

167616

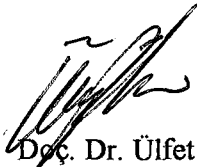
T.C.
SELÇUK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

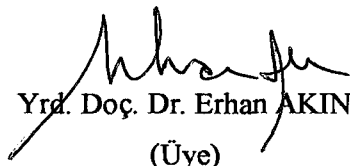
HARMONİK OLARAK TUZAKLANMIŞ BOZONLARDA BOSE-EINSTEIN
YOĞUŞMASI

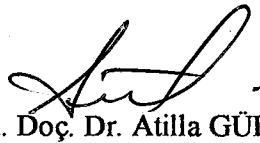
TEOMAN ÖZTÜRK

YÜKSEK LİSANS TEZİ FİZİK ANABİLİM DALI

Bu tez 08.08.2005 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oybirliği/oyçokluğu ile kabul edilmiştir.


Doç. Dr. Ülfet ATAV
(Danışman)


Yrd. Doç. Dr. Erhan AKIN
(Üye)


Yrd. Doç. Dr. Atilla GÜLEÇ
(Üye)

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

HARMONİK OLARAK TUZAKLANMIŞ BOZONLARDA BOSE-EINSTEIN YOĞUŞMASI

Teoman ÖZTÜRK

**Selçuk Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı**

Danışman: Doç. Dr. Ülfet ATAV

2005, 72 Sayfa

**Jüri: Doç. Dr. Ülfet ATAV
Yrd. Doç. Dr. Erhan AKIN
Yrd. Doç. Dr. Atilla GÜLEÇ**

Bu çalışmada anizotropik bir tuzakta harmonik olarak tuzaklanmış alkali atom gazlarında gözlenen Bose-Einstein yoğuşmasına uğramış bir sistemin özellikleri incelenmiştir. Bu amaçla Gross-Pitaevskii yaklaşımı ve Varyasyonel Monte Carlo yöntemi kullanılmıştır. Seyrek gaz limitinde her iki yöntem arasında çok iyi uyum gözlenirken seyrek gaz limitinden uzaklaşıldıkça farklılıklar gözlenmiştir. Sistemin özelliklerinin Gross-Pitaevskii yaklaşımının öngördüğü gibi parçacık sayısı ile saçılma uzunluğunun çarpımına değil de, bu parametrelere ayrı ayrı bağımlı olduğu görülmüştür.

Anahtar Kelimeler: Bose-Einstein yoğuşması, Varyasyonel Monte Carlo yöntemi, Gross-Pitaevskii denklemi.

ABSTRACT

MS Thesis

**BOSE-EINSTEIN CONDENSATION IN HARMONICALLY TRAPPED
BOSONS**

Teoman ÖZTÜRK

**Selçuk University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Physics
Supervisor: Assoc. Prof. Dr. Ülfet ATAV**

2005, 72 Page

**Jury: Assoc. Prof. Dr. Ülfet ATAV
Asst. Prof. Dr. Erhan AKIN
Asst. Prof. Dr. Atilla GÜLEÇ**

In this study, we have analyzed the properties of a Bose-Einstein condensate which is observed in the harmonically trapped gases of alkali atoms in an anisotropic trap. For this purposes we used Gross-Pitaevskii equations and Variational Monte Carlo method. A perfect agreement was observed in the dilute gas limit between the results of the two methods, however the difference between the results of the two methods increased as we go away from the dilute gas limit. Also, we observed that the properties of the system depend separately on the number of particles and on the scattering length which contradicts with the predictions of Gross-Pitaevskii equation.

Key words: Bose-Einstein condensation, Variational Monte Carlo method, Gross-Pitaevskii equation.

ÖNSÖZ

Bu çalışma Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsüne yüksek lisans tezi olarak sunulmuştur.

Bu çalışmada bilgi ve tecrübeleriyle bana her konuda yardımcı olan ve yön gösteren, benden maddi ve manevi hiçbir yardımı esirgemeyen ve bana büyük bir sabırla katlanan, kendisiyle çalışmaktan büyük onur duyduğum ve kendisini her zaman örnek aldığım danışman hocam Sayın Doç. Dr. Ülfet ATAV'A en içten teşekkürlerimi sunmak isterim.

Ayrıca bu çalışma boyunca benden yardımlarını esirgemeyen Sayın Arş. Gör. Dr. Mehmet ŞAHİN'E, Sayın Arş. Gör. Ahmet Emre KAVRUK'A ve Selçuk Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik bölümü elemanlarına da teşekkür etmek isterim.

Teoman ÖZTÜRK

Konya, 2005

İÇİNDEKİLER

ÖZET	iii
ABSTRACT	iv
ÖNSÖZ	v
İÇİNDEKİLER	vi
1.GİRİŞ	1
2. BOSE-EINSTEIN YOĞUŞMASI, DENEYSEL TEKNİKLER ve GROSS-PITAEVSKII DENKLEMİ	4
2.1. Bose-Einstein Yoğuşması.....	6
2.1.1. Deneysel teknikler.....	10
2.1.1.1. Atomları soğutmak.....	11
2.1.1.2.Manyetik tuzaklamada geliştirilen teknikler.....	13
2.2. Bose-Einstein Yoğuşmasının Teorik Temelleri.....	14
2.2.1. Etkileşmeyen bozonlarda BEC.....	14
2.2.1.1. Geçiş sıcaklığı.....	17
2.2.1.2. Yoğuşma oranı.....	20
2.2.2. Etkileşen tuzaklanmış bozonlar.....	21
2.3. Bogoliubov Yaklaşımı ve Ortalama-Alan Teorileri.....	24
2.3.1 Gross-Pitaevskii denklemi.....	26
2.3.1.1. “Thomas-Fermi” yaklaşımı.....	28
3. MONTE CARLO YÖNTEMLERİ ve GROSS-PITAEVSKII DENKLEMİNİN ÇÖZÜMÜNDE KULLANILAN TEKNİKLER	29
3.1. Monte Carlo Yöntemleri.....	29
3.1.1. Metropolis algoritması.....	34
3.1.2. Varyasyonel Monte Carlo yöntemi.....	38
3.2. Gross-Pitaevskii Denkleminin Çözümünde Kullanılan Teknikler.....	41
3.2.1. İzotropik durumlar için taban durum.....	42
3.2.2. Anizotropik durumlar için taban durum.....	45
3.2.2.1.Etkileşmeyen model.....	49
3.2.2.2.Güçlü itici durum.....	53
4. HESAPLAMALARIN AYRINTILARI ve SONUÇLAR	55

