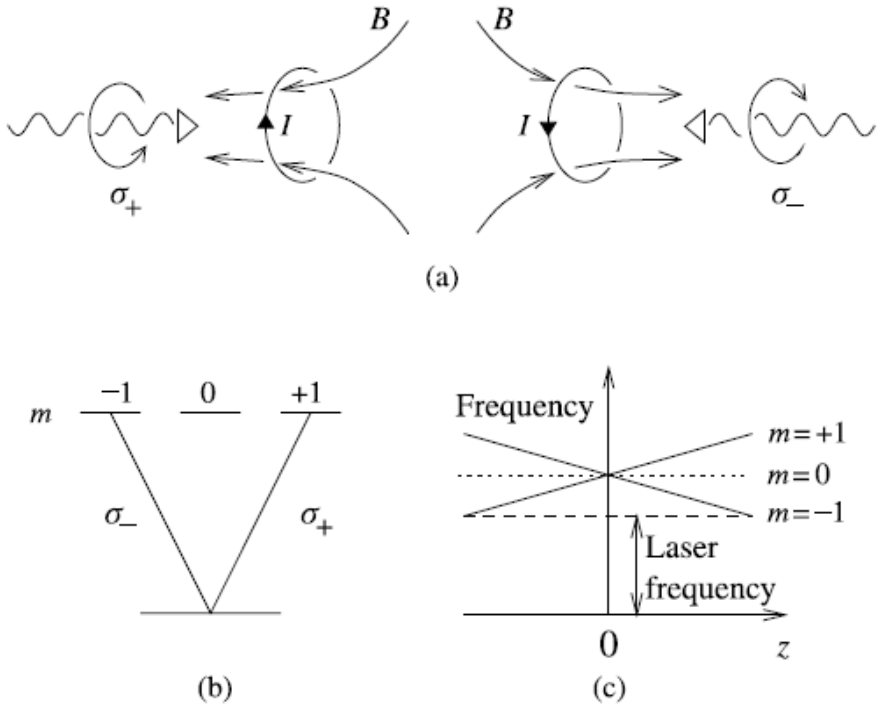
terimi ile belirlendiği için etkileşim enerjisinin bir atom bulutunun spin serbestlik derecesine etkisini incelemek zordur. Optik tuzaklar tam tersine bu amaç için kullanılabilir.

Feshbach rezonans bölgesine yakın yerlerde atom manyetik alanla güçlü bir şekilde etkileşir. Bu etkileşimden kaynaklanacak uzaysal düzensizliklerden kurtulmak için manyetik alanın homojen olması tercih edilir. Bu rezonans bölgesinde bulunan atomlar üzerinde çalışırken homojen bir manyetik alan uygulamak gerekir. Bunu manyetik tuzakla birlikte yapmak mümkün değildir çünkü atomları manyetik tuzakta tutabilmek için manyetik alanın homojen olmaması gerekir. Fakat optik tuzaklar manyetik tuzakların tersine homojen manyetik alan sağlayabilirler.

Atomların foton emilimi yüzünden ısınmasını engellemek için optik tuzaklarda lazer frekansı atomik rezonans frekansından uzak bir bölgede seçilmelidir. Stamper-Kurn ve ark. tarafından yapılan bir deneyde, Na atomları saf bir optik tuzakta Bose-Einstein yoğuşmasına uğratılmıştır (D.M. Stamper-Kurn ve ark. 1998). Bu deneyde atomik rezonans frekansı 589 nm iken lazerin dalga boyu 985 nm olarak alınmıştır. Bu değerler ile derinliği sıcaklık cinsinden μK değerinde olan yüzeysel bir optik örgü oluşur. Bu yüzden atomların saf bir optik örgüde tutulabilmeleri için daha önceden başka tuzaklarda μK mertebesinde sıcaklıklara kadar soğutulmaları gerekir.

2.1.1.4. Magneto-Optik Tuzaklar

Atomları tuzaklamak için radyasyon basıncı da kullanılabilir. Bunun için lazer ışınlarının ve uzaysal değişen manyetik alanın birleşmesi ile oluşturulan magneto-optik tuzaklar (MOT) kullanılır. Atomik enerji seviyeleri manyetik alana bağlı olduğundan ve manyetik alanın homojen olmamasından dolayı radyasyon basıncı atomun bulunduğu pozisyona bağlıdır. Toplam açısal momentumu (J) taban durumda sıfır ve üst seviyede bir olan bir atom düşünürsek ve kolaylık için nükleer spini önemsemezsek bu atomun üst seviyesi için manyetik alt seviyeleri m= +1, 0, -1 değerlerini alır. Manyetik alanın z yönünde ve lineer olduğu bir dört kutuplu manyetik tuzak ele alalım. Eşit yoğunluk ve frekansta pozitif ve negatif z yönlerinde gönderilen lazer ışınları atomların farklı manyetik alt seviyelere geçiş yapmalarına neden olurlar. Sağa doğru giden ışın (+σ) atomu m= +1 manyetik alt seviyeye uyarırken, sola giden ışın (-σ) atomu m= -1 manyetik alt seviyeye uyarır. Bu durum şematik olarak şekil 2.3.' de ifade edilmektedir.



Şekil 2.3. (a) magneto-optik tuzak. (b) gerçekleşebilecek olan geçişler. (c) uzaysal değişen manyetik alanın atomik geçişlere etkisi.

MOT tuzakları atomları sadece tuzaklamak için değil aynı zamanda onları soğutmak için de kullanılır. Homojen olmayan bir manyetik alanda atomik frekans pozisyona bağlı olduğundan geniş bir aralıkta hız dağılımına sahip olan atomların soğutulmaları da mümkündür.

2.1.1.5. Lazer ile Soğutma

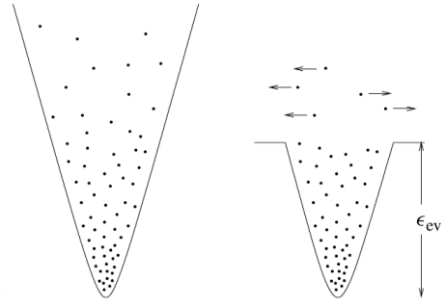
Lazer ile soğutma yönteminde basit bir şekilde bir atom z ekseni boyunca zıt yönde ilerleyen aynı frekanslı ve yoğunluklu lazer ışınlarına maruz bırakılır. Lazer ışınının frekansı atomik geçiş frekansının hemen aşağısında seçilir. Sabit duran bir atom sağdan ve soldan gelen fotonları eşit olarak soğurur ve toplam momentumunda bir değişiklik olmaz. Fakat sağa doğru V_z hızı ile hareket eden bir atoma göre sağa doğru hareket eden fotonların frekansı Doppler etkisi sayesinde azalır. Frekans atomik rezonanstan uzaklaştığı için sağa doğru hareket eden fotonların emilimi azalır. Aynı olayı sola doğru hareket eden fotonlar için düşünürsek atoma göre sola doğru hareket eden fotonların frekansı artar. Böylece sağa doğru hareket eden bu atom sola doğru hareket eden fotonları soğurarak hareketine ters yönde bir momentum kazanır. Sonuç olarak atom yavaşlar ve soğur.

Daha önce de bahsedildiği gibi bazı deneylerde kullanılan Zeeman yavaşlatıcısı atomların hızını magneto-optik tuzaklarda tutulabilmeleri için belirli bir değere kadar azaltır. Zeeman yavaşlatıcısında sadece atom demetlerinin hareket yönüne zıt yönde bir lazer ışını uygulanır. Fotonların emilimi ve tekrar yayılımı ile atomlara lazer ışınından bir momentum transfer edilir ve atomlar böylece yavaşlar. Fakat atomlar fırından çıktığı anda uygulanan lazer ışını atomik frekans ile rezonansta ise atomların soğuması ve sonuç olarak Doppler kaymasında meydana gelen değişiklik lazer ışını ve atomik frekans arasındaki rezonansı bozar. Bu yüzden lazer ışınının atomları yavaşlatmak için maksimum bir şekilde etkili olacağı hız aralığı sınırlıdır. Zeeman yavaşlatıcısında atomların hızındaki azalmanın atomik geçiş frekansı üzerindeki etkisini dengelemek için konumla değişen bir manyetik alan kullanılır.

2.1.1.6. Buharlaştırarak Soğutma

Lazerle soğutma yöntemi ile elde edilen sıcaklıklar oldukça düşük olmasına rağmen deneysel olarak Bose-Einstein yoğuşmasını elde etmek için yeterli değildir. Bu zamana kadar yapılan deneylerde atomik gazlarda Bose-Einstein yoğuşmasını elde etmek için kullanılan son adım buharlaştırarak soğutma yöntemi olmuştur. Sistemin ortalama enerjisinden daha büyük bir enerjiye sahip olan bir parçacık sistemden uzaklaşırsa geride kalan parçacıklar soğur.

Atomların şekil 2.4.' deki gibi gösterilen bir tuzakta hapsedilmiş olduğunu düşünelim. Eğer birisi tuzağın üst kısmında bir boşluk oluştursa sadece en azından tuzağın enerjisine eşit enerjili atomlar tuzaktan kaçabilir. Böyle bir boşluk tuzağa radyo frekansı aralığında bir radyasyon uygulanarak oluşturulabilir. Bu radyasyon atomun spin durumunu negatiften pozitife çevirir ve pozitif manyetik momentli atomların manyetik alanın yüksek olduğu bölgelere itildiğinden tuzaktan uzaklaşır. Böylece tuzaktan uzaklaşan atom sistemin ortalama enerjisini azalttığı için geride kalan atomlar soğur.



Şekil 2.4. Buharlaştırarak soğutma, ϵ_{ev} buharlaştırma için kritik enerji değeridir.

3. BOSE- HUBBARD HAMİLTONYENİ

Bose–Hubbard Hamiltonyeni periyodik sınır şartları altında aralarında güçlü bir şekilde bağ olan sistemleri tanımlayan bir modeldir. Bu periyodiklik kristalin yapısından veya Bose–Einstein yoğuşmasında atomların hapsedildiği optik örgüden kaynaklanabilir. Bose-Hubbard modeli yarı iletken kristallerdeki elektronlar, sıvı helyum, Josephson eklem dizileri ve optik örgülerdeki Bose-Einstein yoğuşmaları gibi birçok bozonik ve fermionik sistemlere uygulanabilir.

Başlangıç noktamız tek parçacık hamiltonyeni

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{ext} \tag{3.1}$$

şeklindedir. Bozonlar için yaratma ve yok etme operatörleri kullanılarak ve parçacıklar arası etkileşim enerjisini ve kimyasal potansiyeli de hesaba katarak Bose–Hubbard Hamiltonyeni ikinci kuantumlanma formunda aşağıdaki gibi elde edilir.

$$\hat{H} = \int d^3 r \hat{\psi}^+(\vec{r}) \left[\frac{-\hbar^2\nabla^2}{2m} + V_{ext}(\vec{r}) + \frac{g}{2}\hat{\psi}^+(\vec{r})\hat{\psi}(\vec{r}) - \mu \right] \hat{\psi}(\vec{r}) \tag{3.2}$$

Burada, kare parantez içerisindeki ilk terim kinetik enerji,

$$V_{ext}(\vec{r}) = V_{opt}(\vec{r}) + V_{ho}(\vec{r}) = \sum_{i=x,y,z} V_{0,i} \sin^2(k_i r_i) + \frac{1}{2} m \sum_{i=x,y,z} w_i^2 r_i^2 \tag{3.3}$$

(3.3) denklemi ile belirtilen terim optik potansiyelin ve harmonik osilatör potansiyelinin toplamı olan dış tuzaklama potansiyeli, g parçacıklar arası etkileşim enerjisi, $g = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m}$, (a_S saçılma uzunluğu) ve μ toplam parçacık sayısını belirleyen kimyasal potansiyeldir.

Bu formda, alan operatörleri tek parçacık dalga fonksiyonları baz seti kullanılarak bir seri şeklinde açılabilir.

$$\hat{\psi}(\vec{r}) = \sum_n \phi_n(\vec{r})\hat{a}_n \tag{3.4}$$

$$\hat{\psi}^+(\vec{r}) = \sum_n \phi_n^*(\vec{r})\hat{a}^+ \tag{3.5}$$

Burada $\{\phi_n(\vec{r})\}_n$ tek parçacık kuantum durumlarının tam bir setidir. (3.4) ve (3.5) denklemleri ile verilen n modu için Fock durumundaki yaratma ve yok etme operatörleri aşağıdaki formda verilir.

$$\hat{a}_n^+ |n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \tag{3.6}$$

$$\hat{a}_n |n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \tag{3.7}$$

Ayrıca bozonlar için alan operatörleri alışılmış komutasyon ilişkilerini de sağlar.

$$\left[\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{\psi}^+(\vec{r}')\right] = \sum_{n=0}^{\infty} \phi_n(\vec{r})\phi_n^*(\vec{r}') = \delta^3(\vec{r}-\vec{r}') \tag{3.8}$$

$$\left[\hat{\psi}(\vec{r}), \hat{\psi}(\vec{r}')\right] = \left[\hat{\psi}^+(\vec{r}), \hat{\psi}^+(\vec{r}')\right] = 0 \tag{3.9}$$

Periyodik bir potansiyel içerisindeki tek parçacık spektrumunun izinli enerji seviyelerinden ve yasak enerji aralıklarından oluşan bantlarla karakterize edilmesi ve tek parçacık dalga fonksiyonlarının α bant indeksli ħk quasi-momentumlu Bloch fonksiyonlarıyla tanımlanması iyi bilinen bir gerçektir. Alternatif olarak, Wannier fonksiyonlarıyla $w_\alpha(\vec{r}-\vec{R}_i)$ gösterilen tamamlayıcı tek parçacık baz setleri de

kullanılabilir. $\vec{R}_i$, i örgü konumunu gösteren örgü vektörüdür, $w_\alpha(\vec{r})$ ise Bloch fonksiyonlarının Fourier transformu olarak tanımlanır.

$$w_\alpha(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_k e^{-i\vec{k}.\vec{r}} \phi_{\alpha k}(\vec{r}) \tag{3.10}$$

Burada N_S örgüdeki toplam konum sayısı olarak verilir. Alan operatörleri Wannier fonksiyonları kullanılarak tekrar aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\hat{\psi}(\vec{r}) = \sum_{\alpha k} \phi_{\alpha k}(\vec{r}) \hat{a}_{\alpha k} = \sum_{\alpha,i} w_\alpha\left(\vec{r} - \vec{R}_i\right) \hat{a}_{\alpha,i} \tag{3.11}$$

$$\hat{\psi}^+(\vec{r}) = \sum_{\alpha k} \phi^*{}_{\alpha k}(\vec{r}) \hat{a}^+_{\alpha k} = \sum_{\alpha,i} w^*{}_\alpha\left(\vec{r} - \vec{R}_i\right) \hat{a}^+_{\alpha,i} \tag{3.12}$$

Sistemin sıcaklığı yeterince düşükse ve parçacıklar arası etkileşim bantlar arası geçişi sağlayacak kadar güçlü değilse, sadece birinci Bloch bandına yoğunlaşılır, çünkü parçacıklar birinci bandı diğer bantlardan ayıran yasak bölge aralığını geçecek kadar enerjiye sahip değildirler. Bu yüzden (3.11) ve (3.12) denklemlerindeki alfa indeksleri en düşük değerlerini alarak kaldırılırsa ve (3.2) denklemi tekrar yazılırsa,

$$\hat{H} = -\sum_{i,j} J_{ij} \hat{a}_i^+ \hat{a}_j + \sum_{i,j,k,l} \frac{U_{i,j,k,l}}{2} \hat{a}_i^+ \hat{a}_j^+ \hat{a}_k \hat{a}_l - \sum_{i,j} \mu_{i,j} \hat{a}_i^+ \hat{a}_j \tag{3.13}$$

hamiltonyeni elde edilir. Toplam içindeki nicelikler aşağıdaki şekilde verilir.

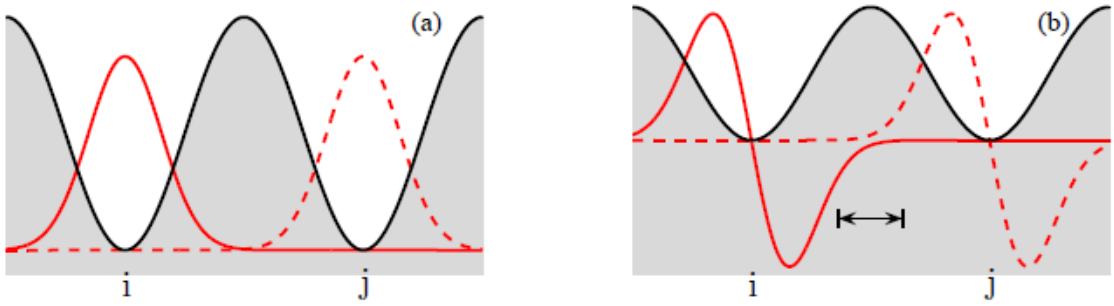
$$J_{ij} = -\int d^3 r w^*\left(\vec{r} - \vec{R}_i\right) \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{opt}(\vec{r}) \right] w\left(\vec{r} - \vec{R}_j\right) \tag{3.14}$$

$$U_{i,j,k,l} = g \int d^3 r w^*\left(\vec{r} - \vec{R}_i\right) w^*\left(\vec{r} - \vec{R}_j\right) w\left(\vec{r} - \vec{R}_k\right) w\left(\vec{r} - \vec{R}_l\right) \tag{3.15}$$

$$\mu_{i,j} = \int d^3 r w^*\left(\vec{r} - \vec{R}_i\right) \left[\mu - V_{ho}(\vec{r}) \right] w\left(\vec{r} - \vec{R}_j\right) \tag{3.16}$$

Wannier fonksiyonları örgü konumlarında lokalize oldukları için örgü derinliği arttıkça Wannier fonksiyonları daha fazla lokalize olurlar. Yeterince derin bir optik

potansiyel için (3.15) ve (3.16) denklemlerinde en çok katkı $U_{i,i,i,i}$ ve $\mu_{i,i}$ terimlerinden gelir. (3.13) denklemindeki kinetik enerji kısmı için $J_{i,i}$ ile verilen sabit bir katkı vardır ve integraldeki türevden dolayı en yakın komşu konumlar için ayrıca bir pozitif matris elemanı vardır, $J_{i,j} > 0$. Bu her iki durum da aşağıdaki şekil 3.1.' de ifade edilmiştir. Bu gösterimde Wannier fonksiyonları bir yaklaşım ile Gaussian fonksiyonları olarak ele alınmıştır.