4.1. Gross-Pitaevskii Denkleminin Çözümü.....	55
4.2. VMC Uygulamasının Ayrıntıları	57
4.2.1. Deneme dalga fonksiyonu.....	58
4.3. Sonuçlar.....	62
4.3.1. Uzaysal dağılım.....	62
5. SONUÇ ve ÖNERİLER.....	69
KAYNAKLAR	70



1. GİRİŞ

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

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

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

Bose sistemlerinin en önemli özelliklerinden birisi de bunların homojen olmayan ve sonlu boyutlu sistemler olmasıdır. Bu sistemlerin homojen olmaması iki cisim etkileşmelerinde önemli rol oynar. Etkileşimli bir Bose sisteminde bozonlar arası çok cisim korelasyon etkileri, yoğuşmanın dışında bulunan uyarılmış atomların miktarını artırır. Etkileşimli bir gaz için Bogoliubov (1947) bir pertürbasyon açılımı

geliştirmiştir. Bu yöntem na^3 parametresinin küçük olması (n parçacık yoğunluğu ve a 'da bozonların sert küre yarıçapıdır) ve yoğuşmanın dışındaki atomların sayısının çok az olması yani $(N - N_0)/N \ll 1$ durumundaki (N_0 yoğuşmadaki parçacık sayısı olup, N , sistemdeki parçacık sayısını gösterir) etkileşimleri hesaba katar.

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

Bir $V_{\text{ext}}(\mathbf{r}_i)$ dış potansiyeli ile sınırlanmış m kütleli N tane bozonu düşünelim, herhangi iki parçacık arasındaki $V_{\text{int}}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ etkileşme potansiyelini de katarak bu sistemin Hamiltoniyeni

$$H = \sum_i^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}_i) \right) + \sum_{i < j}^N V_{\text{int}}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$$

şeklinde yazabiliriz. Sistemin taban durum dalga fonksiyonu ortalama alan teorisi kullanılarak Gross-Pitaevskii denkleminde hesaplanabilir. Bu hesaplamalara örnek olarak izotropik tuzaklarda Edwards ve Burnett (1995), Ruprecht ve ark. (1995); anizotropik tuzaklarda ise Dalfovo ve Stringari (1996) verilebilir. Bu ortalama alan yaklaşımı seyrek gaz durumunda iyi sonuçlar verirken, yoğunluk arttıkça ortalama alan teorisi geçerliliğini kaybetmeye başlar.

Bu çalışmada, harmonik olarak tuzaklanmış bozonlarda gözlenen Bose-Einstein yoğuşmasının özellikleri, Varyasyonel Monte Carlo (VMC) yöntemiyle incelenmiştir. Ayrıca ortalama alan yaklaşımı sonucunda elde edilen Gross-Pitaevskii denkleminin de çözümleri elde edilerek sonuçlar birbirleriyle karşılaştırılmıştır. Hesaplamalarımızı seyrek durumdan yani yoğuşmadaki parçacık sayısının az ve atomların saçılma uzunluğunun küçük olduğu değerden başlayarak yüksek yoğunluklara kadar geniş bir bölgede yaptık. İki yöntem düşük parçacık sayılarında ve küçük saçılma uzunluklarında oldukça iyi uyumaktadır, ancak parçacık sayısı ve saçılma uzunluğu arttıkça GP sonuçları ile VMC simülasyonu arasındaki fark artmaktadır.

Bu çalışmanın ikinci bölümünde harmonik potansiyellerle tuzaklanan gazlarda Bose-Einstein yoğuşmasının oluşumu ve konunun teorisi anlatılmıştır. Zayıf etkileşimli sistemleri açıklamak için kullanılan ve bunun sonucunda elde edilen Gross-Pitaevskii denklemlerine de değinilmiştir.

Üçüncü bölümde Varyasyonel Monte Carlo yöntemi ve Gross-Pitaevskii denkleminin çözümündeki teknikler tanıtılarak bu yöntemlerin Bose-Einstein yoğuşmasına uygulanması için gerekli olan teorik bilgiler verilmiştir. Dördüncü bölümde VMC ile elde edilen sonuçlar sunulmuş ve Gross-Pitaevskii denkleminin çözümünden elde edilen sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Son bölümde ise çalışma genel olarak değerlendirilmiş ve bundan sonra yapılabilecek çalışmalar hakkında öneriler getirilmiştir.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Pauli ilkesi ve sonuçları şu şekilde özetlenebilir:

i. Spin kuantum sayısı buçuklu ($s=1/2, 3/2, 5/2, \dots$) olan ve fermiyon denilen parçacıklar Pauli dışarlama ilkesine uyarlar. Elektronlar, protonlar ve nötronlar

fermiyondur. Fermiyonlardan oluşan bir sistemi tanımlayan dalga fonksiyonu antisimetriktir.

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

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

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

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

2.1. Bose-Einstein Yoğuşması

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

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

$$E = h\nu$$

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

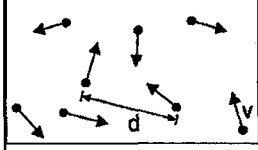
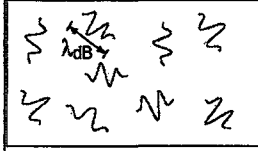
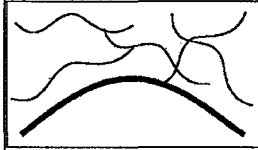
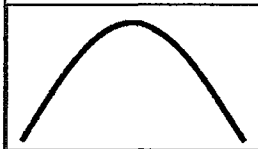
1924 yılında Hintli fizikçi Satyendra Nath Bose, Einstein'a yolladığı bir makalede fotonları özdeş parçacıklardan oluşan bir gaz gibi düşünerek siyah cisim ışınması için Planck yasasını türettiğini göstermiştir. Einstein makalenin önemini anlayarak çalışmaya başladı ve 1924 ve 1925 yıllarında iki makale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

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

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

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

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

	Yüksek T sıcaklığı: v termal hızı d^3 yoğunluk "Bilardo topları"
	Düşük T sıcaklığı: de Broglie dalgaboyu $\lambda_{dB} = h/mv \propto T^{-1/2}$ "Dalga paketleri"
	T=T_c: BEC $\lambda_{dB} = d$ "Örtüşen madde dalgası"
	T=0: Saf Bose Yoğuşması "Dev madde dalgası"

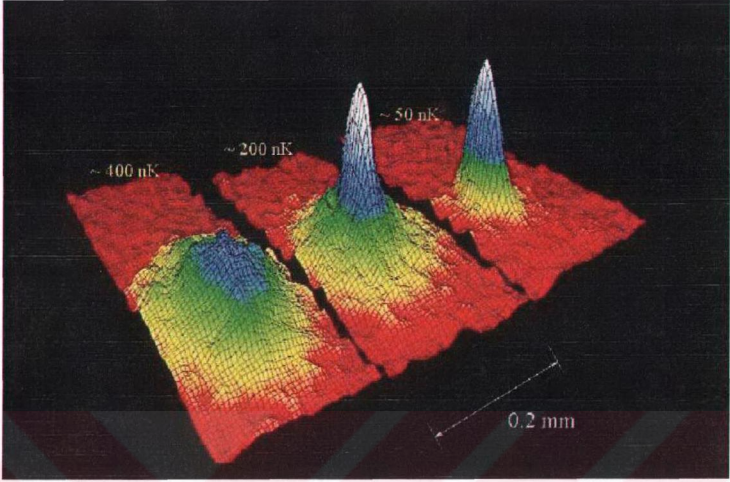
Şekil 2.1 Bose-Einstein yoğuşması karşılaştırması. Yüksek sıcaklıklarda zayıf etkileşimli bir gaz sistemi bilardo toplarına benzer. Yalın bir kuantum tanımlamasında parçacıklar λ_{dB} açılımlı dalga paketleri gibi düşünülebilir. BEC geçişim sıcaklığında λ_{dB} , parçacıklar arası d mesafesi ile karşılaştırılabilir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

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

2.1.1. Deneysel teknikler

Bose-Einstein yoęuşması, 1995 yılında alkali atomların buharları üzerinde yapılan bir seri deney sonucunda gözlenmiştir. Bose-Einstein yoęuşması ilk önce JILA'da (Joint Institute for Laboratory Astrophysics, Boulder, Colorado, ABD) rubidyum atomlarıyla, daha sonra da MIT'de (Massachusetts Institute of Technology) sodyum atomlarıyla elde edilmiştir (Anderson ve ark. 1995, Davis ve ark.1995). JILA'dan Wieman ve Cornell, MIT'den de Ketterle bu çalışmalar nedeniyle 2001 yılında Nobel fizik ödülünü paylaşmışlardır. Bu deneylerde atomlar manyetik tuzaklarla hapsedilmiş ve son derece düşük sıcaklıklara kadar soęutulmuştur, bu sıcaklıklar mikrok Kelvinler civarındadır. Alkali atomlar sınırlayıcı tuzakın kapatılmasını takiben yayılmaya terk edilirler ve ön soęutma olarak lazerli soęutma kullanılır, daha sonra atomlar bir manyetik tuzakta tutulur ve buharlaşma ile soęutma kullanılarak daha da soęutulur. Belli bir sıcaklığın altında hız dağılımında sıfır hız civarında keskin bir pik gözlenir, bu Bose-Einstein yoęuşması elde edildiğinin açık bir işaretidir. Şekil (2.2) Bose-Einstein yoęuşmasının gözlenmesiyle ilgili ilk resimlerden olup rubidyum atomik bulutunun hız dağılımını göstermektedir. Hız dağılımında keskin bir pik gözlenmiştir ki bu Bose-Einstein yoęuşmasının açık bir kanıtıdır. Aynı yılda lityum atomlarında da Bose-Einstein yoęuşmasının gözlendiği rapor edilmiştir (Bradley ve ark. 1995).

1995 yılında alkali atomlar üzerine yapılan bu deneyler Bose-Einstein yoęuşması tarihinde bir kilometre taşı olarak düşünölmektedir. Bose-Einstein yoęuşmasının deneysel olarak elde edilmesinden sonra bu sıra dışı olguya olan ilgi de dünya çapında büyük bir artış gözlenmiştir.



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

2.1.1.1. Atomları soğutmak

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

Bose yoğuşmasına uğramış atomları elde etme çabaları 1980'li yıllarda hidrojen ile başlamıştır. Bu deneylerde hidrojen atomları önce bir soğutucu ile soğutulmuş, sonra manyetik bir alanla tuzaklanmıştır ve daha sonra buharlaşma ile

soğutma kullanılarak daha da soğutulmuştur, buharlaşma ile soğutma Hess tarafından önerilmiştir (1986). Bu yaklaşım ile BEC'yi gözlemeye oldukça yaklaşılmıştır ancak bu yaklaşım ayırık atomların moleküllere dönüşmesi ve güçlü etkileşmelerin ortaya çıkmasıyla sınırlanmıştır.