Şekil 3.1. (a) Optik örgünün komşu i ve j konumlarında lokalize olan 2 Gaussian fonksiyonları, örtüşme önemsiz. (b) Gaussian fonksiyonlarının türevi ok ile gösterilen bölgede pozitif bir matris elemanına götüren $J_{i,j} > 0$ örtüşmeyi gösterir.

Bütün bunları dikkate alarak ve $\hat{a}_i^+ \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \hat{a}_i$ formunun basitleştirilmiş, $\hat{n}_i(\hat{n}_i - 1)$, hali kullanılarak, burada $\hat{n}_i = \hat{a}_i^+ \hat{a}_i$, i konumundaki parçacıkların sayı operatörü olmak üzere, Bose-Hubbard Hamiltonyenini aşağıdaki formda tekrar yazabiliriz.

$$\hat{H}_{BH} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \hat{a}_i^+ \hat{a}_j + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i(\hat{n}_i - 1) - \sum_i \mu_i \hat{n}_i \qquad (3.17)$$

Burada $J = J_{i,j} = J_{j,i}$ şeklinde alınmıştır ve $J_{i,i}$ her bir örgü konumu için sabit bir katkı sağladığından yok sayılmıştır. $U = g \int d^3 r \left| w(\vec{r}) \right|^4$ aynı örgü konumundaki parçacıklar arası etkileşim enerjisidir. Harmonik sınırlama ise, kimyasal potansiyel hesaba katılarak aşağıdaki şekilde verilir.

$$\mu_i = \mu - \frac{1}{2} m \vec{w}^2 . (\vec{R}_i - \vec{R}_0)^2 \qquad (3.18)$$

Burada $\vec{R}_0$ harmonik tuzağın merkezidir ve $\vec{w}=(w_x,w_y,w_z)$ üç yönlü harmonik tuzak frekansıdır. (3.18) denkleminde eşitliğin sağ tarafının ikinci terimi her bir örgü konumunda farklılık gösterir ve lokal kimyasal potansiyel olarak adlandırılır.

Homojen Bose-Hubbard modelinde J, i ve j konumları arasında tünelleme matris elemanıdır. Tünelleme genellikle en yakın komşu konumlar arasında gerçekleştiğinden, toplamda $\langle i,j\rangle$ ile gösterilir. Operatör $\hat{a}_i^+$ örgünün i konumuna bir bozon eklerken operatör $\hat{a}_i$ örgünün i konumundan bir bozon uzaklaştırır. Operatör $\hat{n}_i$ ise i konumundaki yerel yoğunluğu hesaplar. (3.17) denklemindeki ikinci terim aynı konumdaki atomlar arasındaki etkileşimi verir ve bu yüzden $\hat{n}_i(\hat{n}_i-1)$ ile orantılıdır. En son terim olan μ ise parçacık sayısını kontrol eden kimyasal potansiyeldir.

3.1. Bose-Hubbard Modelinde Süper Akışkan-Mott Yalıtkan Kuantum Faz Geçişi

Mutlak sıfır sıcaklığındaki bir sistem için bütün termal değişimler dururken kuantum değişimler hala devam etmektedir. İki rakip enerji terimlerinin birbirlerine göre güçleri belirli bir kritik değere göre değiştirildiği zaman, bu mikroskopik kuantum değişimler çok parçacıklı sistemin taban durumunda makroskopik bir faz geçişi meydana getirebilir. Bose-Einstein yoğuşmasında süper akışkan fazından Mott yalıtkan fazına böyle bir kuantum faz geçişi gerçekleşir. Sisteme parçacık ekleyerek sıkıştırılabilme özelliğine sahip olan süper akışkan fazı, her bir atomun bütün örgü üzerine yayılması ile karakterize edilir. Sıkıştırılamaz Mott yalıtkan fazında ise, her bir örgü konumu üzerinde belirli sayıda atom lokalize olur. Sistemin iki taban durumu arasında tersinir değişimler elde edilebilir.

(3.17) denklemi ile belirtilen Bose-Hubbard modelini tekrar göz önüne alırsak,

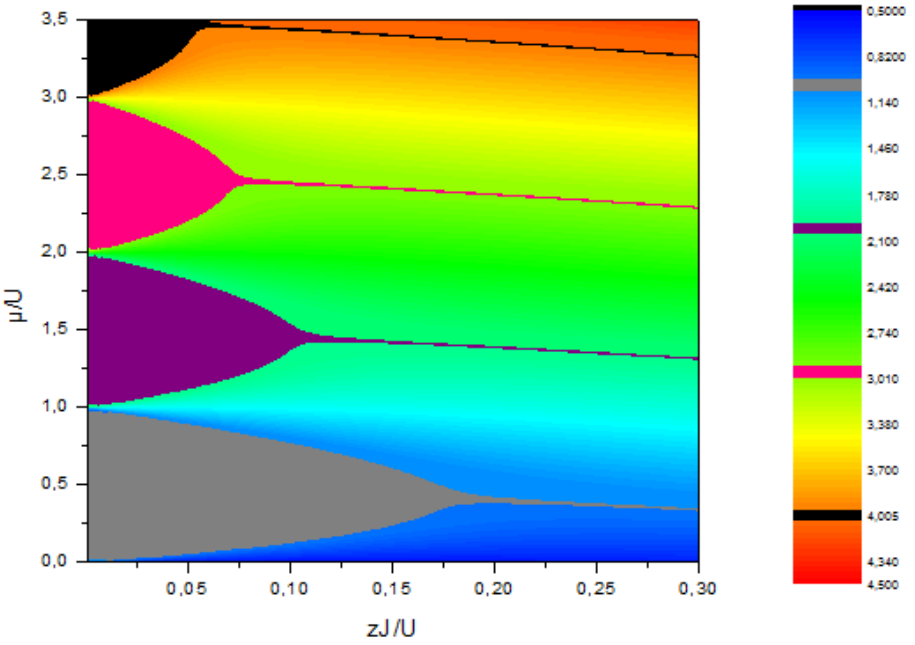
$$\hat{H}_{BH}=-J\sum_{\langle ij\rangle}\hat{a}_i^+\hat{a}_j+\frac{U}{2}\sum_i\hat{n}_i(\hat{n}_i-1)-\sum_i\mu_i\hat{n}_i \qquad (3.19)$$

μ kimyasal potansiyel olmak üzere, sistemin toplam bozon sayısı $\hat{N}=\sum_i n_i$ şeklinde verilir. Bu hamiltonyende *J,U* ve μ olmak üzere üç tane parametre vardır fakat $\hat{H}_{BH}$' ın faz diyagramı incelenirken iki parametrenin üçüncü parametreye oranı alınarak *J/U* ve

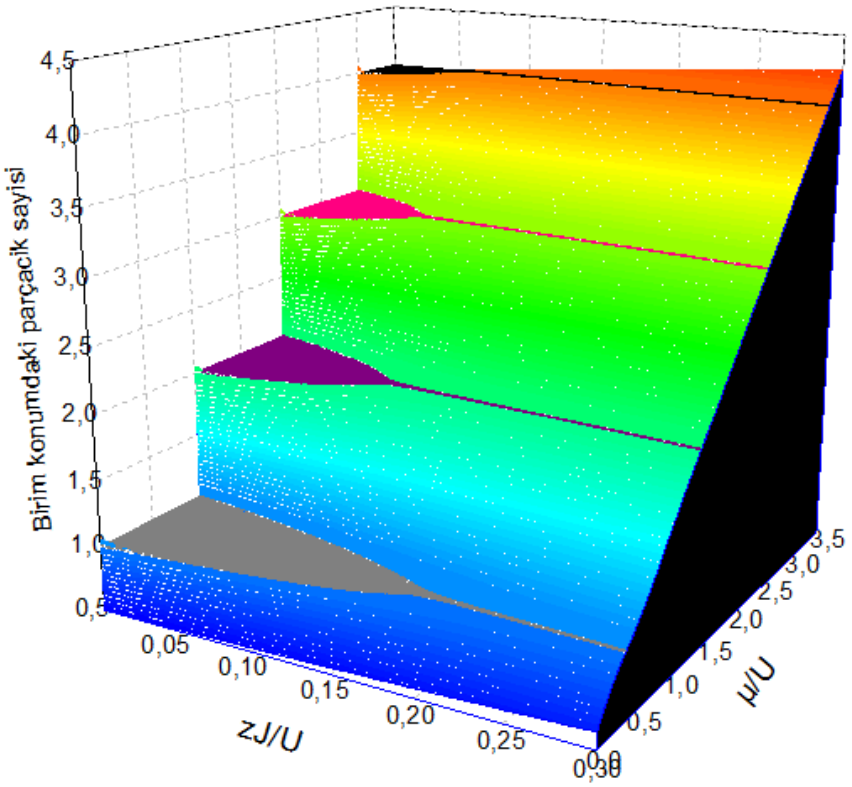
μ/U şeklinde bir basitleştirme yoluna gidilir. Bu parametrelerin değerine bakılarak sistemin hangi fazda olduğu anlaşılır. Sığ örgüler için U/J değeri birden çok küçüktür ve sistem süper akışkan fazındadır. Bu faz her bir konumdaki parçacık yoğunluğunun değişimi ile karakterize edilir ve parçacıklar lokalize olmadan bütün örgü üzerine yayılır. Derin örgüler için ise J/U değeri birden çok küçüktür ve sistem örgü konumlarındaki parçacık sayısının değişmediği Mott yalıtkan fazındadır. Bu fazda her bir konum tam sayıda atom ile işgal edilir ve taban durum tek parçacık Fock durumlarının çarpımı ile elde edilir.

$$\left|GS\right\rangle = \left|\bar{n},\bar{n},....\right\rangle \tag{3.20}$$

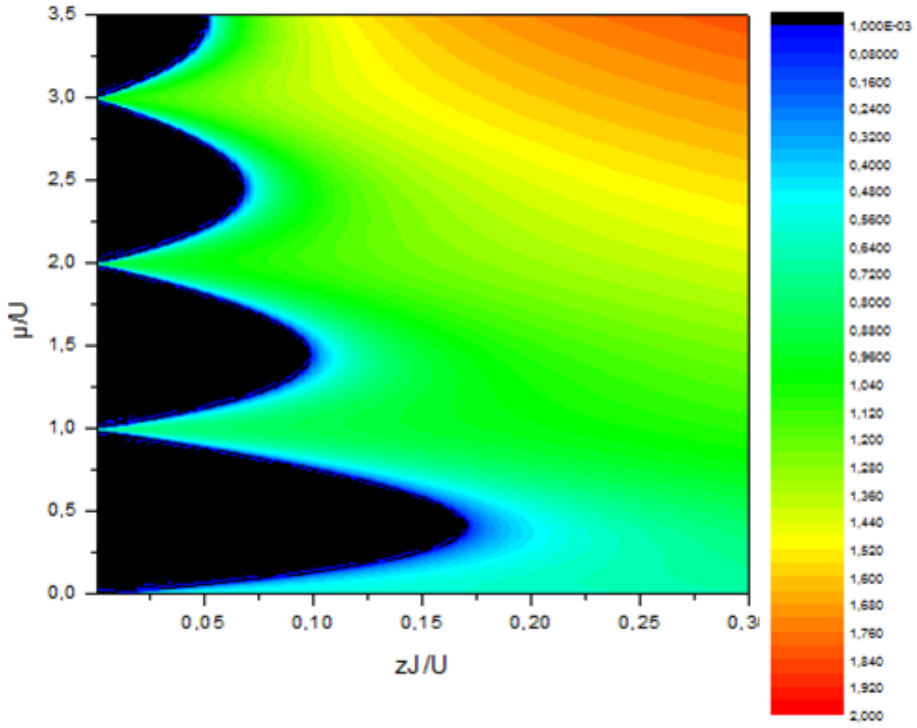
Küçük J/U değerleri için Mott yalıtkan fazı J-μ düzleminde Mott lobu olarak adlandırılan sonlu ve kapalı bir bölgede olmayı tercih eder. Lobun en geniş olduğu değer faz geçişi için kritik nokta, $\left(J/U\right)_c$, olarak tanımlanır. Kritik nokta sistemin boyutu ve geometrisi ile değişir. Şekil 3.3. ve şekil 3.4.' de daha sonra 4. bölümde ele alınacak olan dinamik Gutzwiller ortalama alan yaklaşımıyla çözülen sonsuz bir optik örgü için $\bar{n} = 0,1,2,3$ yalıtkan lobları gösterilmiştir. Şekil 3.5.'de ise düzen parametresi gösterilmiştir. Düzen parametresi grafiğinde siyah olarak gözüken lobları çevreleyen kalın mavi çizgiler Mott yalıtkan ve süper akışkan fazları arasındaki sınırları belirler. Düzen parametresi lob sınırları içerisinde yani Mott yalıtkan fazında sıfır değerini alırken lobların dışına çıkıldığında yani süper akışkan fazında sıfırdan farklı değerler alır. Şekil 3.3.' de renkli düzlükler sabit kesirli yoğunluğun yüzeysel görünüm grafiğini gösterirken lobların kritik noktasından çıkıp süper akışkan bölgeye doğru ilerleyen renkli kalın çizgiler ise süper akışkan fazında olmasına rağmen yoğunluğun tam sayı değerlerine karşılık gelir.



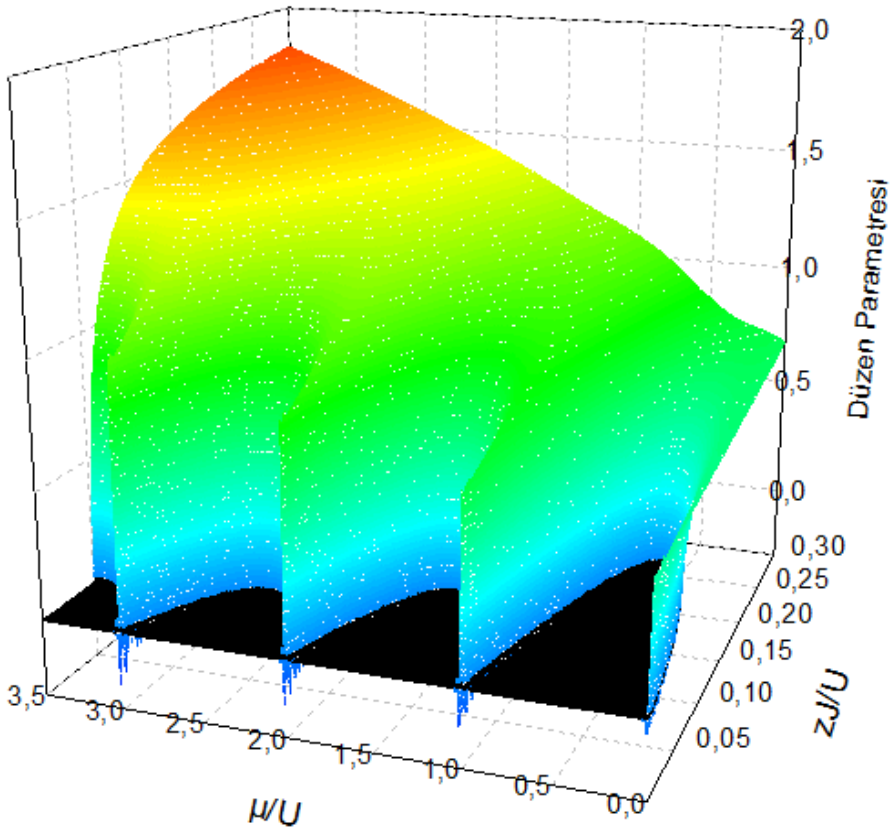
Şekil 3.3. Bose –Hubbard Hamiltonyeninin ortalama alan faz diyagramı , birim konumdaki yoğunluğun yüzeysel görünüm grafiği.



Şekil 3.4. Birim konumdaki yoğunluğun 3 boyutlu grafiği.



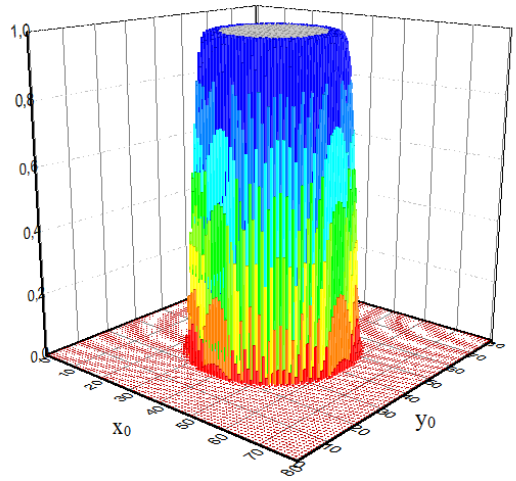
Şekil 3.5. Bose –Hubbard Hamiltonyeninin ortalama alan faz diyagramı, düzen parametresinin yüzeysel görünüm grafiği.



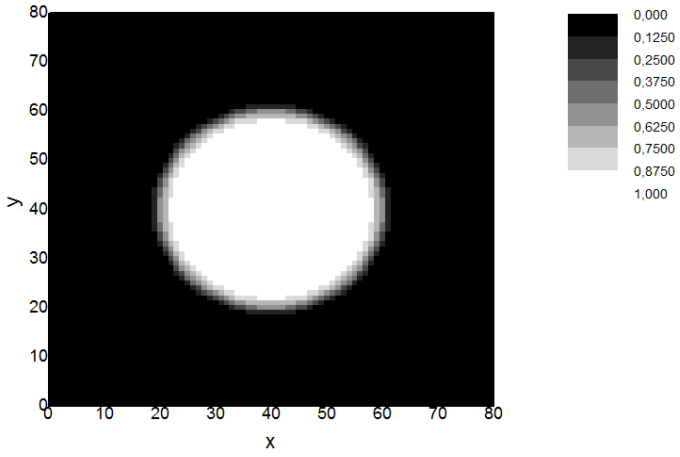
Şekil 3.6. Düzen parametresinin 3 boyutlu grafiği.

Optik bir örgü üzerinde bulunan bozonlara optik örgü haricinde bir dış tuzaklama potansiyeli uygulanmıyor ise sistem homojendir. Herhangi bir *J/U* ve μ/U değerinde sistem ya Mott yalıtkan fazında ya da süper akışkan fazındadır.