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

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

BEC'yi elde etmek için gereken yol geliştirilen soğutma tekniklerinin birleştirilmesinden geçmektedir. Böylece alkali atomların buharı önce lazerle soğutulur ve sonrada buharlaşma ile soğutma uygulanır. Buharlaşma ile soğutmada, yüksek enerjili atomların örnekten kaçmasına izin verilir, böylece geriye kalan atomların ortalama enerjisi azalır. Elastik çarpışmalarla atomlar arasında enerji daha düşük bir sıcaklıkta yeniden dağıtılır. Buharlaşma ile soğutma günlük hayatta

karşımıza çıkan bir olgudur, bir bardak çaydaki veya banyo küvetindeki sıcak suyun soğuması buna bir örnektir.

2.1.1.2. Manyetik tuzaklamada geliştirilen teknikler

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

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

Bu teknikler gerçekte yüksek yoğunluklar ve hızlı buharlaştırma üretir ama önemli bir problem vardır: Tuzağın içinde merkezdeki manyetik alan sıfırdır bu da atomun yönünü şaşırmasına ve manyetik momentinin hızasını kaybetmesine neden olur. Bir manyetik alan, atomları alana dik olan manyetik momentlerle sıralayacağından bu spin dönüşleri tuzaktaki atomların önemli bir kısmının kaybına yol açar. Atomların kaybını önlemek için merkezinde manyetik momenti sıfır olmayan yonca yaprağı şeklinde bir tuzak önerilmiştir. Tuzaktaki yenilik, yonca yaprağı şeklindeki tuzağın manyetik halkalarındadır. Bu da örneğe lazerli soğutmaya, tuzaklamaya ve yoğunlaşmayı incelemek için optiksel girişe izin verir. Bu dizayn, bu tuzakla elde edilen deneysel sonuçların güvenilir ve kullanışlı olmasını sağlamıştır.

Manyetik bir alandaki buharlaştırma, elektron spin rezonansı kullanılarak kolayca halledilebilir. Tuzaklanmış atomların manyetik momentleri, spin-yukarı ve spin-aşağı durumları arasındaki enerji farkı ile rezonanstaki bir radyo-frekans alanı

uygulanılarak döndürülür. Alanın frekansı öyle ayarlanır ki sadece bulutun kenarındaki atomları etkiler, harmonik salıncı bir potansiyelde bu atomlar en yüksek enerjiye sahiptirler. Bu atomların momentleri döndürüldüğünde manyetik kuvvetler anti tuzaklama haline gelir ve atomlar tuzaktan çıkarılır. Bulut soğurken tuzağın merkezine doğru şişer, bu yüzden RF alanın frekansı, bulutun kenarında buharlaştırmayı korumak için devamlı bir şekilde azaltılmalıdır (Petrich ve ark. 1995). Deneysel çalışmalar üzerine daha ayrıntılı bilgi için Anderson ve ark.(1995), Ketterle ve ark.(1996) ile Andrews ve ark.(1997)'nin çalışmalarına başvurulmalıdır.

2.2. Bose-Einstein Yoğuşmasının Teorik Temelleri

2.2.1. Etkileşmeyen bozonlarda BEC

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

$$V_{ext}(\mathbf{r}) = \frac{m}{2}(\omega_x x^2 + \omega_y y^2 + \omega_z z^2) \quad (2.1)$$

şeklinde yazılabilir. Bu durumda sistemin Hamiltoniyeni

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

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

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

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

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

şeklinde verilir, buradaki $\varphi_0(\mathbf{r})$

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

şeklindedir ve

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

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

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

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

Gaussyen eğrisinin genişliği $R_T = a_{ho} (k_B T / \hbar \omega_{ho})^{1/2}$ dir ve bu a_{ho} 'dan daha büyüktür. Bose dağılım fonksiyonunun kullanımı, bu sonuçla fazla değişmez.

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

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

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

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

$$\sqrt{\langle p_z^2 \rangle / \langle p_{\perp}^2 \rangle} = \sqrt{\lambda} \quad (2.9)$$

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

2.2.1.1. Geçiş sıcaklığı

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

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

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

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

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

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

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

Sonuç olarak

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

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

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

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

Şimdi (2.12) denkleminde

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

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

$$kT_c = \frac{\hbar \bar{\omega} N^{1/3}}{[\zeta(3)]^{1/3}} \approx 0,94 \hbar \bar{\omega} N^{1/3} \quad (2.15)$$

sonucu elde edilir. Burada $\bar{\omega}$ üç osilatör frekansının geometrik ortalamasıdır:

$$\bar{\omega} = (\omega_1 \omega_2 \omega_3)^{1/3}. \quad (2.16)$$

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

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

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

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

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

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

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

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

2.2.1.2. Yoğuşma oranı

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

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

şeklinde verilir. $\alpha > 1$ olduğunda integral sonludur. Denk.(2.13)'ü

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

ifadesini yazmak için yeniden kullanırız. Bu sonuç toplam parçacık sayısına bağlı değildir. Ancak T_c için denk.(2.14) ifadesi

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

şeklinde yazılabilir. Yoğuşmadaki parçacıkların sayısı böylece

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

ile veya

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

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

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

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

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

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

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

2.2.2. Etkileşen Tuzaklanmış Bozonlar

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

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

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

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

şeklinde düşünelim. Burada ω_{ho}^2 tuzağın potansiyel gücünü tanımlar. Eliptik tuzakta $\omega_{ho} = \omega_{\perp}$ ifadesi xy düzlemindeki tuzak frekansıdır ve ω_z , z doğrultusundaki frekanstır. Denk.(2.28)'de belirtilen eliptik tuzakta $T = 0$ K'de tek bir bozonun ortalama kare titreşim genliği $\langle x^2 \rangle = (\hbar/2m\omega_{ho})$ şeklindedir, öyle ki $a_{ho} = (\hbar/m\omega_{ho})^{1/2}$

tuzanın karakteristik boyunu tanımlar. Frekansların oranı $\lambda = \omega_z / \omega_{\perp}$ olarak gösterilebilir ve bu da bizi tuzak boylarının oranına $a_{\perp} / a_z = (\omega_z / \omega_{\perp})^{\frac{1}{2}} = \sqrt{\lambda}$ götürür.

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

$$V_{\text{int}}(r) = \begin{cases} \infty & r \leq a \\ 0 & r > a \end{cases} \quad (2.29)$$

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

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

şeklinde yazılabilir.

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

$$n\lambda_T^3 \geq 2,612 \quad (2.31)$$

ile ilişkilidir, buradaki λ_T atomik termal dalga boyudur.

Bose-Einstein yoğunlaşması yoğunluğun $n = 10^{12} - 10^{14}$ par / cm³ olduğu, 100 nK civarındaki sıcaklıklarda alkali gazlarda oluşmaya başlar. Bose-Einstein yoğunlaşmasının teorisi, ikili çarpışmaların yüksek mertebeli çarpışmalardan daha sık olduğu durumlar için geliştirilmiştir. Bu oldukça iyi bilinen seyrek gaz yaklaşımıdır. Seyreklik şartı atomlar arası mesafenin, atomlararası kuvvetlerin menziline daha

büyük olduğu durumda gerçekleşir. Sert merkezli bir potansiyel de olası bir fiziksel parametre olarak alınabilir. Seyreklik atomik dalga boyunun, sert merkez çapıyla karşılaştırıldığında uzun olması durumunda olur, yani $\lambda_T \gg a$ veya $ka \ll 1$ olur, burada $k = 2\pi / \lambda_T$ şeklindedir. $ka \ll 1$ durumunda sert merkezli bir potansiyel yolu ile etkileşen, iki parçacığın saçılması, a saçılma mesafesine sahip bir s dalgasıdır. Bu saçılma mesafesi genelde birkaç nanometre mertebesindedir, bu nedenle seyreklik parametresi gerçekten de oldukça küçüktür ($\sqrt{na^3} \sim 10^{-3}$). Bu şartlar altında atomlararası kuvvetler $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = g\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ şeklindeki etkileşmelerle modellenenir.

Burada

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \quad (2.32)$$

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

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

2.3. Bogoliubov Yaklaşımı ve Ortalama-Alan Teorileri

Dış bir potansiyelle sınırlandırılmış, birbirleriyle etkileşen N tane bozonun çok-cisim Hamiltoniyeni

$$\begin{aligned} \hat{H} = \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \\ + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (2.33)$$

şeklinde, buradaki $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ ve $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r})$ bozonların alan operatörleridir, bunlar sırasıyla \mathbf{r} konumunda bir parçacığı yoketme ve yaratma operatörleridir. $V(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ de etkileşen iki cisim arasındaki atomlararası potansiyeldir.

Sistemin taban durumu, termodinamik özellikleri gibi ifadeler yukarıdaki Hamiltoniyenden başlanarak doğrudan hesaplanabilir. Ancak bu tür hesaplamalar oldukça ağırdır (Krauth 1996). Bu tür etkileşimli sistemler için ortalama alan yaklaşımları geliştirilmiş olup, çok cisim Schrödinger denkleminin tam çözümü probleminin üstesinden bu yaklaşımla gelinebilir.

Seyrek bir Bose gazının ortalama alan yaklaşımıyla tanımlanması fikri 1947'de Bogoliubov tarafından ortaya atılmıştır. Buradaki anahtar nokta bozonik alan operatöründeki yoğunlaşmadan gelen katkının ayrı tutulmasıdır. Alan operatörü

$$\hat{\Psi} = \sum_{\alpha} \Psi_{\alpha}(\mathbf{r}) a_{\alpha} \quad (2.34)$$

olarak yazılabilir, burada $\Psi_{\alpha}(\mathbf{r})$ tek parçacık dalga fonksiyonudur ve a_{α} yoketme operatörüdür. Bozonik yaratma ve yoketme operatörleri olan a_{α}^{\dagger} ve a_{α} Fock uzayında aşağıdaki bağıntılarla tanımlanırlar:

$$a_{\alpha}^{\dagger} |n_0, n_1, \dots, n_{\alpha}, \dots\rangle = \sqrt{n_{\alpha} + 1} |n_0, n_1, \dots, n_{\alpha} + 1, \dots\rangle \quad (2.35)$$

$$a_{\alpha} |n_0, n_1, \dots, n_{\alpha}, \dots\rangle = \sqrt{n_{\alpha}} |n_0, n_1, \dots, n_{\alpha} - 1, \dots\rangle \quad (2.36)$$

Buradaki n_α değerleri $\hat{n}_\alpha = a_\alpha^\dagger a_\alpha$ operatörlerinin özdeğerleridir ve bunlar tek parçacık α durumundaki atomların sayısını verir. Bunlar aşağıdaki komütasyon bağıntılarına uyarlar:

$$[a_\alpha a_\beta^\dagger] = \delta_{\alpha,\beta}, \quad [a_\alpha, a_\beta] = 0, \quad [a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger] = 0 \quad (2.37)$$

Bose-Einstein yoğuşması tek parçacık durumundaki n_0 atom sayısı çok büyük olduğunda meydana gelir: $n_0 \equiv N_0 \gg 1$ ve N_0/N oranı $N \rightarrow \infty$ termodinamik limitinde sonlu olarak kalır. Bu limitte N_0 ve $N_0 \pm 1 \approx N_0$ 'lı durumlar aynı konfigürasyona tekabül ederler ve sonuç olarak a_0 ve a_0^\dagger operatörlerine kompleks sayılar gibi muamele edilir: $a_0 = a_0^\dagger = \sqrt{N_0}$. V hacmindeki tekdüze bir gaz için Bose-Einstein yoğuşması sıfır momentuma sahip $\Psi_0 = 1/\sqrt{V}$ tek parçacık durumunda meydana gelir ve $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ alan operatörü $\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \sqrt{N_0/V} + \Psi'(\mathbf{r})$ formunda ayrıştırılabilir. Ψ' operatörünü küçük bir pertürbasyon gibi uygulayan Bogoliubov etkileşimli Bose gazları için birinci mertebeden bir teori geliştirdi.