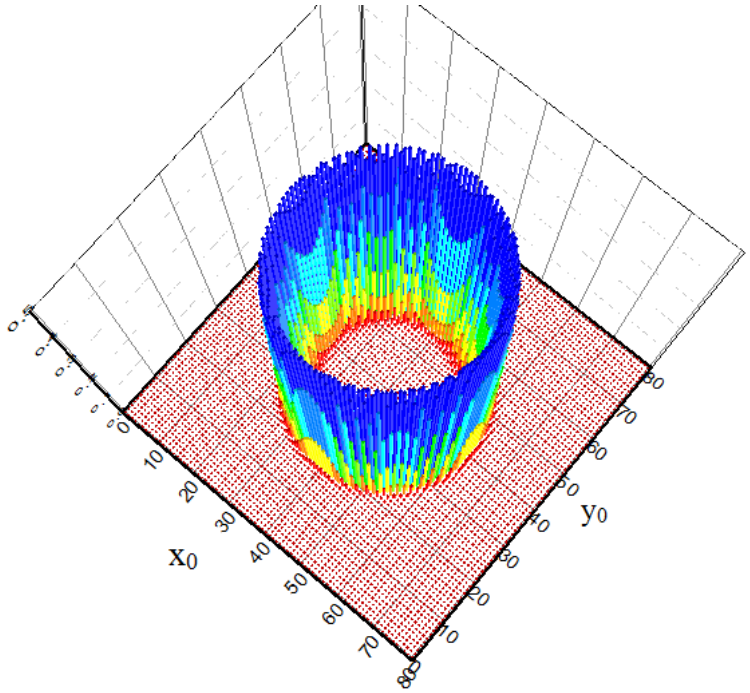
Dış tuzaklama harmonik potansiyelinin bulunduğu bir sistemde ise farklı fazlar aynı anda var olabilir. Daha sonra ele alınacak olan dinamik Gutzwiller ortalama alan yaklaşımı kullanılarak bir tuzak içindeki bozonlar için dış tuzaklama harmonik potansiyelinin varlığında iki boyutlu örgü için elde edilen dağılıma karşılık her bir örgü konumundaki taban durumun yoğunluğu ve düzen parametresi 3.7. ve şekil 3.9' da 3 boyutlu grafik halinde verilmiştir. Şekil 3.8. ve şekil 3.10' da ise bu değerler yüzeysel görünüm grafiği şeklinde verilmiştir.



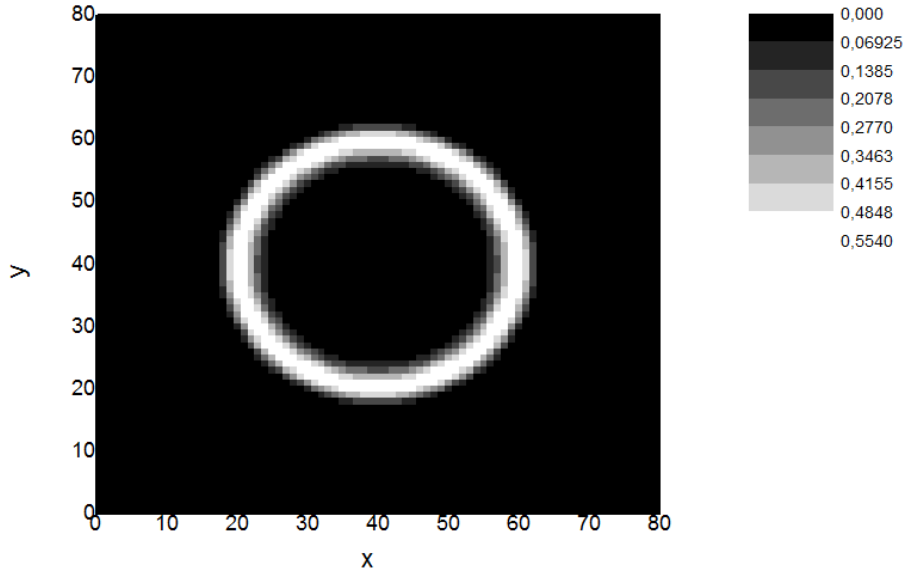
Şekil 3.7. İki boyutlu optik örgünün ortalama alan taban durumu, dış tuzaklama harmonik potansiyelin varlığında dik eksenler örgünün her bir konumundaki yoğunluk değerlerini gösterir.



Şekil 3.8. İki boyutlu optik örgünün ortalama alan taban durumu, dış tuzaklama harmonik potansiyelin varlığında örgü konumlarındaki yoğunluğun yüzeysel görünüm grafiği (gray scale map).



Şekil 3.9. İki boyutlu optik örgünün ortalama alan taban durumu, dış tuzaklama harmonik potansiyelinin varlığında dik eksenler örgünün her bir konumundaki düzen parametresi değerlerini gösterir.



Şekil 3.10. İki boyutlu optik örgünün ortalama alan taban durumu, dış tuzaklama harmonik potansiyelin varlığında örgü konumlarındaki düzen parametresi değerlerinin yüzeysel görünüm grafiği (gray scale map).

3.1.1. Dipolar Bose Gazı

Şekil 3.11.' deki gibi $\vec{e}_1$ ve $\vec{e}_2$ birim vektörleri yönünde dipol momentleri bulunan ve aralarında r mesafesi olan iki parçacığın etkileşim enerjisi aşağıdaki gibi verilir.

$$U_{dd} = \frac{C_{dd}}{4\pi} \frac{(\vec{e}_1.\vec{e}_2)r^2 - 3(\vec{e}_1.\vec{r})(\vec{e}_2.\vec{r})}{r^5} \tag{3.21}$$

Burada $r = |\vec{r}|$ ve $U_{dd}(\vec{r}) = U_{dd}(-\vec{r})$ şeklindedir. Manyetik dipol momenti μ olan parçacıklar için dipolar etkileşim sabiti $C_{dd} = \mu_0 \mu^2$ iken, elektrik dipol momenti d olan parçacıklar için ise dipolar etkileşim sabiti $C_{dd} = d^2 / \varepsilon_0$ şeklindedir. (μ_0 permeabilite , ε_0 permitivite).

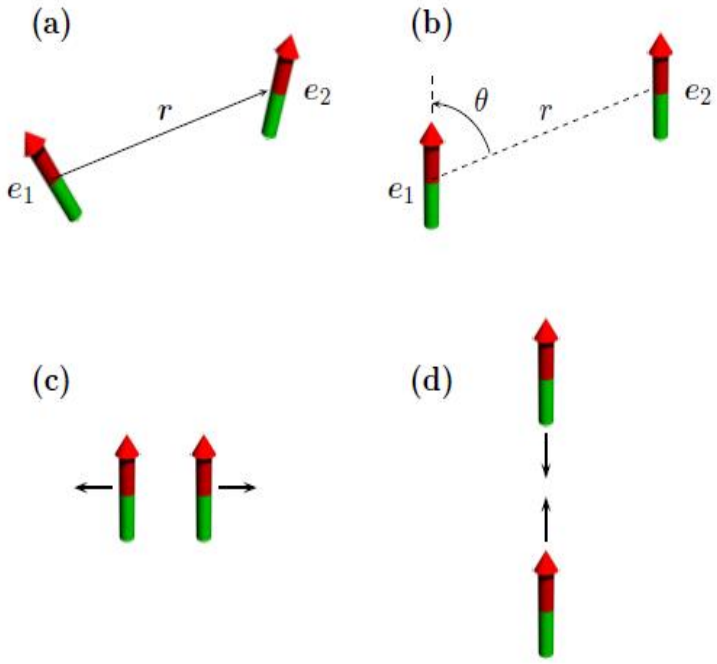
Dipol-dipol etkileşiminin anizotropik bir özelliğe sahip olduğu (3.21) denkleminden kolay bir şekilde görülebilir. Bütün dipollerin aynı yöne doğru yönelmesi ile oluşan polarize atomların dipol-dipol etkileşim enerjisi aşağıdaki forma indirgenir.

$$U_{dd} = \frac{C_{dd}}{4\pi} \frac{1 - 3\cos^2\theta}{r^3} \tag{3.22}$$

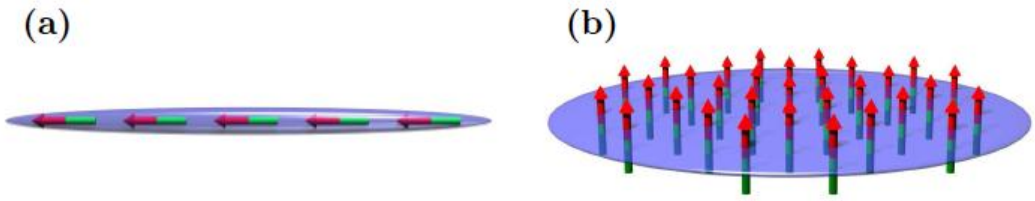
Burada θ şekil 3.11.' de gösterildiği gibi parçacıkların dipolleri ile iki parçacığın birbirine göre konumunu belirleyen $\vec{r}$ vektörü arasındaki açıdır. $\theta = \pi / 2$ ise etkileşim iticidir, şekil 3.11. (c), ve $\theta = 0$ ise etkileşim çekicidir, şekil 3.11. (d) . Anti paralel dipoller için bu durum tam tersi şeklindedir yani (3.22) denklemi negatif değerini alır bu yüzden $\theta = \pi / 2$ değeri için çekici bir etkileşim varken $\theta = 0$ değeri için itici bir etkileşim vardır.

Polarize olmuş dipolar Bose-Einstein yoğuşmaları için tuzaklama potansiyelinin geometrisi yoğunluğun uzaysal dağılımında ve gazın kararlılığında önemli bir role sahiptir. Şekil 3.12.' de tuzaklama potansiyelinin biçimine bağlı durumlar belirtilmiştir. z ekseni boyunca uzatılan sigara şeklindeki tuzakta yoğunluk polarizasyon ekseni boyunca dağılır ve dipol-dipol etkileşimi çekicidir. Bu çekici etkileşim sistemde itici dokunma etkileşimi olmasına rağmen gazı yarı kararlı bir duruma sürükler. Pankek

şeklindeki tuzakta ise dipolar etkileşim çoğunlukla iticidir. Bose-Einstein yoğuşması itici dokunma etkileşiminin varlığında daima kararlıdır ve bazen çekici dokunma etkileşiminin varlığında dahi kararlı olabilir. Tuzaklama potansiyelinin tam olarak küresel olduğu durumda ise yoğunluk dağılımı izotropiktir ve toplam dipol-dipol etkileşimleri sıfırlanır.



Şekil 3.11. (a) $\vec{e}_1$ ve $\vec{e}_2$ birim vektörleri yönlerinde yönelmiş ve aralarında r mesafesi olan iki dipol. (b) Etkileşim enerjisinin dipol birim vektörlerinin ve $\vec{r}$ vektörünün arasındaki açıya θ bağlı olarak değiştiği polarize olmuş dipoller. (c) $\theta = \pi / 2$ için itici etkileşim enerjisi, (d) $\theta = 0$ için çekici etkileşim enerjisi.



Şekil.3.12. İzotropik olmayan harmonik bir tuzaktaki polarize olmuş dipoller. **(a)** polarizasyon yönü boyunca uzatılmış sigara şeklindeki tuzak, dipolar etkileşimler çekicidir. **(b)** polarizasyon yönünde güçlü bir tuzaklamaya sahip pankek şeklindeki tuzak.

3.1.1.1. Genişletilmiş Bose-Hubbard Modeli

Genişletilmiş Bose-Hubbard modelinde (3.17) denklemi ile verilen Bose-Hubbard Hamiltonyenine dipol-dipol etkileşim enerjisinden kaynaklanan bir terim eklenir ve bu terim aşağıdaki gibi gösterilir.

$$\hat{H}_{dd} = \frac{1}{2}\iint d^3r_1 d^3r_2 \hat{\psi}^+(\vec{r}_1)\hat{\psi}^+(\vec{r}_2)U_{dd}(\vec{r}_1-\vec{r}_2)\hat{\psi}(\vec{r}_1)\hat{\psi}(\vec{r}_2) \tag{3.23}$$

Alan operatörlerinin Wannier fonksiyonlarının bazları şeklinde açılması ile en son aşağıdaki form elde edilir.

$$\hat{H}_{dd} = \sum_{i,j,k,l} \frac{V_{i,j,k,l}}{2}\hat{a}_i^+\hat{a}_j^+\hat{a}_k\hat{a}_l \tag{3.24}$$

$V_{i,j,k,l}$ matris elemanı aşağıdaki şekilde verilir.

$$V_{i,j,k,l} = \iint d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 w^*(\vec{r}_1-\vec{R}_i)w^*(\vec{r}_2-\vec{R}_j)U_{dd}(\vec{r}_1-\vec{r}_2)w(\vec{r}_1-\vec{R}_k)w(\vec{r}_2-\vec{R}_l) \tag{3.25}$$

Wannier fonksiyonları σ uzaysal yerelleşmesi ile optik örgü çukurlarının dibinde merkezlenir. Yeterince derin optik potansiyeller için σ' nın optik örgü parametresinden çok küçük olduğu düşünülebilir , $\sigma \ll d$. Bu limitte, her bir fonksiyon $w(\vec{r}-\vec{R}_i)$, $\vec{r} \sim \vec{R}_i$ değeri ve (3.23) denklemindeki $i=k$, $j=l$, indisleri için sıfırdan farklıdır. Bu yüzden (3.23) denkleminden farklı örgü noktalarındaki dipollerin etkileşimini temsil eden off-site matris elemanı $V_{i,j,i,j}$ $(k=i\neq j=l)$ ve aynı örgü noktasındaki dipollerin etkileşimini temsil eden on-site matris elemanı $V_{i,i,i,i}$ olmak üzere $(k=i=j=l)$ iki ayrı temel katkı gelir. Bu iki katkının fiziksel anlamı aşağıda açıklanmaktadır.

Off-site- Dipolar potansiyel $U_{dd}(\vec{r}_1-\vec{r}_2)$, σ ölçeğinde yavaş değiştiğinden dolayı dipolar potansiyel yerine $U_{dd}(\vec{R}_i-\vec{R}_j)$ sabiti kullanılarak bir yaklaşım yapılır ve bu sabit integralin dışına atılarak off-site hamiltonyenine götüren

$$\hat{H}_{dd}^{off-site}=\sum_{i\neq j}\frac{V_{i,j}}{2}\hat{n}_i\hat{n}_j \tag{3.26}$$

aşağıdaki integral elde edilir.

$$V_{i,j,i,j}\simeq U_{dd}(\vec{R}_i-\vec{R}_j)\int d^3r_1\left|w(\vec{r}_1-\vec{R}_i)\right|^2\int d^3r_2\left|w(\vec{r}_2-\vec{R}_j)\right|^2 \tag{3.27}$$

(3.26) denkleminde $V_{i,j}=U_{dd}(\vec{R}_i-\vec{R}_j)$ şeklindedir, $\hat{n}_i=\hat{a}_i^{+}\hat{a}_i$ i konumundaki bozonik sayı operatörüdür ve toplam örgünün bütün farklı konumları üzerinden alınır.

On-site- $\left|\vec{r}_1-\vec{r}_2\right|\sim\sigma$ şartının sağlandığı aynı örgü konumu *i* de potansiyel hızlı bir şekilde değişir ve $\left|\vec{r}_1-\vec{r}_2\right|\to 0$ değeri için ıraksar. Bu yüzden yukarıdaki yaklaşım geçerli değildir ve integral aşağıdaki şeklini alır.

$$V_{i,i,i,i}=\iint d^3r_1d^3r_2\rho(\vec{r}_1)U_{dd}(\vec{r}_1-\vec{r}_2)\rho(\vec{r}_2) \tag{3.28}$$

Burada $\rho(\vec{r})=\left|w(\vec{r})\right|^2$, örgü konumunda atomik uzaysal dağılımı hesaba katarak hesaplanması gereken tek parçacık yoğunluğudur. Sonuç olarak (3.28) denkleminin çözümü aşağıdaki gibi Fourier transformu alınarak bulunur

$$V_{i,i,i,i}=\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3k\tilde{U}_{dd}(\vec{k})\tilde{\rho}^2(\vec{k}) \tag{3.29}$$

ve on-site dipolar hamiltonyeni şu şekilde elde edilir.

$$\hat{H}_{dd}^{on-site}=\sum_i\frac{V_{i,i,i,i}}{2}\hat{n}_i(\hat{n}_i-1) \tag{3.30}$$

Genişletilmiş Bose-Hubbard Hamiltonyeni, (3.17) ile verilen Bose–Hubbard hamiltonyenine yukarıda hesaplanan dipolar hamiltonyenlerin eklenmesi ile elde edilir.

$$\hat{H}_{eBH} = -J\sum_{\langle i,j\rangle}\hat{a}_i^{+}\hat{a}_j + \frac{U}{2}\sum_i \hat{n}_i(\hat{n}_i - 1) - \sum_i \mu_i \hat{n}_i + \sum_{i\neq j}\frac{V_{i,j}}{2}\hat{n}_i\hat{n}_j \tag{3.31}$$

Burada U aynı konum üzerindeki parçacıklar arasındaki temas potansiyel enerjisi olan g ve (3.30) denklemi ile belirtilen dipolar potansiyel enerjisinin toplamı şeklinde alınan etkin on-site etkileşimdir.

$$U = g\int d^3r\left|w\left(\vec{r}\right)\right|^4 + \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3k\tilde{U}_{dd}(\vec{k})\tilde{\rho}^2(\vec{k}) \tag{3.32}$$

4. HUBBARD MODELLERİ: TEORİK METODLAR

4.1. Gutzwiller Ortalama Alan Yaklaşımı

Hubbard tipi hamiltonyenlerin çok parçacık dalga fonksiyonunun bir yaklaşımı olan Gutzwiller ortalama alan yaklaşımı kullanılarak dalga fonksiyonu aşağıdaki gibi ifade edilir.

$$|\psi\rangle = \prod_i \sum_{n=0}^{n_{\max}} f_n^{(i)} |n\rangle_i \tag{4.1}$$

Sistemin toplam dalga fonksiyonunun bu şekilde yazılması Gutzwiller Ansatz olarak adlandırılır ve burada $|n\rangle_i$ i konumunu işgal eden n tane parçacığın Fock durumunu, $n_{\max}$ birim konum başına düşen maksimum atom sayısını ve $f_n^{(i)}$ i konumunun n tane atom tarafından işgal edilme olasılık genliğini verir. Olasılık genlikleri bire normalize edilir, $\sum_n \left| f_n^{(i)} \right|^2 = 1$. Gutzwiller Ansatz ile belirli bir kimyasal potansiyel aralığında $\left(J/U\right)_{mf}$ kritik değeri elde edilir. Ayrıca Gutzwiller Ansatz $J/U > \left(J/U\right)_{mf}$ değeri için bir süper akışkan taban durumunu tahmin eder. Gutzwiller kritik noktası, $\hat{n} = 1$ için $\left(J/U\right)_{mf} = 1/5.8z$ şeklinde bulunmuştur. Burada, $z = \sum_{\langle j \rangle i}$ örgünün her bir konumundaki en yakın komşu bağlantılarının sayısını verir. Çizelge 4.1.' de farklı boyutlar için Gutzwiller Ansatz ile elde edilen kritik noktaların karşılaştırılması verilmiştir.