Tekdüze olmayan ve zamana bağlı konfigürasyonlarda Bogoliubov teorisinin genelleştirilmesi

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \Phi(\mathbf{r}, t) + \Psi'(\mathbf{r}, t) \quad (2.38)$$

ile verilir, burada alan operatörleri için Heisenberg gösterimi kullanılmıştır. Buradaki $\Phi(\mathbf{r}, t)$, alan operatörünün beklenen değeri olarak tanımlanan kompleks bir fonksiyondur: $\Phi(\mathbf{r}, t) = \langle \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \rangle$. Bunun modülü ile $n_0(\mathbf{r}, t) = |\Phi(\mathbf{r}, t)|^2$ yoğuşma yoğunluğu belirlenir.

$\Phi(\mathbf{r}, t)$ fonksiyonu, yoğuşmanın dalga fonksiyonu olarak tanımlanır ve bu tek cisim yoğunluk matrisinin köşegenleştirilmesinden elde edilir ve $\Psi'(\mathbf{r}, t)$ ise yoğuşmadaki dalgalanmaları tanımlayan küçük bir pertürbasyon terimidir.

Tek cisim yoğunluk matrisi

$$\rho_1(\mathbf{r}', \mathbf{r}, t) = \langle \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t), \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \rangle, \quad (2.39)$$

şeklinde tanımlanır, bu matris çok cisim durumunda \mathbf{r} ve \mathbf{r}' noktaları arasında bulunan ilişkileri belirler. Gerçekte (2.38) denklemi ile verilen ayrışma aşağıdaki asimptotik ayrışmayı ifade eder (Ginzburg ve Landau 1950, Penrose 1951, Onsager ve Penrose 1956):

$$\lim_{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}| \rightarrow \infty} \rho_1(\mathbf{r}', \mathbf{r}, t) = \Phi^*(\mathbf{r}', t) \Phi(\mathbf{r}, t) \quad (2.40)$$

Yoğuşma dalga fonksiyonu Φ , tek cisim yoğunluk matrisinin köşegenleştirilmesinden elde edilebilir. Tek cisim yoğunluk matrisinin köşegenleştirilmesi, doğal orbitaller olarak tanımlanan tek parçacık durumları kümesini verir, bu orbitaller tanımlı faza sahip ve özuyumludurlar. Doluluğu en fazla olan doğal orbital yoğuşmayı temsil eder (Löwdin 1955, Onsager ve Penrose 1956). Yani

$$\int d\mathbf{r}' \rho_1(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \Phi_i(\mathbf{r}) = N_i \Phi_i(\mathbf{r}) \quad (2.41)$$

tek cisim yoğunluk matrisinin köşegenleştirilmesinden elde edilen Φ_i doğal orbitalleri, N_i ise özdeğerleri yani orbitallerin doluluğunu gösterir. Yoğuşma en fazla doluluğa sahip orbitaldir. Bu orbitali dolduran parçacık miktarı $n = N_0 / N$ olarak gösterilebilir. N_0 yoğuşmadaki parçacık sayısı olup N , sistemdeki parçacık sayısını gösterir.

2.3.1. Gross-Pitaevskii denklemi

(2.38) denklemindeki ayrışma $\Psi(\mathbf{r}, t)$ ile tanımlanan yoğuşmadaki dalgalanmalar küçük iken işe yarar.

Yoğuşma dalga fonksiyonu $\Phi(\mathbf{r}, t)$ için bir denklem ikincil kuantize Hamiltoniyenden başlayarak türetilebilir, $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$ operatörünün zamana göre değişimi

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = [\hat{\Psi}, \hat{H}]$$

$$= \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' \Psi^\dagger(\mathbf{r}', t) V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}', t) \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.42)$$

şeklindedir. Seyrek bir gazdaki $\hat{\Psi}$ operatörü, Φ klasik alanı ile yer değiştirebilir. İntegraldeki $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ ifadesi atom-atom etkileşimleri içindir ve $(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ kısa mesafelerdeki zayıf yaklaşımı içerir. Burada sadece düşük sıcaklıktaki ikili çarpışmalar konuyla ilgilidir ve bu çarpışmalar tek bir parametre yani s -dalga saçılma mesafesi ile karakterize edilirler. Burada (2.42) denkleminde $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ yerine başka bir ifade koyabiliriz:

$$V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = g \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.43)$$

Burada g çiftlenim sabiti ile s -dalga saçılma mesafesi arasındaki ilişki $g = 4\pi \hbar^2 a / m$ şeklindedir. (2.43) ifadesindeki etkin potansiyelin (2.42) denkleminde etkin kullanımı $\hat{\Psi}$ ile Φ 'nin yer değiştirmesiyle bağdaşmalıdır ve düzen parametresi (Φ) için aşağıdaki denklem oluşur:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\mathbf{r}) + g |\Phi(\mathbf{r}, t)|^2 \right) \Phi(\mathbf{r}, t) \quad (2.44)$$

Bu eşitlik Gross-Pitaevskii denklemi olarak bilinir, bu denklemi Gross (1961) ve Pitaevskii (1961) birbirlerinden bağımsız olarak bulmuşlardır. Gerçekte Gross-Pitaevskii teorisi zayıf etkileşimli bozonlardaki vorteks(girdap) durumlarını açıklamak için geliştirilmiştir. Bu denklemin geçerliliği şu şarta dayanır ki s -dalga saçılma uzunluğu, atomlar arası mesafeden küçük olmalıdır ve yoğunmadaki atomların sayısı birden çok olmalıdır. GP denklemi düşük sıcaklıklarda, atomlar arası ortalama mesafeden daha büyük mesafeler civarındaki düzenleyici parametrenin varyasyonları ile karakterize edilen sistemin makroskopik davranışını açıklar.

(2.44) denklemi enerji fonksiyonelinin varyasyonel minimizasyonu ile de türetilir:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi = \frac{\partial E}{\partial \Phi^*} \quad (2.45)$$

Burada E enerji fonksiyoneli

$$E[\Phi] = \int d\mathbf{r} \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \Phi|^2 + V_{ext}(\mathbf{r}) |\Phi|^2 + \frac{g}{2} |\Phi|^4 \right] \quad (2.46)$$

şeklindedir. (2.46) denklemindeki integralde bulunan ilk terim E_{kin} yoğunlaşmanın kinetik enerjisi, ikincisi E_{ho} harmonik osilatör enerjisi sonuncusu ise E_{int} ortalama alan etkileşim enerjisidir (Dalfovo ve ark. 1999, Minguzzi ve ark. 2004, DuBois ve Glyde 2001).

2.3.1.1. "Thomas-Fermi" yaklaşımı

Bose-Einstein üzerine yapılan ilk deneyler harmonik tuzaklamalı manyetik tuzaklarla yapılmıştır. Böyle sınırlanmış yoğunlaşmaların taban durumu Gross-Pitaevskii denkleminin nümerik çözümü ile hesaplanabilir. İdeal bir gazda taban durum dalga fonksiyonu

$$\Phi(r) = N^{1/2} (2\pi a_{ho})^{-3/2} e^{-r^2/(2a_{ho}^2)} \quad (2.26)$$

şeklindedir, izotropik durumda $V_{ext}(r) = m\omega^2 r^2 / 2$, tuzakın boyu $a_{ho} = (\hbar / m\omega)^{1/2}$ ve kimyasal potansiyel $\mu = 3\hbar\omega / 2$ şeklindedir. Karşıt durumda ($E_{int} \gg E_{kin}$) Thomas-Fermi teorisiyle kullanışlı bir yaklaşım elde edilir,

$$\Phi(r) = \begin{cases} \sqrt{\mu - V_{ext} / g} & V_{ext} < \mu \\ 0 & V_{ext} > \mu \end{cases} \quad (2.47)$$

Burada $\mu = (15Na / a_{ho})^{2/5} \hbar\omega / 2$ şeklindedir. Bu değer $N = \int d\mathbf{r} |\Phi(\mathbf{r})|^2$ şartıyla yoğunlaşmadaki bozonların sayısını sabitleyerek elde edilir (Minguzzi ve ark. 2004, DuBois 2002).

3. MONTE CARLO YÖNTEMLERİ ve GROSS-PITAEVSKII DENKLEMİNİN ÇÖZÜMÜNDE KULLANILAN TEKNİKLER

3.1. Monte Carlo Yöntemleri

Serbestlik derecesi yüksek olan sistemler fizikte oldukça sık kullanılır. Bu tür sistemlere örnek olarak yoğunlaşmış bir maddedeki atomlar, bir atomdaki elektronlar ya da uzay-zaman bölgesinin tüm noktalarında bir kuantum alanının çok sayıdaki değeri gösterilebilir. Bu sistemlerin tanımı genellikle çok boyutlu integrallerin hesaplanmasını gerektirir. Örneğin iki atom arasındaki etkileşim potansiyeli v olan $1/\beta$ sıcaklığındaki A tane atomdan oluşan bir gaz için klasik bölüşüm fonksiyonu

$$Z = \int d^3 r_1 \dots d^3 r_A \exp \left[-\beta \sum_{i < j} v(r_{ij}) \right] \quad (3.1)$$

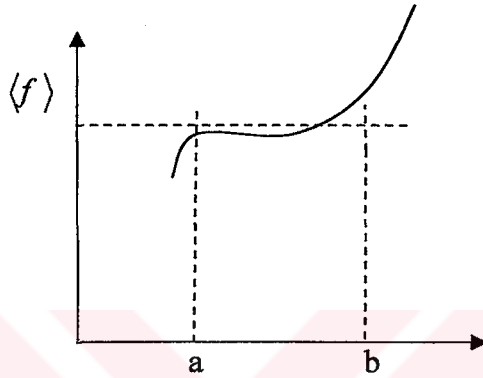
3 boyutlu integraliyle gösterilir. A 'nın küçük değerleri için böyle bir integrali hesaplamak zor değildir. Bu integrali her koordinatta 10 farklı noktada hesaplamak istersek, integral 10^{3A} noktada hesaplanacaktır. Eğer A 'yı 20 alırsak saniyede 10^{10} işlem yapan çok hızlı bir bilgisayar için işlem süresi 10^{50} saniye sürecektir. Bu da evrenin yaşından yaklaşık 10^{31} kez daha büyüktür.

Bu bölümde tartışacağımız Monte Carlo yöntemleri çok boyutlu integrallerin hesaplanmasında oldukça etkilidir. Bu yöntem rasgele sayıların seçimine dayandığından, Monako'da kumarhanelerin bulunduğu "Monte Carlo" şehrinin adı bu yönetime verilmiştir. Bu yöntem II. Dünya savaşında atom bombasının yapımında kullanılan nötron transport yönteminde karşılaşılan sorunları çözmek için geliştirilmiştir. Bu işin temeli her noktadaki integrandı hesaplamak değil, sadece verilen rasgele noktadaki değerleri hesaplamak olarak özetlenebilir.