Çizelge 4.1. Sistemin farklı boyutları için, D, bu zamana kadar elde edilmiş daha kesin kritik noktalar , $(J/U)_c$, ile Gutzwiller kritik noktalarının, $\left(J/U\right)_{mf}$, karşılaştırılması.

D	z	$\left(J/U\right)_{mf}$	$(J/U)_c$
1	2	0.0862	0.29
2	4	0.0431	0.061
3	6	0.0287	0.034

Karşılaştırmadan anlaşıldığı gibi Gutzwiller bir boyutlu sistemler için yeterli değilken üç boyutlu sistemler için daha iyi sonuçlar vermektedir. Ayrıca, $J/U \to \infty$ limitinde gerçek sonuçlar ve Gutzwiller tahminleri arasındaki fark önemsizdir. $J/U \to 0$ ve $J/U \to \infty$ limit durumlarında doğru sonuçları verirken ara değerler için faz geçişindeki kuantum değişimlerini tam olarak hesaplayamadığı için Gutzwiller yaklaşımının performansı boyuta bağlıdır. Genel olarak iki ve üç boyutlu problemlerde Gutzwiller yaklaşımı kabul edilebilir sonuçlar verir.

Bozonik yok etme operatörünün örgünün *i.* konumundaki beklenen değeri, $\varphi_i = \langle \psi | \hat{a}_i | \psi \rangle$, düzen parametresi olarak adlandırılır. (4.1) denklemi ile belirtilen Gutzwiller dalga fonksiyonu kullanılarak düzen parametresi aşağıdaki gibi elde edilebilir.

$$\varphi_i = \sum_n \sqrt{n+1} f_n^{*(i)} f_{n+1}^{(i)} \tag{4.2}$$

Düzen parametresi örgünün *i* konumundaki fazını tanımlar, Mott fazında sıfır iken, $\varphi_i = 0$, süper akışkan fazında sıfırdan farklıdır, $\varphi_i \neq 0$. Düzgün sistemlerde, örgü öteleme simetrisine sahip olduğundan ve bütün örgü konumları birbirinin aynı olduğundan tek bir düzen parametresi sistemin bütün fazını belirler. Şekil 3.5. ve 3.6.' da böyle bir sistem için *(J, μ)* düzleminde düzen parametresinin değeri çizilmiştir. Şekil 3.5.' de yalıtkan lobların dışındaki renkli çizgiler süper akışkan fazında düzen parametresinin sıfır olmayan eşyükseklik kontur grafiğine karşılık gelir. Şekil 3.9. ve 3.10' da gösterildiği gibi dış tuzaklama harmonik potansiyelinin bulunduğu bir sistemde ise farklı fazlar aynı anda var olabilir. Şekil 3.9. ve 3.10' da harmonik tuzağın merkezinde, (x_0, y_0), Mott yalıtkan fazı süper akışkan fazı ile çevrelenmiştir. Bu şekillerde gösterilen taban durum, sanal zaman evrim tekniği kullanılarak ortalama alan yaklaşımıyla elde edilmiştir.

4.1.1. Dinamik Gutzwiller Yaklaşımı

(4.1) denklemi ile belirtilen Gutzwiller dalga fonksiyonunun zamana bağlı versiyonu Gutzwiller olasılık genliklerini zamana bağlı duruma getirmekle elde edilebilir, $f_n^{(i)}(t)$. Olasılık genlikleri için hareket denklemleri, $S = \int dt\, \mathrm{L}$ ile verilen

sistemin etki integralinin $f_n^{(i)}(t)$ ve $f_n^{*(i)}(t)$ değişken parametrelerine göre minimize edilmesiyle elde edilir. $|\psi\rangle$ kuantum durumunda sistemin lagrangianı aşağıdaki gibi verilir.

$$L = \frac{\langle\psi|\dot{\psi}\rangle - \langle\dot{\psi}|\psi\rangle}{2i} - \langle\psi|H|\psi\rangle \tag{4.3}$$

Burada, $|\dot{\psi}\rangle$ (4.1) denklemi ile belirtilen dalga fonksiyonunun türevidir. Sistemin hareketinin olasılık genliğinin kompleks eşleniğine $f_n^{*(i)}(t)$ göre değişimi sıfıra eşitlenirse aşağıdaki denklem elde edilir.

$$i\hbar\frac{d}{dt}f_n^{(i)} = -J\left[\bar{\varphi}_i\sqrt{n}\,f_{n-1}^{(i)} + \bar{\varphi}_i^*\sqrt{n+1}\,f_{n+1}^{(i)}\right] + \left[\frac{U}{2}n(n-1) + n\sum_{j\neq i}V_{i,j}\langle\hat{n}_j\rangle - \mu_i n\right]f_n^{(i)} \tag{4.4}$$

Burada $\bar{\varphi}_i = \sum_{\langle j\rangle i}\varphi_j$, i konumunun bütün en yakın j komuşuları üzerinden toplamıdır. $\langle\hat{n}_j\rangle = \langle\psi\,|\,\hat{a}_j^+\hat{a}_j\,|\,\psi\rangle$ ise j konumundaki ortalama parçacık sayısıdır ve toplam parçacık sayısı $N = \sum_i\langle\hat{n}_i\rangle$ şeklinde verilir. (4.4) denklemleri Runge Kutta algoritması kullanılarak gerçek zaman t yada sanal zaman τ = it için çözülebilir. Sanal zaman kullanımı çoğunlukla kullanılan standart bir tekniktir, çünkü sanal zaman sonsuza giderken dağılımın taban duruma yaklaştığı farzedilir. Sanal zaman dönüşüm tekniği Gutzwiller dalga fonksiyonunun normunu korumadığından dalga fonksiyonu her bir adım aralığında normalize edilmelidir. Toplam parçacık sayısı korunmadığı için sanal zaman tekniği dipolar Hamitonyenleri için her zaman doğru taban duruma yaklaşmaz ve enerjinin yerel minimum olduğu yerlerde sıkışıp kalabilir. Bu yüzden sistemin taban durumunu belirlemek zordur ve bu sistemin yarı kararlı durumlarının olduğunun bir göstergesidir.

4.1.1.1. Perturbative Ortalama Alan Yaklaşımı

Bir dipolar hamiltonyenin yalıtkan fazını belirlemek için daha uygun bir metot düzen parametresinde Perturbative ortalama alan yaklaşımı kullanmaktır. Yok etme operatörünü $\hat{a}_i = \hat{\mathrm{A}}_i + \varphi_i$ şeklinde yazarak $\hat{a}_i^+ \hat{a}_j$ terimini tekrar düzenlersek

$$\begin{aligned} \hat{a}_i^+ \hat{a}_j &= \hat{\mathrm{A}}_i^+ \varphi_j + \hat{\mathrm{A}}_j \varphi_i^* + \varphi_i^* \varphi_j + \hat{\mathrm{A}}_i^+ \hat{\mathrm{A}}_j \\ &\simeq \hat{a}_i^+ \varphi_j + \hat{a}_j \varphi_i^* - \varphi_i^* \varphi_j \end{aligned} \tag{4.5}$$

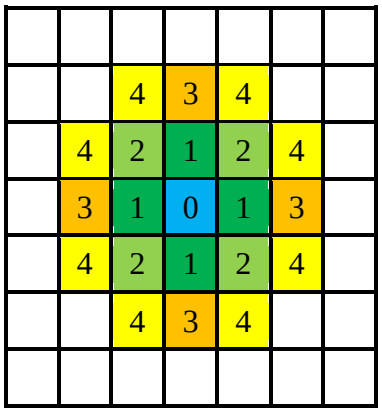
ifadesini elde ederiz. Burada $\hat{\mathrm{A}}_i^+ \hat{\mathrm{A}}_j \simeq 0$ olarak alınmıştır. (3.31) denklemindeki $\hat{a}_i^+ \hat{a}_j$ teriminin yerine yukarıda bulduğumuz ifade yazıldığında

$$\begin{aligned} \hat{H}_{MF} = &-\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{a}_i^+ \varphi_j + \hat{a}_j \varphi_i^* - \varphi_i^* \varphi_j) + H.c. \\ &+ \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \sum_i \mu_i \hat{n}_i + \sum_{i \neq j} \frac{V_{i,j}}{2} \hat{n}_i \hat{n}_j \end{aligned} \tag{4.6}$$

denklemi elde edilir. (4.6) denklemi ile belirtilen hamiltonyen optik örgüdeki tek bir konumu ifade eden $\hat{H}_i$ hamiltonyeni cinsinden ifade edilebilir. $f_n^{(i)}$ değerlerini bulmak için bu hamiltonyen köşegenleştirilir ve en küçük öz değere karşılık öz vektörler bulunur. (4.2) denklemi ile verilen düzen parametresine, φ_i, verilen ilk değerler ile hamiltonyen çözümünden elde edilen $f_n^{(i)}$ değerlerini kullanarak hesaplanan yeni düzen parametresi, φ_i^{yeni}, karşılaştırılır. Bu iki değer arasında istenilen tolerans gerçekleşene kadar bu işlem yenilenir.

4.1.1.2. Yarı Kararlı Durumlar (Metastable States)

Optik bir örgü üzerinde bulunan bozonlar arasındaki (4.4) denkleminde $V_{i,j}$ ile gösterilen dipol-dipol etkileşimleri hesaba katılınca dipolar bozon gazının taban durum fazında Mott yalıtkan ve süper akışkan fazlarının dışında dama tahtası (checkerboard) ve süper katı (supersolid) fazları oluşur (Christian Trefzger, 2009). Dama tahtası ve süper katı fazları en yakın birinci komşular arasındaki dipol-dipol etkileşimi alındığı anda ortaya çıkmaya başlar. Dipoller örgüye dik olarak konumlanmış ise aralarında $\vec{r}$ mesafesi olan iki parçacık arasındaki (3.22) denklemi ile belirtilen dipol etkileşimi, $U_{dd}(\vec{r}) = C_{dd} / (4\pi r^3)$ şeklini alır. Hesap kolaylığı için dipol etkileşimi dikkate alınırken etkileşen en yakın komşular sınırlanır. Şekil 4.1.' de 0 ile belirtilen örgü konumunun en yakın 4 komşusu gösterilmiştir.



Şekil 4.1. Sıfır ile belirtilen 2 boyutlu bir optik örgü konumunun en yakın dört komşusunun gösterimi.

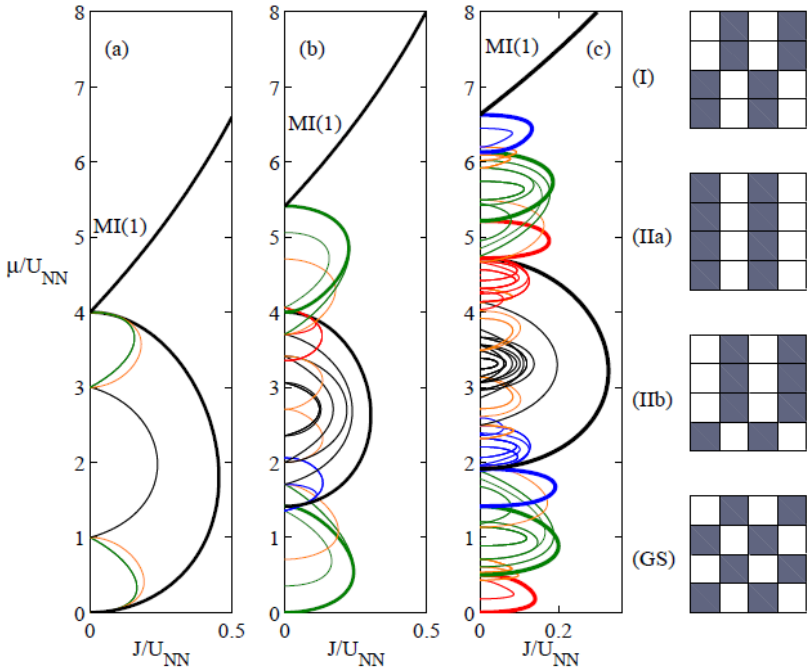
Süper akışkan süper katı fazı her bir örgü konumunda değişen atom sayısı ve düzen parametresinin sıfırdan farklı olması ile karakterize edilir. Yalıtkan dama tahtası fazı ise her bir örgü konumunun bir dolu bir boş şeklinde düzenlenmesi ile karakterize edilir. Bu iki faz normal süper akışkan ve Mott yalıtkan fazlarından farklıdır. Dama tahtası ve süper katı fazlarında atomlar optik örgü üzerine düzenli bir şekilde dağılırlar ama yalıtkan fazında bile genellikle tam sayı olmayan bir doluluk oranı ile ifade edilirler.

Bir durumun yarı kararlı olabilmesi için öncelikle bir yalıtkan loba sahip olması ve bu durumun enerjisinin taban durum enerjisinden daha yüksek olması gerekir. Dipolar etkileşimlerin yokluğunda sistemde yarı kararlı durumlar bulunamaz. Düşük tünelleme bölgesinde sistemin taban durumu tam sayı doluluk oranına, $\upsilon = N_a / N_s$ (

atom sayısı/örgü konum sayısı), sahip Mott yalıtkan loblarını içerirken tünellemenin yüksek olduğu bölgelerde ise sistem süper akışkan fazındadır. En yakın birinci komşular arasındaki etkileşimler dikkate alınır alınmaz bu yarı kararlı durumlar sistemde oluşmaya başlar. Sadece aynı konumdaki etkileşimlerin dikkate alındığı Bose-Hubbard hamiltonyenlerinin çözümü için kullanılan sanal zaman hesabı istemsiz olarak sistemin taban durumuna yaklaşırken dipolar hamiltonyenler için ise başlangıç koşullarına bağlı olarak farklı yarı kararlı durumlara yaklaşır.

Önceden yapılan bir tez çalışmasında (Christian Trefzger, 2009) taban durum (dış tuzaklama potansiyelinin yokluğunda) için elde edilen bu yarı kararlı durumlar şekil 4.2.'de özetlenmiştir. (3.31) denklemi ile belirtilen hamiltonyenin faz diyagramı periyodik sınır şartlarını sağlayan ve her iki yönde 4 örgü konumuna sahip 2 boyutlu bir optik örgü için çizilmiştir. Dipolar etkileşimler (a)' da en yakın birinci komşuda, (b)' de en yakın ikinci komşuda, (c)' de ise en yakın dördüncü komşuda kesilmiştir.

Kalın çizgiler taban duruma karşılık gelirken aynı renklerin aynı doluluk oranına karşılık geldiği ince çizgiler ise yarı kararlı yalıtkan durumlara karşılık gelir. Şekil 3.5. ile verilen doluluk oranlarının, $\upsilon = \bar{n}$, tam sayı olduğu Bose-Hubbard faz diyagramı ve şekil 4.2. ile verilen dipolar Bose-Hubbard faz diyagramı arasındaki fark en yakın birinci komşular arasındaki dipolar etkileşimin (şekil 4.2. (a)) ele alındığı andan itibaren oluşmaktadır. Dama tahtası görünümünde olan taban durumda (GS) beyaz bölgeler boş konumlara karşılık gelirken gri bölgeler doluluk oranı bir olan konumlara karşılık gelir. Şekil 4.2. (I)' da gösterilen yoğunluk dağılımı doluluk oranın, $\upsilon = 1/2$ olduğu yarı kararlı durumu ifade eder ve bu durumun yalıtkan lobu $1 < \mu / U_{NN} < 3$ aralığında yer alan ince çizgi ile verilir. Ayrıca şekil 4.2. (a)' da $0 < \mu / U_{NN} < 1$ aralığında yer alan iki lob doluluk oranlarının $\upsilon = 1/4, 5/16$ olduğu yarı kararlı durumlara karşılık gelirken $3 < \mu / U_{NN} < 4$ aralığında yer alan loblar ise doluluk oranlarının $\upsilon = 3/4, 11/16$ olduğu yarı kararlı durumlara karşılık gelir. Fakat bu doluluk oranları için taban durum bulunmaz. Taban durum loblarının hemen dışarısındaki bölgelerde düzen parametresinin, φ_i, sıfırdan farklı olduğu süper katı (SS) fazlarının varlığı ortaya çıkar.



Şekil 4.2. Dipol-dipol etkileşimlerinin birinci **(a)**, ikinci **(b)** ve dördüncü **(c)** en yakın komşularda kesildiği faz diyagramı. Kalın çizgiler taban duruma, diğer loblar ise karasız durumlara karşılık gelir. Aynı renkler aynı doluluk oranını ifade eder. (c)' de doluluk oranları $\upsilon = 1/8$ ve $\upsilon = 1$ arasında yer alır. Sağ sütunda en yakın birinci komşu (I) ve en yakın ikinci komşu (IIa, IIb) etkileşimleri dikkate alındığında ortaya çıkan doluluk oranının $\upsilon = 1/2$ olduğu yarı kararlı durumlar ve bu doluluk oranına karşılık gelen taban durum (GS) verilmiştir.

Etkileşen en yakın komşu sayılarının artırılması oluşabilecek yarı kararlı durumların sayısının artmasına neden olur. (IIa) ve (IIb)' de en yakın iki komşular arasındaki dipolar etkileşimin göz önüne alınması sonucu oluşan $\upsilon = 1/2$ doluluk oranındaki yarı kararlı durumlar gösterilmektedir. Yarı kararlı durumların sayısı Hamiltonyen parametrelerine ve doluluk oranına bağlıdır. Olası bütün υ değerleri ve bunlara karşılık gelen yarı kararlı durum konfigürasyonları optik örgü hücresinin boyutlarına bağlıdır. L boyutundaki bir örgüde olası doluluk oranları $\upsilon = 1/L^2$ ile verilir.

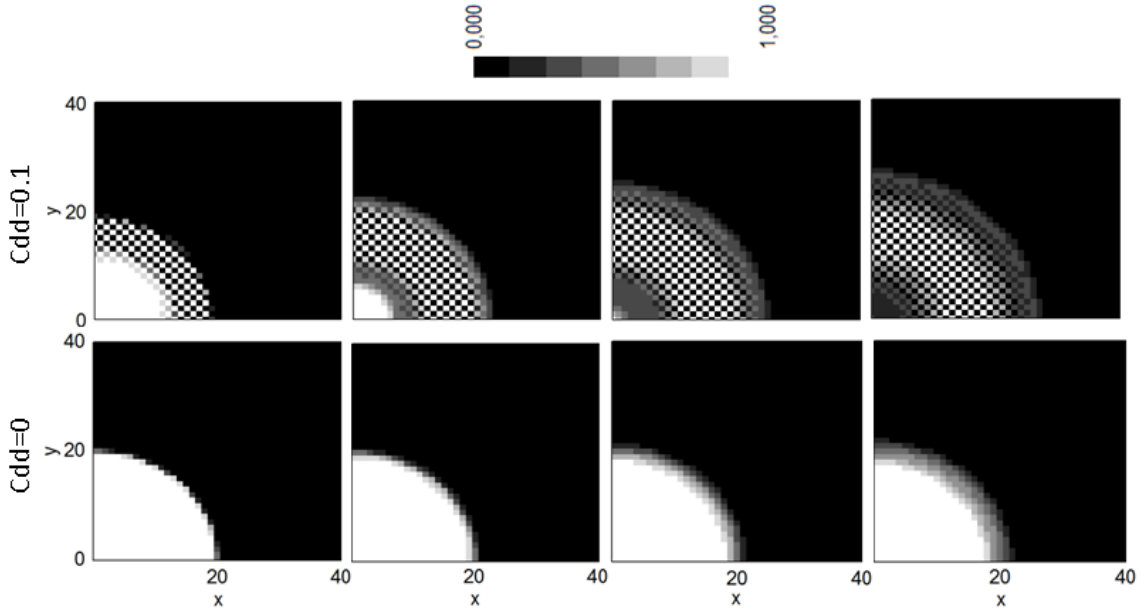
5. SONUÇLAR VE YORUMLAR

5.1. İki Yönde ve Tek Yönde Adyabatik Genleşen Bose Gazının Dinamiği

Biz bu tez çalışmasının ilk kısmında, optik bir örgü üzerinde bulunan bozonların harmonik bir dış tuzaklama potansiyeli kullanılarak tuzaklanmasının ardından tuzağın kaldırılması durumunda sistemin dinamik davranışını ele aldık ve dipolar ve dipolar olmayan Bose gazının genişlemesini inceledik. Standart Bose-Hubbard modelinin tersine genişletilmiş Bose-Hubbard modeli sistemdeki taban durumun yanında yarı kararlı durumların varlığını da ortaya koyar. Bu çalışmada başlangıç koşulları sistemin büyük bir çoğunluğunu bir doluluk oranına sahip Mott yalıtkan fazı oluşturacak şekilde hazırlandı. Dipol etkileşimlerinin varlığında sistem hem tek yönde hem de bütün yönlerde genişlerken oluşan farklı yarı kararlı durumlar gözlemlendi. Şekil 5.2.' de farklı *U/J* değerlerine sahip iki sistemin yoğunluk profillerinin karşılaştırılması yer almaktadır. Sistem genişlerken zaman içerisinde farklı ortalama doluluk oranlarına sahip yarı kararlı durum konfigürasyonları da değişmektedir. Dipolar etkileşimlerin dikkate alınması farklı yarı kararlı durumların ortaya çıkmasına neden olmuştur. Bu yarı kararlı durumlar düşük tünelleme bölgesinde (*J*) yer almaktadır. *J* değiştirildiği zaman oluşabilecek farklı yarı kararlı durum konfigürasyonları da değişmektedir. Şekil 5.1.' de her bir örgü konumundaki doluluk oranı bir doluluğu ifade eden beyaz, sıfır doluluğu ifade eden siyah ve 0 ile 1 aralığındaki doluluğu ifade eden gri renkleri ile verilmiştir. *J*'nin daha düşük değerlerinde genişleyen Bose gazının dairesel simetrisinin bozulduğu dikkat çekmektedir. Dipolar etkileşimlerin yokluğunda ise sistem genişlerken Mott fazı yarı kararlı durumlara dönüşmeden yavaşça süper akışkan fazına geçmektedir. Ayrıca sistemin dairesel simetrisi de korunmaktadır. Dipolar etkileşimlerinin varlığında genişleyen Mott fazı yine yavaşça erir fakat bu sefer Mott fazını çevreleyen faz süper akışkan fazı değil ½ doluluk oranına sahip dama tahtası fazı olarak adlandırılan yalıtkan bir fazdır.

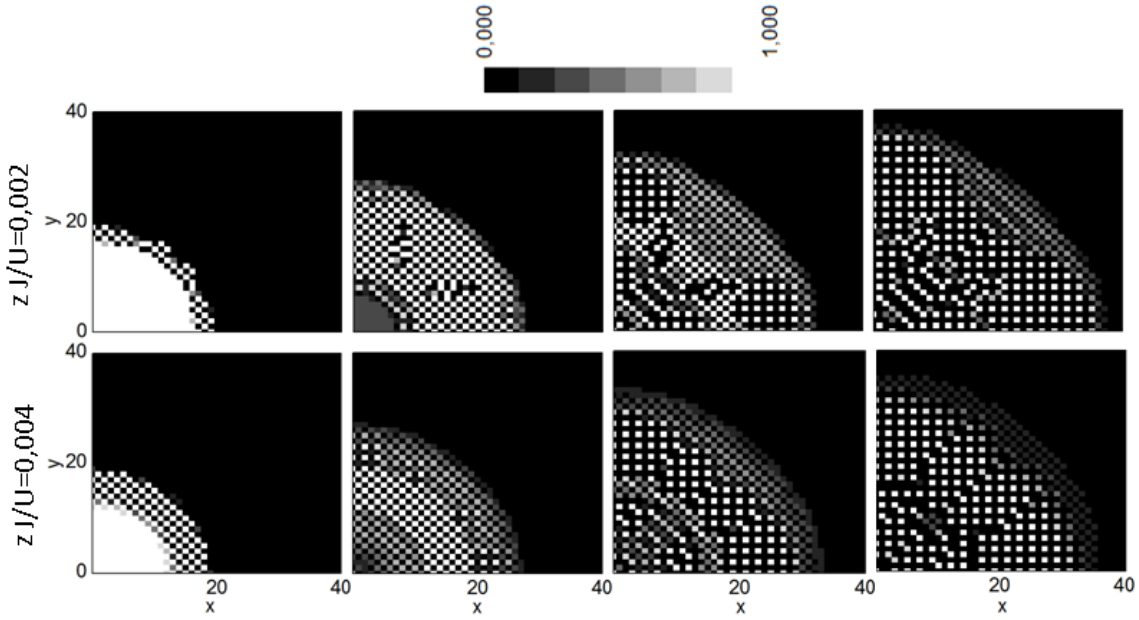
Şekil 5.1.'de sistemde dipol etkileşimini göz önüne aldığımızda ve yok saydığımızda dinamik Gutzwiller ortalama alan yaklaşımı kullanılarak elde edilen yoğunluk dağılımı yer almaktadır. Sistem simetrik bir yapıya sahip olduğu için optik örgünün çeyreği alınmıştır. Dipol etkileşimleri yokken sistem yarı kararlı durumlar oluşturmadan direkt olarak süper akışkan faz durumunu koruyarak genişlemeye başlar ve düzenli bir yoğunluk dağılımı gösterir. Şekil 5.1.' de ilk sütun sistemin tuzak

kaldırılmadan önceki ilk halidir. Sağa doğru ilerleyen sütunlarda ise sistemin sırası ile t= 20, 40, 60 zamanlarındaki yoğunluk profilleri yer almaktadır.



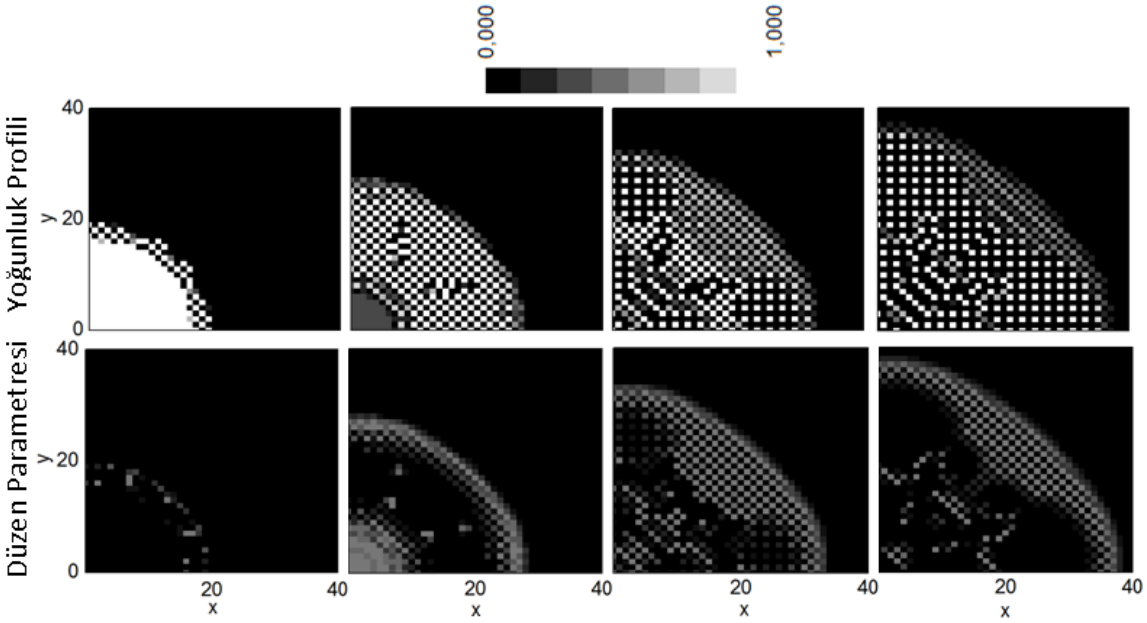
Şekil 5.1. Tuzak kaldırıldığında dipol etkileşimleri varken (C_{dd}=0.1) ve yokken (C_{dd} =0) yoğunluk dağılımının zamanla karşılaştırılması. Genişleme zamanı, t=0,20,40,60, sağa doğru artmaktadır (zJ/U=0.01). Zaman birimi ħ/J olarak alınmıştır.

Şekil 5.2.' de dipol etkileşimlerinin varlığında farklı iki tünelleme değeri *(zJ/U)* için sağa doğru artan zamanlarda yoğunluk profilinin karşılaştırılması verilmiştir. Tünelleme değeri artıkça sistemin genişleme hızı da artmaktadır. *zJ/U* değeri küçüldükçe sistemin dairesel simetrisi bozulmaktadır.



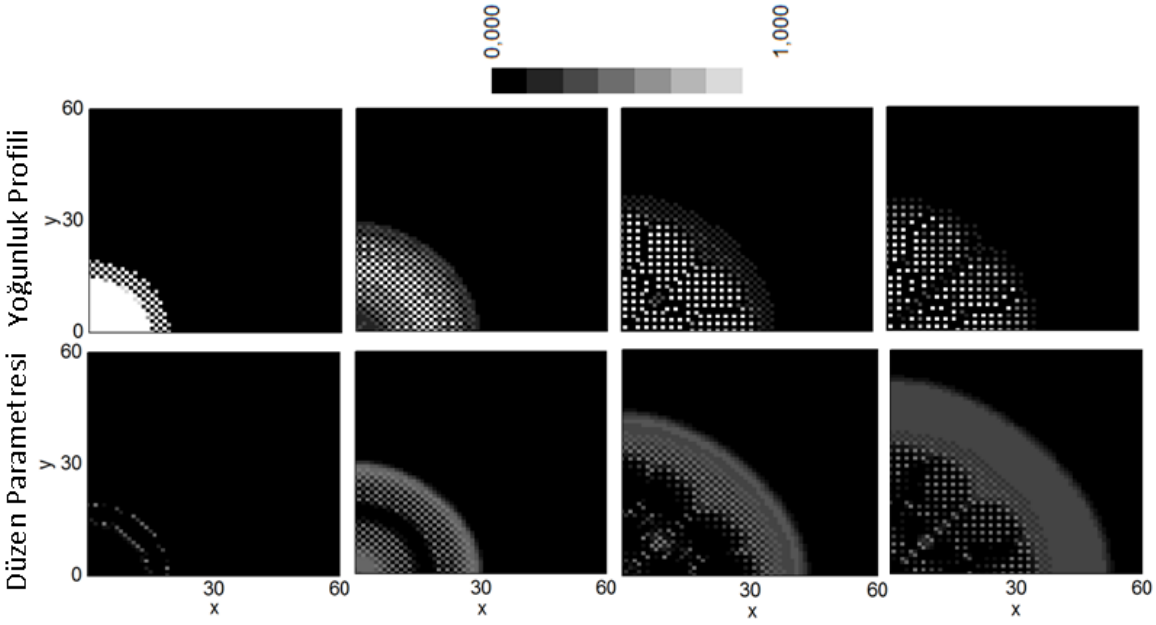
Şekil 5.2. Tuzak kaldırıldıktan sonra farklı zJ/U değerleri için yoğunluk profilinin sağa doğru artan zaman değerlerinde (t=0,100,200,300) karşılaştırılması (C_{dd} =0.1). Zaman birimi ħ/J olarak alınmıştır.

Şekil 5.3.' de sağa doğru artan zamanlarda sistem genişlerken z*J/U*=0.002 değeri için sistemin yoğunluk profili ve ona karşılık gelen düzen parametresi yer almaktadır. Düzen parametresi Mott yalıtkan fazında sıfır değerini alırken süper akışkan fazında sıfır olmayan bir değer alır. Burada düzen parametresini ifade eden grafiklerde siyah ile gösterilen bölgelerde sistemin sahip olduğu yoğunluk değeri aynıdır. Bu yoğunluk değeri 1 ya da 1' den küçük bir sayı olabilir. Sistem bu siyah bölgenin her yerinde sabit yoğunluk değerine sahiptir ve Mott fazındadır.

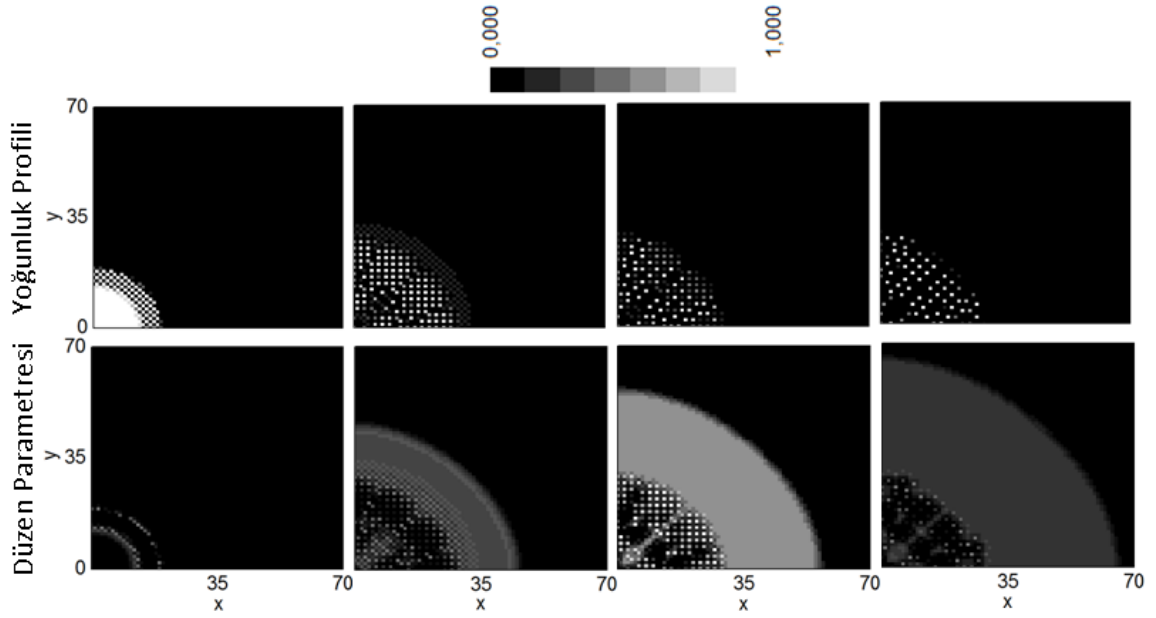


Şekil 5.3. Sağa doğru artan t=0,100,200,300 genişleme zamanlarında zJ/U=0.002 değeri için sistemin yoğunluk profili ve ona karşılık gelen düzen parametresi (C_{dd} =0.1). Zaman birimi ħ/J olarak alınmıştır.

Şekil 5.4.' de z*J/U*=0.006 ve şekil 5.5' de z*J/U*= 0.008 değeri için sağa doğru artan zamanlarda sistemin yoğunluk profilleri ve onlara karşılık gelen düzen parametreleri verilmiştir. Her iki şekilde de düzen parametresinin değeri yoğunluk profilinin değerine göre daha geniş bir alana yayılmış olarak görünse de bu aslında yoğunluk profilinin aynı bölgelerde sıfıra yakın değer almasından kaynaklanır. Bu bölgelerde sistem süper akışkan fazındadır.

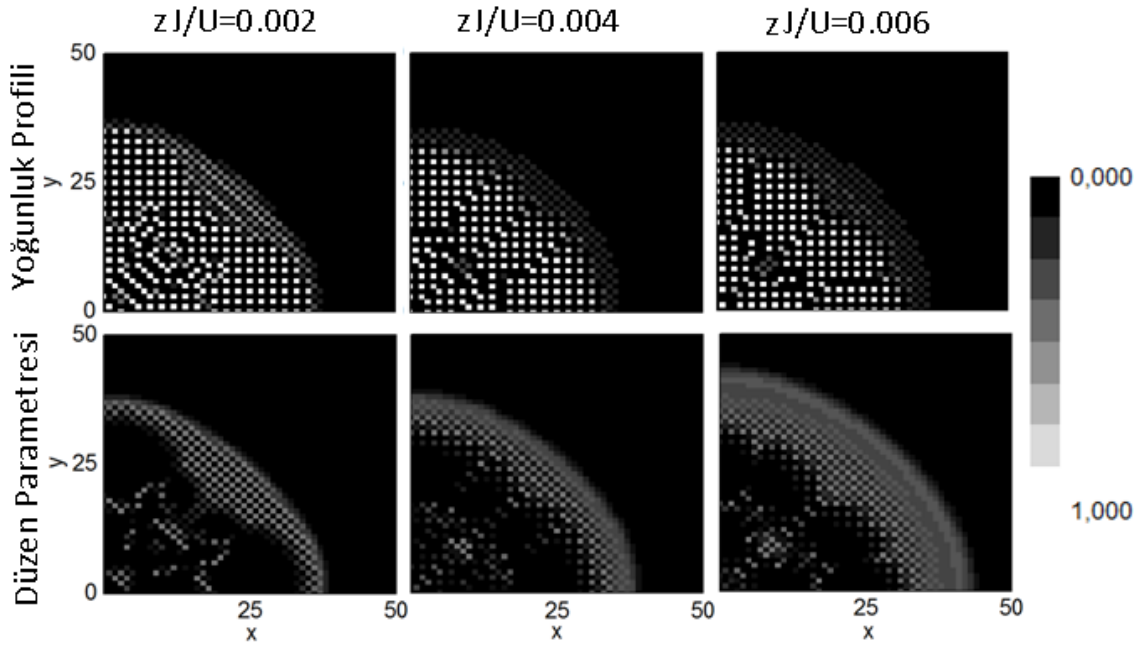


Şekil 5.4. Sağa doğru artan t=0,100,300,500 genişleme zamanlarında zJ/U=0.006 değeri için sistemin yoğunluk profili ve ona karşılık gelen düzen parametresi (C_{dd} =0.1). Zaman birimi ħ/J olarak alınmıştır.



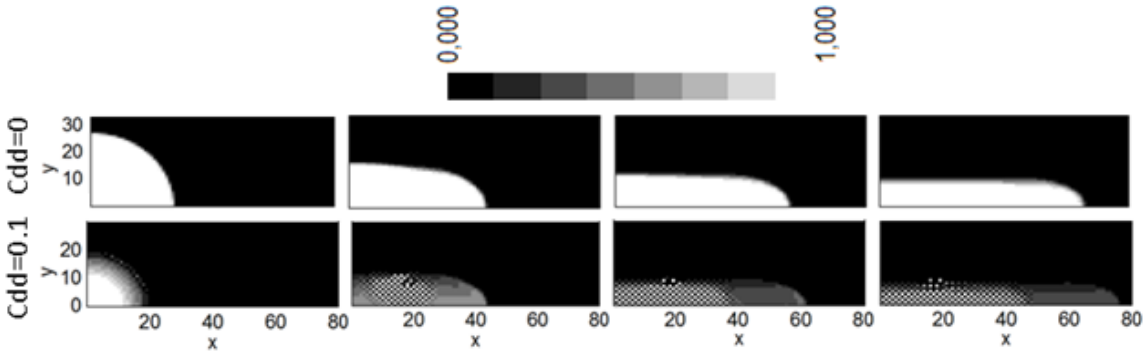
Şekil 5.5. Sağa doğru artan t=0,300,500,700 genişleme zamanlarında zJ/U=0.008 değeri için sistemin yoğunluk profili ve ona karşılık gelen düzen parametresi (C_{dd} =0.1). Zaman birimi ħ/J olarak alınmıştır.

Şekil 5.6.' da üç farklı *zJ/U* değeri için *t*=300 genişleme zamanında sistemin yoğunluk profili ve ona karşılık gelen düzen parametreleri verilmiştir. Tünelleme teriminin değeri değiştikçe oluşan yarı kararlı durum konfigürasyonlarının da değiştiği görülmektedir.



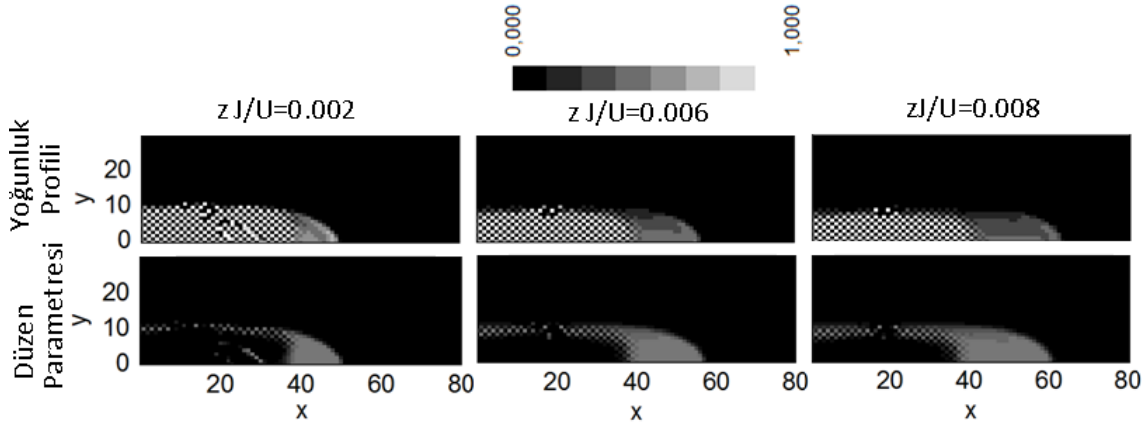
Şekil 5.6. Sistemin yoğunluk profili ve ona karşılık gelen düzen parametresinin genişleme zamanı t=300 'de zJ/U=0.002, zJ/U=0.004 ve zJ/U=0.006 değerleri için karşılaştırılması (C_{dd} =0.1). Zaman birimi ħ/J olarak alınmıştır.

Şekil 5.7.' de tuzak tek yönde kaldırıldıktan sonra dipol etkileşimlerinin varlığında ve yokluğunda dinamik Gutzwiller ortalama alan yaklaşımı kullanılarak elde edilen farklı zamanlara ait yoğunluk dağılımları yer almaktadır. Sistem simetrik bir yapıya sahip olduğu için optik örgünün çeyreği alınmıştır. Şekil 5.7.' deki ilk sütun sistemin tuzak kaldırılmadan önceki ilk halidir. Sağa doğru ilerleyen sütunlarda ise sistemin sırası ile *t*= 100, 200, 300 zamanlarındaki yoğunluk profilleri yer almaktadır. Burada dikkat çeken her iki durumda da sistemdeki parçacıkların *y* doğrultusunda tuzağın merkezine doğru toplanırken *x* doğrultusunda dışarı doğru hareket etmesidir.



Şekil 5.7. Tuzak tek yönde kaldırıldığında dipol etkileşimleri varken (C_{dd} =0.1) ve yokken (C_{dd} =0) adyabatik genleşme yoğunluk dağılımının zamanla karşılaştırılması. Genişleme zamanı (t=0, 100, 200, 300) sağa doğru artmaktadır (zJ/U=0.01). Zaman birimi ħ/J olarak alınmıştır.

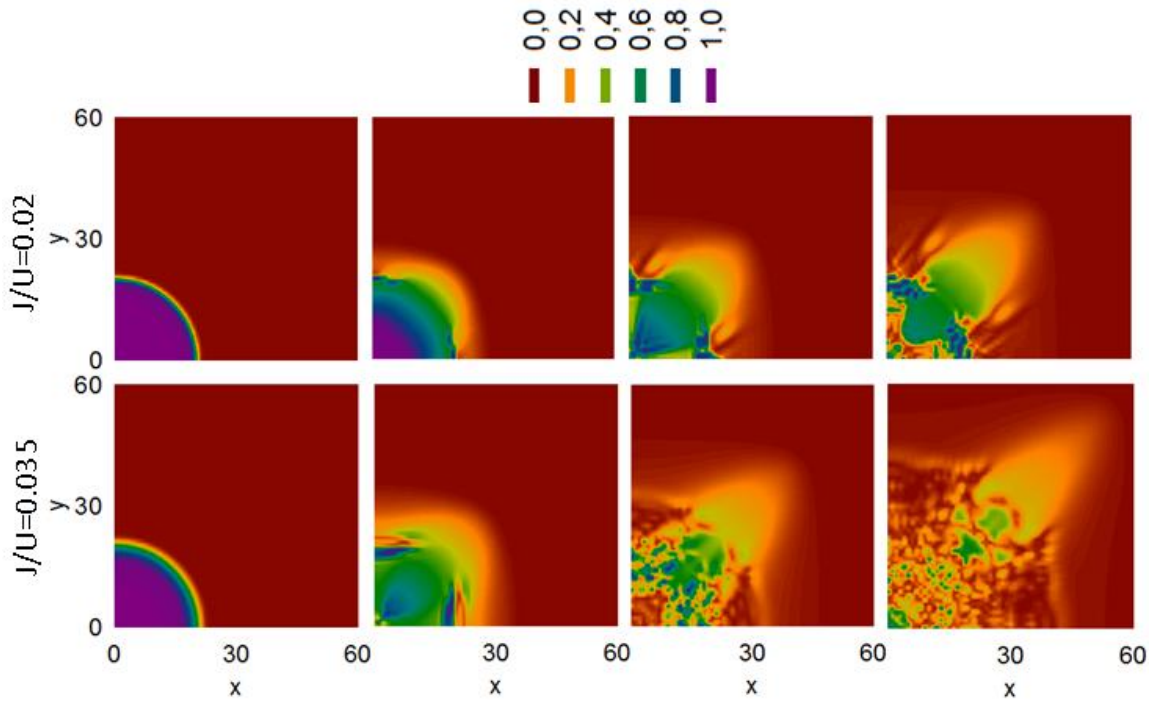
Şekil 5.8.’ de tuzak tek yönde kaldırıldıktan sonra üç farklı z*J/U* değeri için *t*=200 genişleme zamanında elde edilen sistemin yoğunluk profili ve ona karşılık gelen düzen parametreleri verilmiştir. Düzen parametresi grafiklerinde siyah ile gösterilen bölgeler parçacıkların düzenli bir biçimde dağıldığını gösteren Mott yalıtkan fazına karşılık gelmektedir.



Şekil 5.8. Tek yönde adyabatik genleşme için sistemin yoğunluk profili ve ona karşılık gelen düzen parametresinin genişleme zamanı t=200’ de zJ/U=0.002, zJ/U=0.006 ve zJ/U=0.008 değerleri için karşılaştırılması (C_{dd} =0.1). Zaman birimi ħ/J olarak alınmıştır.

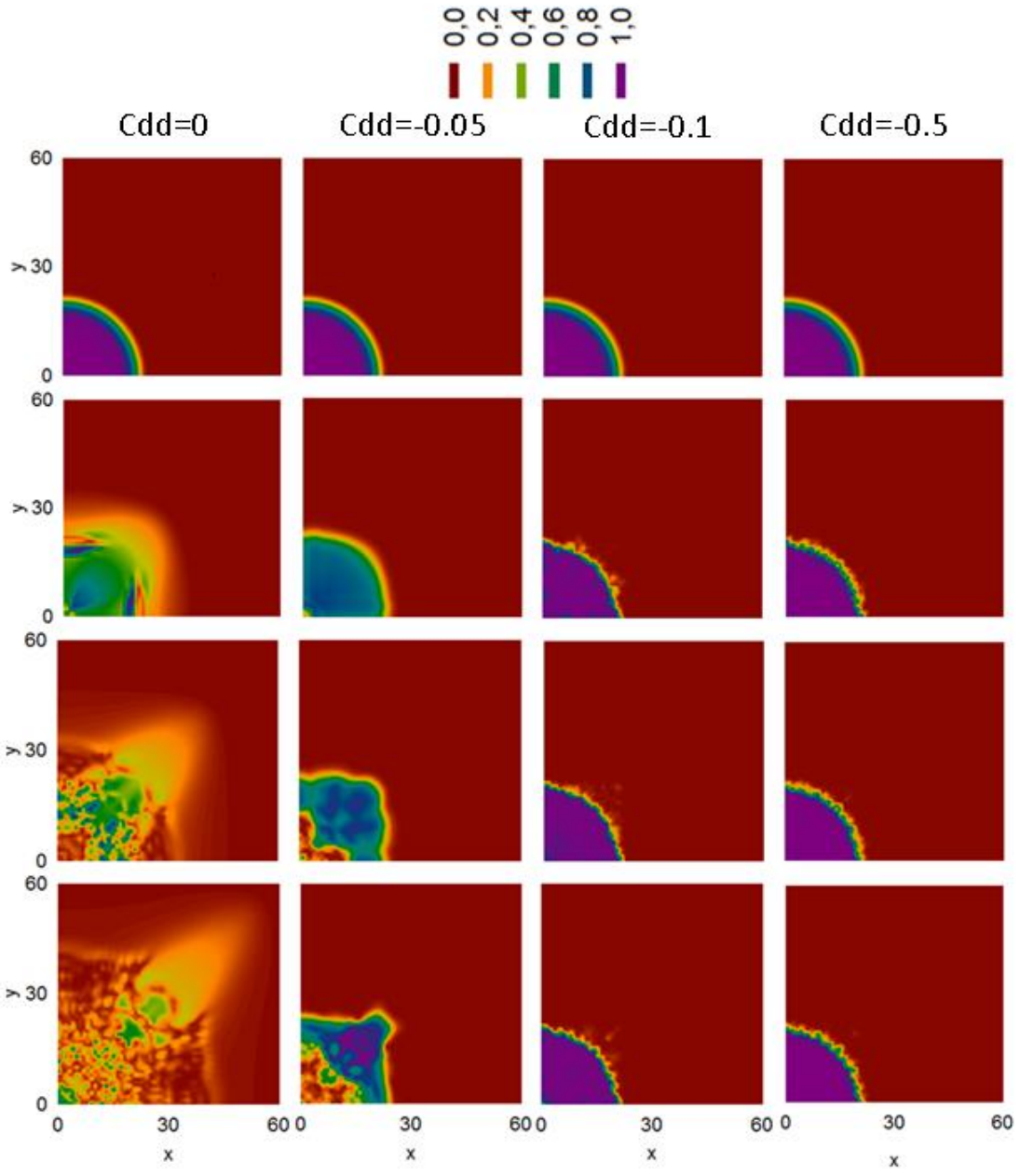
5.1.1. İki Yönde ve Tek Yönde Serbest Genleşen Bose Gazının Dinamiği

Adyabatik genleşmede tuzak yavaş yavaş kaldırılırken serbest genleşmede ise ani bir şekilde kaldırılmaktadır. Adyabatik genleşmede olduğu gibi serbest genleşmede de tuzak kaldırıldıktan sonra sistemin genişlemesini ilk olarak dipol etkileşimleri yokken daha sonra dipol etkileşimleri varken inceledik. Serbest genleşmede sistemin pozitif ve negatif dipol etkileşimlerinin varlığında farklı davranışlar gösterdiğini gördük. Şekil 5.9.' da dinamik Gutzwiller ve perturbative ortalama alan yaklaşımı kullanılarak elde edilen yoğunluk profilleri verilmiştir. Farklı iki *J/U* değeri için verilen bu yoğunluk profilleri dipol etkileşimleri yokken elde edilmiştir. İlk sütun doluluk oranının bir olduğu sistemin başlangıç halidir ve diğer sütunlar ise sağa doğru artan zamanlarda sistemin yoğunluk profilini göstermektedir. Adyabatik genleşmede olduğu gibi serbest genleşmede de tünelleme değeri arttıkça sistemin genişleme hızı da artmaktadır. Burada ilginç olan adyabatik genleşmenin tersine sistemin dairesel yapısını korumaması ve optik örgünün köşelerine doğru genişlemesidir (grafikler optik örgünün bir çeyreğini göstermektedir).



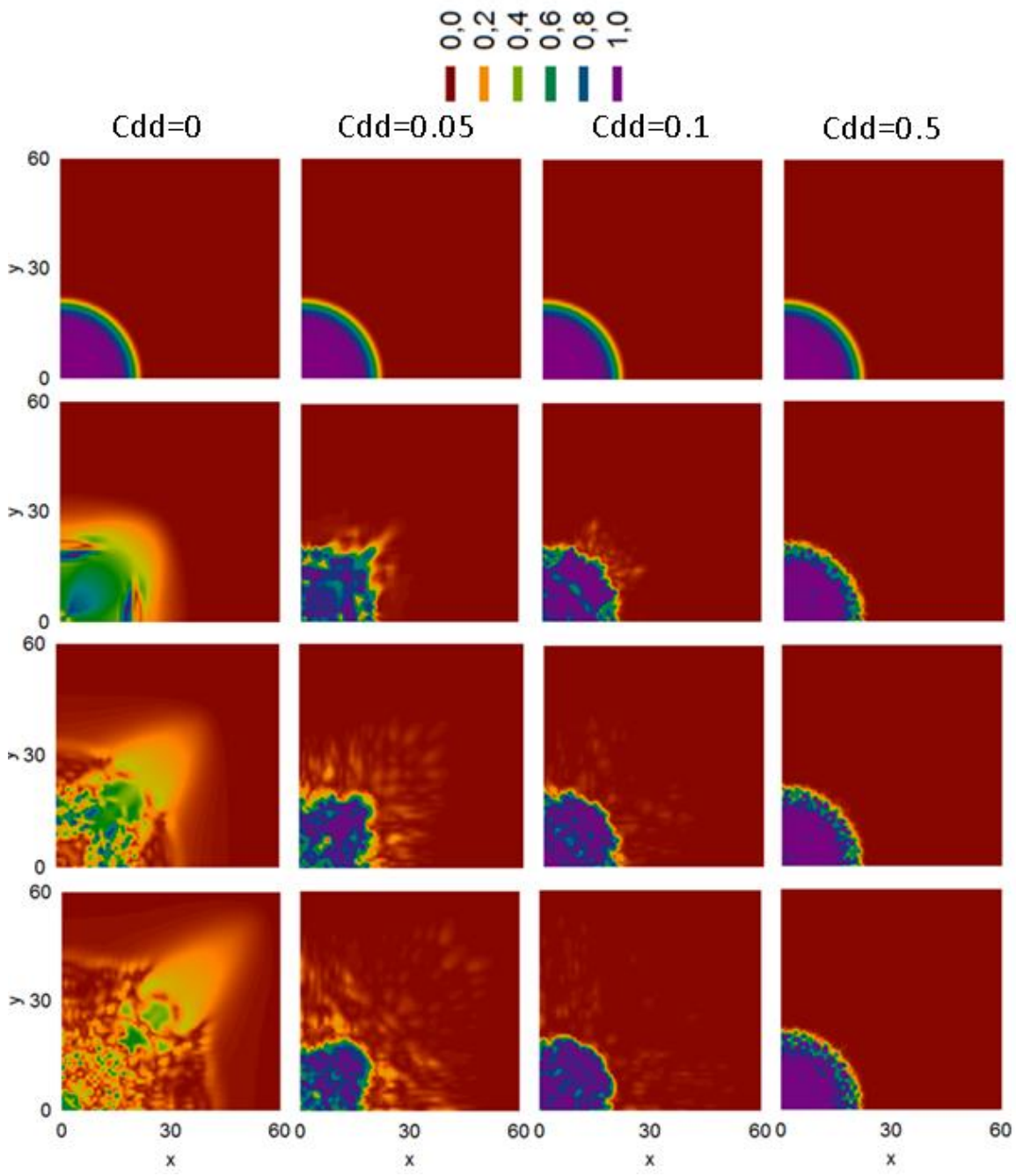
Şekil 5.9. Tuzak kaldırıldıktan sonra farklı J/U değerleri için yoğunluk profilinin sağa doğru artan zaman değerlerinde (t=0,200,400,600) karşılaştırılması (C_{dd} =0). Zaman birimi ħ/J olarak alınmıştır.

Şekil 5.10.' da farklı negatif dipol etkileşim sabitleri için aşağıya doğru artan zamanlarda sistemin serbest genleşme yoğunluk profilleri verilmiştir. Dipol etkileşimleri negatif iken sistemdeki parçacıklar arasında çekici bir etkileşim vardır. Parçacıklar arasındaki dipol etkileşim enerjisi arttıkça sistemin dağılması engellenmektedir. C_{dd}= -0.1 değeri ve bu değerden sonraki diğer C_{dd} değerleri için yoğunluk profili hemen hemen aynıdır ve sistem dağılmayarak ilk halini korumaktadır. Bu nedenle C_{dd}= -0.1 değeri kritik bir değer niteliğindedir.



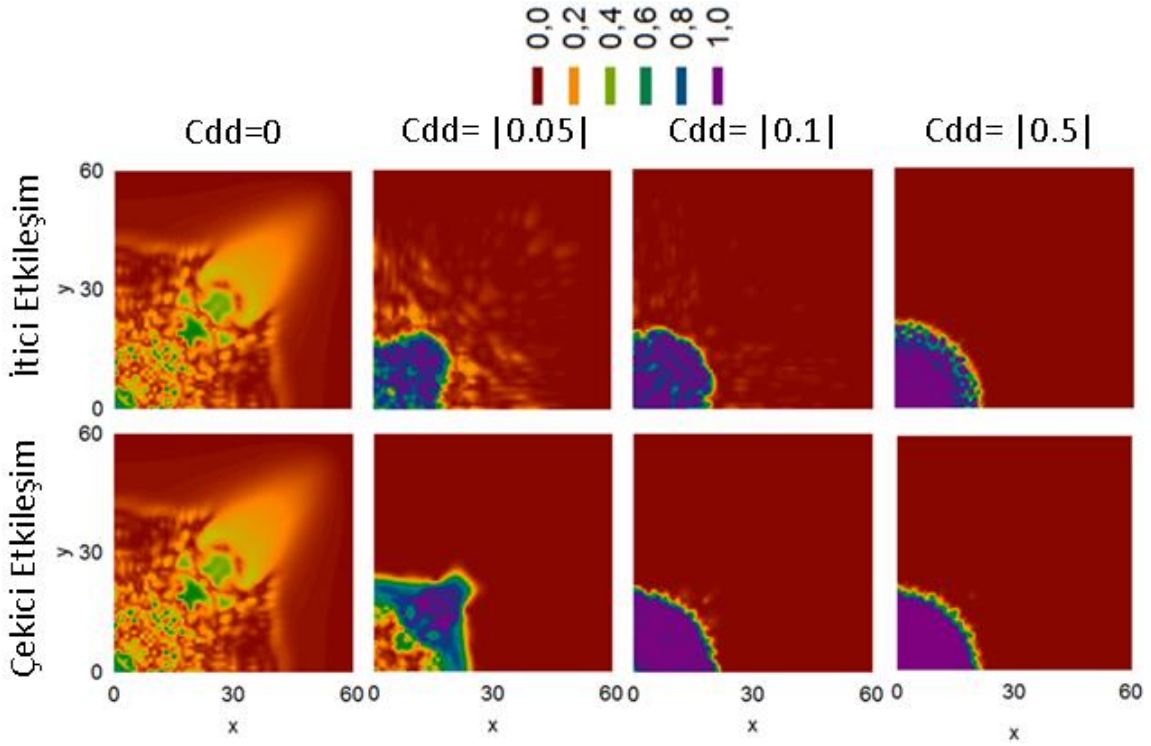
Şekil 5.10. Tuzak kaldırıldıktan sonra farklı negatif (çekici etkileşim) C_{dd} değerleri için yoğunluk profilinin aşağıya doğru artan zaman değerlerinde (t=0,200,400,600) karşılaştırılması (J/U=0.035). Zaman birimi ħ/J olarak alınmıştır.

Şekil 5.11.’ de farklı pozitif dipol etkileşim sabitleri için aşağıya doğru artan zamanlarda sistemin serbest genleşme yoğunluk profilleri verilmiştir. Dipol etkileşimleri pozitif iken sistemdeki parçacıklar arasında itici bir etkileşim vardır ve basit bir bakış açısıyla tuzak kaldırıldıktan sonra sistemin genişlemesi beklenebilir. Hesap sonuçları ise bunun tersini göstermektedir yani çekici etkileşimlerde olduğu gibi sistemin dağılmayıp bir arada kaldığını göstermektedir. Burada sistemi bir arada tutan etken tuzak kaldırıldıktan sonra Mott yalıtkan fazının en dışındaki parçacıkların diğer parçacıklardan ayrılırken onlara ters yönde uyguladığı bir itme kuvvetidir. Grafiklerde sarı ile belirtilen bölgeler tuzaktan ayrılan parçacıkların yoğunluklarıdır. Burada da dipol etkileşimlerinin negatif olduğu durumdaki gibi dipol etkileşim sabitinin değeri arttıkça sistem dairesel simetrisini korumaktadır.



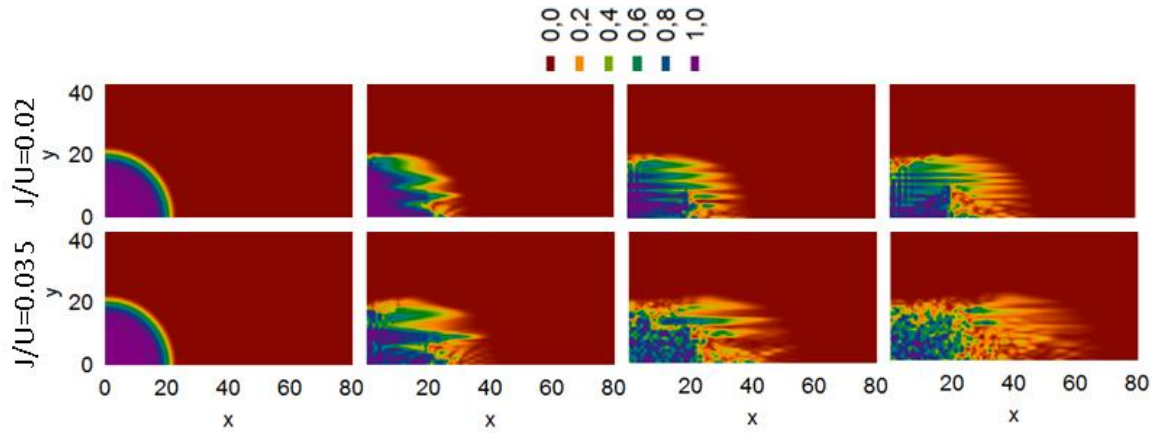
Şekil 5.11. Tuzak kaldırıldıktan sonra farklı pozitif (itici etkileşim) C_{dd} değerleri için yoğunluk profilinin aşağıya doğru artan zaman değerlerinde (t=0,200,400,600) karşılaştırılması (J/U=0.035). Zaman birimi ħ/J olarak alınmıştır.

Şekil 5.12.' de dipol etkileşimlerinin çekici ve itici olduğu durumlarda *t*=600 genişleme zamanında farklı dipol etkileşim sabitleri için sistemin serbest genleşme profilleri karşılaştırılmıştır. Her iki durumda da sistem büyük bir oranda ilk halini korusa da itici etkileşimlerde sistemden ayrılan parçacıkların varlığı dikkat çekmektedir.



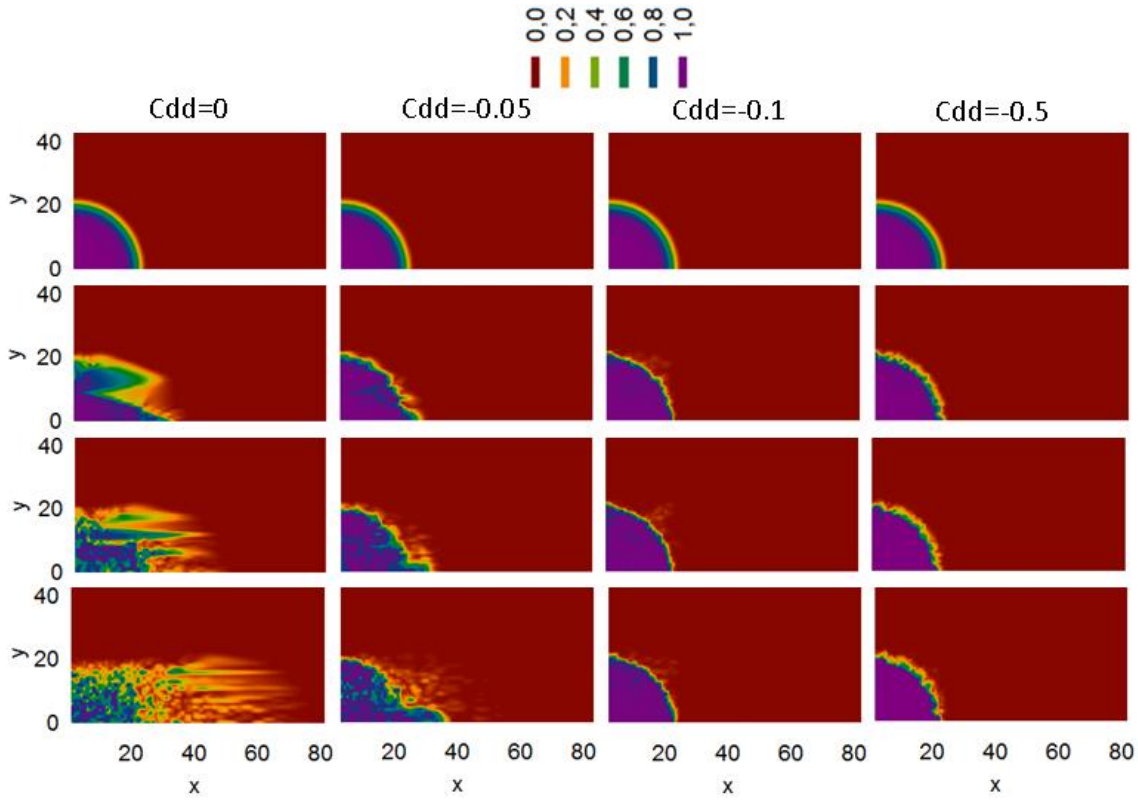
Şekil 5.12. Tuzak kaldırıldıktan sonra farklı pozitif (itici etkileşim) ve farklı negatif (çekici etkileşim) C_{dd} değerleri için yoğunluk profilinin t= 600 değerlerinde karşılaştırılması (J/U=0.035). Zaman birimi ħ/J olarak alınmıştır.

Şekil 5.13.' de tuzak *x* yönünde kaldırıldıktan sonra iki farklı *J/U* değerleri için sistemde dipol etkileşimleri yokken serbest genleşme yoğunluk profilleri sağa doğru artan zamanlarda verilmiştir. Her iki durumda da sistem genişlerken bant yapısına benzer yapılar oluşur.



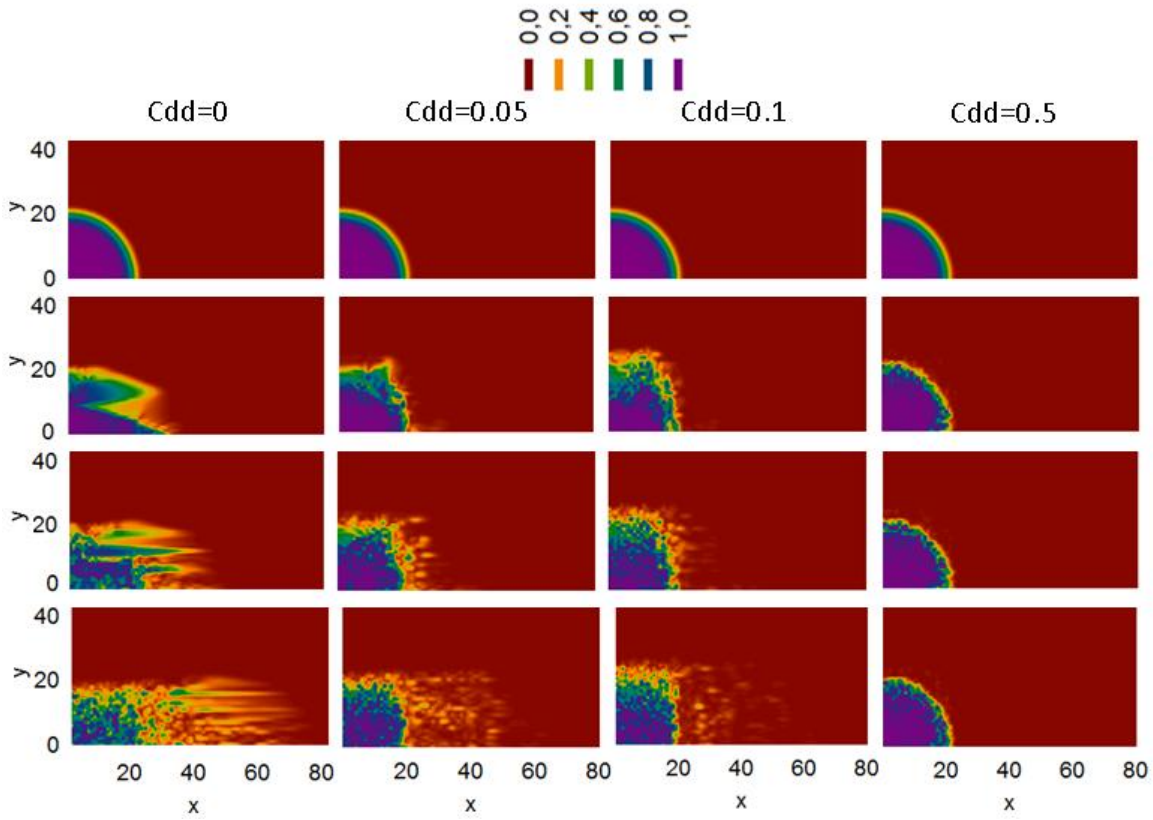
Şekil 5.13. Tuzak tek yönde kaldırıldıktan sonra farklı J/U değerleri için yoğunluk profilinin sağa doğru artan zaman değerlerinde (t=0,300,500,700) karşılaştırılması (C_{dd} =0). Zaman birimi ħ/J olarak alınmıştır.

Şekil 5.14.' de tuzak tek yönde kaldırıldıktan sonra farklı negatif dipol etkileşim sabitleri için aşağıya doğru artan zamanlarda sistemin tek yönde serbest genleşme yoğunluk profilleri verilmiştir. C_{dd}= -0.05 değeri oldukça küçük bir etkileşim sabiti olduğundan bu değer için *x* eksenine yakın bölgede meydana gelen dağılım dikkat çekmektedir.



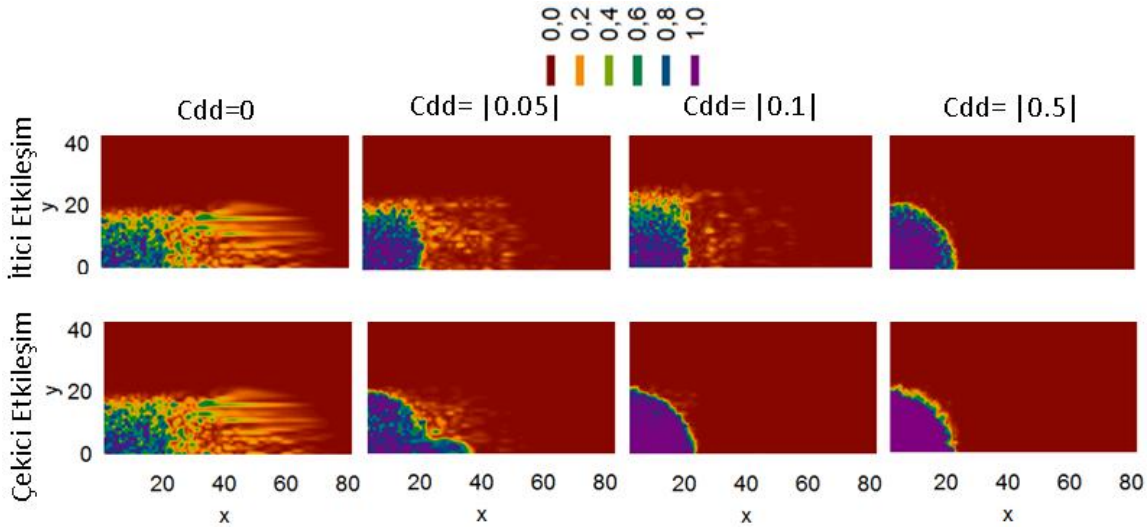
Şekil 5.14. Tuzak tek yönde kaldırıldıktan sonra farklı negatif (çekici etkileşim) C_{dd} değerleri için yoğunluk profilinin aşağıya doğru artan zaman değerlerinde (t=0,200,400,800) karşılaştırılması (J/U=0.035). Zaman birimi ħ/J olarak alınmıştır.

Şekil 5.15.' de tuzak tek yönde kaldırıldıktan sonra farklı pozitif dipol etkileşim sabitleri için aşağıya doğru artan zamanlarda sistemin tek yönde serbest genleşme yoğunluk profilleri verilmiştir. Dipol etkileşimleri pozitif iken sistemdeki parçacıklar arasında itici bir etkileşim vardır ve tuzak kaldırıldıktan sonra sistemin genişlemesi beklenmektedir. Hesap sonuçları ise C_{dd} katsayısını artırdıkça çekici etkileşimlerde olduğu gibi sistemin dağılmayıp bir arada kaldığını göstermektedir. İki yönde serbest genleşmede olduğu gibi burada da sistemi bir arada tutan etken tuzak kaldırıldıktan sonra Mott yalıtkan fazının en dışındaki parçacıkların diğer parçacıklardan ayrılırken onlara ters yönde uyguladığı bir itme kuvvetidir.



Şekil 5.15. Tuzak tek yönde kaldırıldıktan sonra farklı pozitif (itici etkileşim) C_{dd} değerleri için yoğunluk profilinin aşağıya doğru artan zaman değerlerinde (t=0,200,400,800) karşılaştırılması (J/U=0.035). Zaman birimi ħ/J olarak alınmıştır.

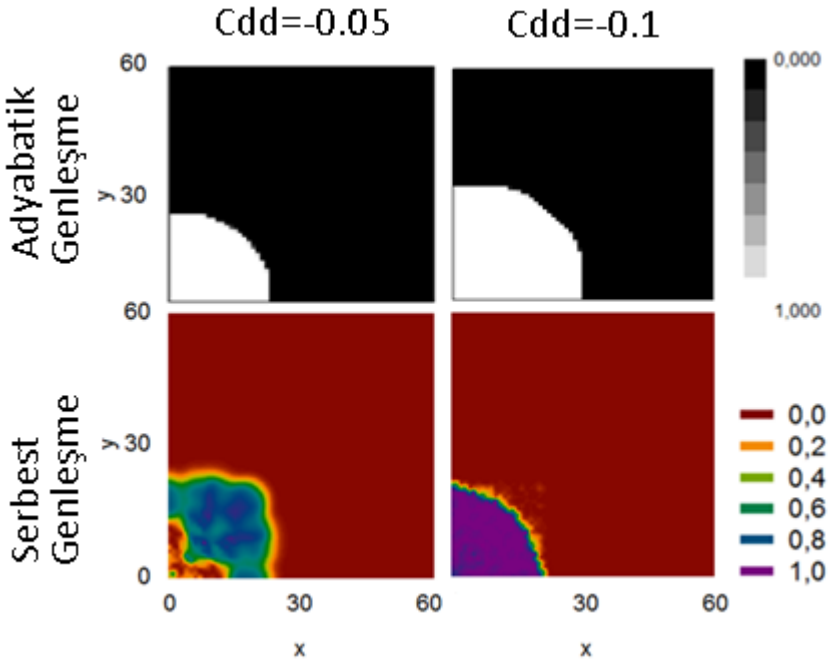
Şekil 5.16.' da dipol etkileşimlerinin çekici ve itici olduğu durumlarda *t*=800 genişleme zamanında farklı dipol etkileşim sabitleri için sistemin tek yönde serbest genleşme profilleri karşılaştırılmıştır. Her iki durumda da sistem büyük bir oranda ilk halini korusa da itici etkileşimlerde C_{dd} = 0.1 değerinde sistemden ayrılan parçacıkların varlığı dikkat çekmektedir.



Şekil 5.16. Tuzak tek yönde kaldırıldıktan sonra farklı pozitif (itici etkileşim) ve farklı negatif (çekici etkileşim) C_{dd} değerleri için yoğunluk profilinin t= 800 değerlerinde karşılaştırılması (J/U=0.035). Zaman birimi ħ/J olarak alınmıştır.

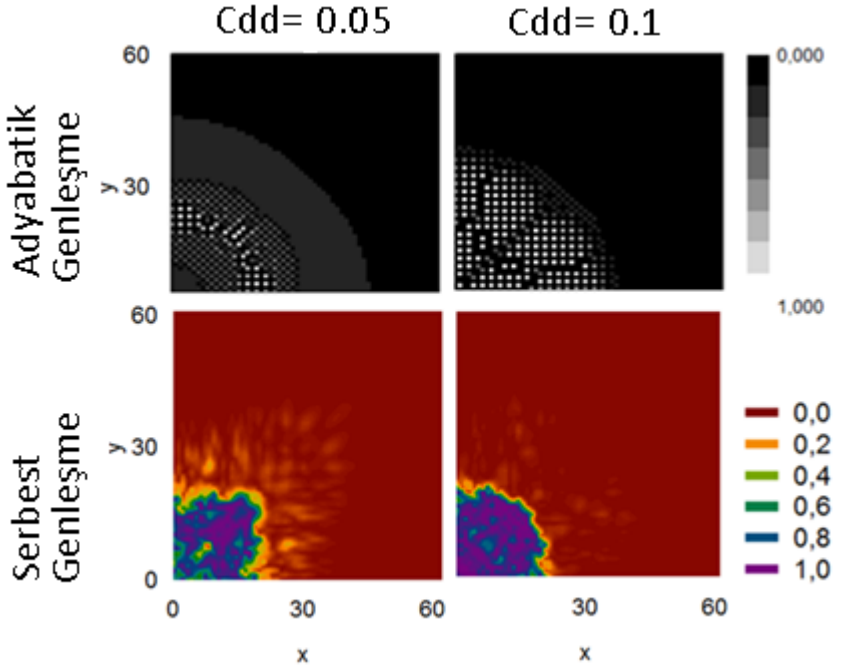
5.1.1.1. İki Yönde Adyabatik ve Serbest Genleşen Bose Gazının Karşılaştırılması

Bu bölümde iki yönde adyabatik ve serbest genleşen Bose gazının itici ve çekici etkileşimler için karşılaştırılması verilmiştir. Şekil 5.17.' de tuzak kaldırıldıktan sonra adyabatik ve serbest genleşmenin *t*= 400 de farklı iki negatif C_{dd} değeri için karşılaştırılması yer almaktadır. İki sistem için de tünelleme değerinin ve kimyasal potansiyelin farklı olmasından dolayı sistemlerin başlangıç durumları birbirlerinden farklı olmasına rağmen burada önemli olan her iki durumda da çekici etkileşimlerden dolayı sistemin dağılmamasıdır.



Şekil 5.17. Tuzak kaldırıldıktan sonra adyabatik ve serbest genleşmenin t= 400 de farklı iki negatif C_{dd} değeri için karşılaştırılması. Adyabatik genleşme için zJ/U=0.008, serbest genleşme için J/U=0.035 ve zaman birimi ħ/J olarak alınmıştır.

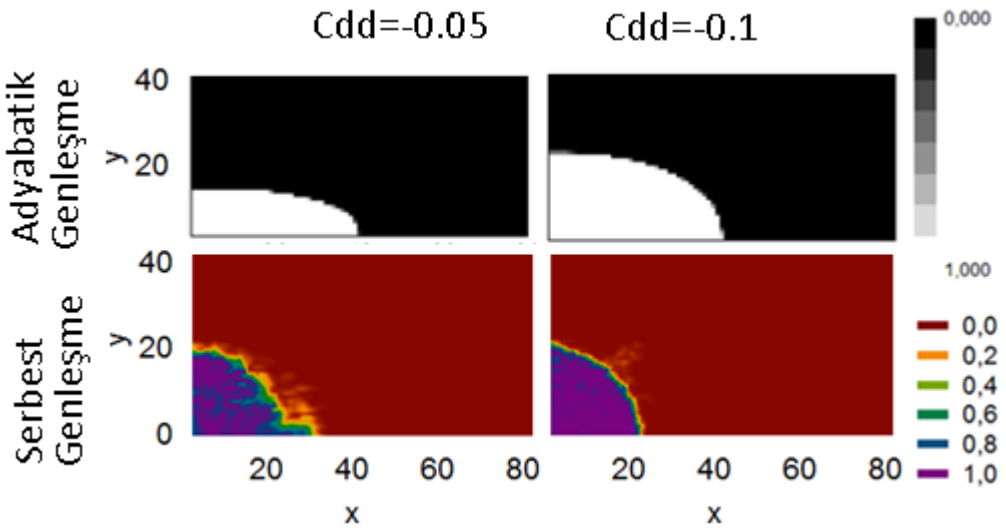
Şekil 5.18.' de tuzak kaldırıldıktan sonra adyabatik ve serbest genleşmenin *t*= 400 de farklı iki pozitif C_{dd} değeri için karşılaştırılması yer almaktadır. Serbest genleşmenin tersine adyabatik genleşmede sistem tuzak kaldırıldıktan sonra dağılmaktadır. Adyabatik genleşmede sistemde yarı kararlı durumlar oluşurken serbest genleşmede sistemin büyük bir çoğunluğu Mott fazındadır.



Şekil 5.18. Tuzak kaldırıldıktan sonra adyabatik ve serbest genleşmenin t= 400 de farlı iki pozitif C_{dd} değeri için karşılaştırılması. Adyabatik genleşme için zJ/U=0.006, serbest genleşme için J/U=0.035 ve zaman birimi ħ/J olarak alınmıştır.

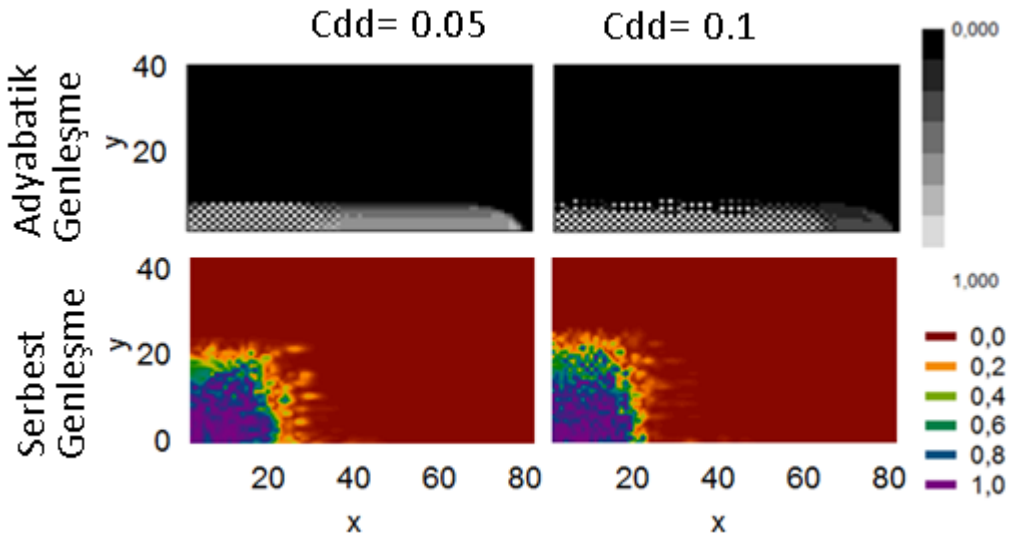
5.1.1.2. Tek Yönde Adyabatik ve Serbest Genleşen Bose Gazının Karşılaştırılması

Bu bölümde tek yönde adyabatik ve serbest genleşen Bose gazının itici ve çekici etkileşimler için karşılaştırılması verilmiştir. Şekil 5.19.' da tuzak kaldırıldıktan sonra adyabatik ve serbest genleşmenin *t*= 400 de farklı iki negatif C_{dd} değeri için karşılaştırılması yer almaktadır.



Şekil 5.19. Tuzak tek yönde kaldırıldıktan sonra adyabatik ve serbest genleşmenin t= 400 de farlı iki negatif C_{dd} değeri için karşılaştırılması. Adyabatik genleşme için zJ/U=0.008, serbest genleşme için J/U=0.035 ve zaman birimi ħ/J olarak alınmıştır.

Şekil 5.20.' de tuzak kaldırıldıktan sonra adyabatik ve serbest genleşmenin *t*= 400 de farklı iki pozitif C_{dd} değeri için karşılaştırılması yer almaktadır. Serbest genleşmenin tersine adyabatik genleşmede sistem tuzak kaldırıldıktan sonra dağılmaktadır. Adyabatik genleşmede sistemde yarı karalı durumlar oluşurken serbest genleşmede sistemin büyük bir çoğunluğu Mott fazındadır.



Şekil 5.20. Tuzak tek yönde kaldırıldıktan sonra adyabatik ve serbest genleşmenin t= 400 de farlı iki pozitif C_{dd} değeri için karşılaştırılması. Adyabatik genleşme için zJ/U=0.006, serbest genleşme için J/U=0.035 ve zaman birimi ħ/J olarak alınmıştır.

Bu çalışmada dipolar etkileşimler göz önüne alınırken dipollerin hepsi aynı yönde ve düzlem ile aralarındaki acı 90 derece olacak şekilde alınmıştır. Diğer çalışmalarda dipollerin düzlemle yaptığı farklı acı durumlarına bakılabilir. Bu durumda izotropik olmayan bir dağılım beklenir. Ayrıca sistem genişlerken sistemin momentum dağılımı da incelenebilir.

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, *Sience 269,* 198.

Anderson, B.P. and Kasevich, M.A., 1998, Macroscopic quantum interference from quantum tunnel arrays, *Science*, 282:1686-1689.

Auerbach, A., 1994, Interacting Electrons and Quantum Magnetism, *Springer-Verlag New York.*

Bradley, C.C., Sackett, C.A., Tollett, J.J., Hulet, R.G., 1995, Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interactions, *Phys. Rev. Lett.* 75,1687.

Carr, L.D., and Holland, M.J., 2005, Quantum phase transitions in the Fermi-Bose Hubbard model, *Phys. Rev. A*, 72:031604.

Davis, K., Mewes, M.O., Andrews, M.R., van Druten, N.J., Durfee, D.S., Kurn, D.M., Ketterle, W., 1995, Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms, *Phys. Rev. Lett*. 75, 3969.

Essler, F.H.L., Frahm, H., Gömann, F., Klümper, A., Korepin, V. E., 2005, The One-Dimensional Hubbard Model, *Cambridge University Press.*

Fisher, M.P.A, Weichman, P.B., Grinstein, G., and Fisher, D.S., 1989, Boson localization and the superfluid-insulator transition, *Phys. Rev. B,*40:546-570.

Freericks, J.K., and Monien, H., 1996, Strong-coupling expansions for the pure and disordered Bose-Hubbard model, *Phys. Rev. B*, 53 2691.

Fried, D.G., Killian, T.C., Willmann, L., Landhuis, D., Moss, S.C., Kleppner, D., Greytak, T.J., 1998, Bose-Einstein Condensation of Atomic Hydrogen, *Phys. Rev. Lett*. 81, 3811-3814.

Hecht, C.E., 1959, The Possible Superfluid Behaviour of Hydrogen Atom Gases and Liquids, *Physica* 25, 1159.

Hubbard, J., 1963, Electron correlations in narrow energy bands, *P. Roy. Soc. Lond. A. Mat.* 276:238-257.

Jaksch, D., Bruder, C., Cirac, J.I., Gardiner, C.W., Zoller, P., 1998, Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices, *Phys. Rev. Lett.* 81, 3108.

Jaksch, D., Venturi, V., Cirac, J.I., Williams, C.J., Zoller, P., 2002, Creation of a Molecular Condensate by Dynamically Melting a Mott Insulator, *Phys. Rev. Lett.* 89, 040402.

Krauth, W., Caffarel, M., and Bouchaud, J.P., 1992, Gutzwiller wave function for a model of strongly interacting bosons, *Phys. Rev. B,* 45, 3137.

Küner, T.D., White, S.R., and Monien, H., 2000, One-dimensional Bose-Hubbard model with nearest-neighbor interaction, *Phys. Rev. B*, 61,12474.

Lieb, E.H., and Wu, F.Y., 1968, Absence of Mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension, *Phys. Rev. Lett.* ,20:1445-1448.

London, F., 1938, The Lambda-phenomenon of Liquid Helium and the Bose-Einstein Degeneracy, *Nature*, 141, 643.

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

P´erez-Garc´ıa, V.M., Michinel, H., Cirac, J.I., Lewenstein, M., and Zoller, P., 1996, Low Energy Excitations of a Bose-Einstein Condensate: A Time-Dependent Variational Analysis, *Phys. Rev. Lett.* 77, 5320.

Rokhsar, D.S., and Kotliar, B.G., 1991, Gutzwiller projection for bosons, *Phys. Rev. B*, 44, 10328.

Sachdev, S., 1999, Quantum Phase Transitions, *Cambridge University Press.*

Stamper-Kurn, D.M., Andrews, M.R., Chikkatur, A.P., Inouye, S., Miesner, H.J., Stenger, J., and Ketterle, W., 1998, Optical Confinement of a Bose-Einstein Condensation, *Phys. Rev. Lett.* 80, 2027.

Trefzger, C., 2009, Ultracold Dipolar Gases in Optical Lattices, Doktora Tezi, *Institut de Ciencies Fotoniques*, 2-38.

Wessel, S., Alet, F., Troyer, M., and Batrouni, G.G., 2004, Quantum Monte Carlo simulations of confined bosonic atoms in optical lattices, *Phys. Rev. A*, 70 053615.

Zhou, F., 2005, Mott states under the influence of fermion-boson conversion, *Phys. Rev. B*, 72:220501.

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı	**:**	Sevda AKTAŞ
Uyruğu	**:**	T.C.
Doğum Yeri ve Tarihi	**:**	Bakırköy , 23.03.1987
Telefon	**:**	05422486862
Faks	**:**	
e-mail	**:**	sevdaaktas@selcuk.edu.tr

EĞİTİM

Derece		**Adı, İlçe, İl**	**Bitirme Yılı**
Lise	:	**Sefaköy Lisesi(YDA), Küçükçekmece, İstanbul**	**2005**
Üniversite	:	**Abant İzzet Baysal Üniversitesi, Merkez, Bolu**	**2010**
Yüksek Lisans	:	**Selçuk Üniversitesi, Selçuklu, Konya**	**2013**
Doktora	:	**-**	**-**

İŞ DENEYİMLERİ

Yıl	**Kurum**	**Görevi**
2011-	**Selçuk Üniversitesi /Fen Fakültesi / Fizik Bölümü**	**Araştırma Görevlisi**

UZMANLIK ALANI

Matematiksel Fizik, Bose-Einstein Yoğuşması

YABANCI DİLLER

İngilizce

BİLDİRİLER

S. AKTAŞ and Ü. ATAV, 2013, Adiabatic vs. Free Expansion of a Bose Gas in a 2D Optical Lattice, *İFG 20*.

S. AKTAŞ and Ü. ATAV, 2013, Adiabatic vs. Free One Directional Expansion Of Dipolar and Non-Dipolar Bose Gases in a 2D Optical Lattice, *TFD 30*.

POSTERLER

S. AKTAŞ and Ü. ATAV, 2012, Expansion of a Dipolar Bose Gas in a 2D Optical Lattice, *TFD 29*.