Çok boyutlu integrallerde Monte Carlo yöntemi oldukça faydalıdır. Şimdi bunu tek boyutlu bir durumla örnekleyelim.

$$I = \int_a^b f(x) dx \quad (3.2)$$

integralini hesapladığımızı düşünelim. Böyle bir integrali nümerik yolla hesaplamak için bile pek çok yöntem vardır. Ancak burada ortalama değer teoremini kullanalım. Bu teoreme göre bir $f(x)$ fonksiyonunun $[a, b]$ aralığındaki integrali, fonksiyonun ortalama değerinde çizilen dikdörtgenin alanına eşittir. (Şek.3.1)



Şek.3.1. Ortalama $\langle f \rangle$ değerinden çizilen dikdörtgenin alanı, eğri altında kalan alana eşittir.

$$I = (b-a)\langle f \rangle \quad (3.3)$$

o halde $\langle f \rangle$ ortalama değerini bilirse, $(b-a)$ ile çarpıp integrali hesaplayabiliriz.

$[a, b]$ Aralığında X_1, X_2, \dots, X_N gibi rasgele seçilen N noktada bu fonksiyonun aldığı değerlerinin ortalaması

$$\langle f \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \quad (3.4)$$

olacaktır. Bu değeri kullandığımızda integralin değeri

$$I = \frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \quad (3.5)$$

şeklinde hesaplanabilir. Bu hesaplara gelen hatayı bulmak için rasgele bir değişken olarak $f_i = f(x_i)$ ifadesini düşünebiliriz ve N 'nin büyük değerlerinde merkezi limit teoremini kullanmalıyız. İstatistik kanunlarından varyansı hesaplırsak

$$\sigma_I^2 = \frac{1}{N} \sigma_f^2 = \frac{1}{N} \left[\left\langle \left(\frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^N f_i \right)^2 \right\rangle - \left(\left\langle \frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^N f_i \right\rangle \right)^2 \right] \quad (3.6)$$

buradan da

$$\sigma^2 = \frac{(b-a)^2}{N} \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i^2 - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i \right)^2 \right] \quad (3.7)$$

elde edilir. Burada σ_f^2 ifadesi f 'nin varyansıdır, yani f 'nin integrasyon bölgesindeki ortalama değerinden ne kadar saptığını gösteren bir ölçüttür.

(3.7) denklemini incelendiğinde ilginç sonuçlar ortaya çıkar. Buna göre integralin hesabındaki σ_I hata payı $N^{-1/2}$ ile azalmaktadır. Eğer daha fazla nokta kullanılırsa daha kesin bir sonuç elde edilecektir, buradaki hata noktaların sayısıyla oldukça yavaş bir şekilde azalır. Oysaki trapez veya Simpson kuralı gibi sayısal yöntemlerde hata N^{-2} ile azalmaktadır. Bu durumda trapez kuralıyla aynı N sayısı kullanılarak çok daha iyi bir sonuç elde edebiliriz. O halde Monte Carlo yönteminin avantajı nerededir diye bir soru sorulabilir.

Bir boyutlu integrallerde Monte Carlo yöntemi gerçekten verimsizdir. Çok katlı integrallere girildiğinde Monte Carlo yönteminin avantajı ortaya çıkmaktadır. Şimdi N integrandlı bir nümerik çalışmayı hesaplamak isteyelim ve Monte Carlo yöntemi ile geleneksel hesaplama yöntemleri arasındaki farkları karşılaştıralım. Geleneksel bir yöntemde (varsayalım ki trapez yöntemi olsun) eğer N nokta varsa d boyutlu bir integralin her bir boyutu $h \sim N^{-1/d}$ aralıklı parçalara bölünür. Trapez yönteminde integrasyon bölgesindeki h^d hacimli her bir hücre üzerinden integraldeki hata $o(h^{d+2})$ ile verilir, böylece geleneksel yöntemdeki toplam hata

$$\begin{aligned} N.o(h^{d+2}) &= o(N.(N^{-1/d})^{d+2}) \\ &= o(N^{-2/d}) \end{aligned}$$

şeklinde olacaktır. d^p nin büyük değerlerinde, bu azalış, N 'nin artışıyla çok yavaş şekilde azalacaktır. Diğer taraftan (3.6) denkleminde göre Monte Carlo yöntemindeki hata $N^{-1/2}$ ile azalacaktır ve bu d^p den bağımsızdır.

Şimdi (3.2) denklemindeki integrandı

$$\int_0^1 dx w(x) = 1 \quad (3.8)$$

şeklinde normalize olan pozitif bir $w(x)$ ağırlık fonksiyonuyla çarpıp böldüğümüzü düşünelim. Bu durumda integral

$$I = \int_0^1 dx w(x) \frac{f(x)}{w(x)} \quad (3.9)$$

şeklinde yazılabilir, şimdi $w(x) = \frac{dy}{dx}$ olarak kabul edersek

$$\int dy = \int w(x) dx \quad (3.10)$$

olacaktır. (3.8) ile (3.10) denklemleri karşılaştırılırsa $\int dy = 1$ olduğu görülür buradan da $y = x'$ yazılabilir. Bu durumda $w(x)$ yerine $w(x')$ ve dx yerine de dx' yazılabilir. Bu durumda sınırlar $y(x=0) = 0$ ve $y(x=1) = 1$ olur ve integral

$$I = \int dy \frac{f(x(y))}{w(x(y))} \quad (3.11)$$

ağırlık fonksiyonuna sahip bir integral için Monte Carlo hesabı da $[0,1]$ aralığında

$$I = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f(x(y_i))}{w(x(y_i))} \quad (3.12)$$

şeklinde olacaktır. Değişken değiştirmenin olası faydası şimdi açıktır. Eğer yaklaşık olarak f gibi davranan bir w seçersek (yani f büyük olduğunda büyük, f küçük olduğunda küçük) f/w yani (3.11) deki integrand oldukça düzgün olur, (3.12) deki Monte Carlo hesabındaki varyansta düzgün bir azalmayla birlikte f/w integrandı oldukça düzgün olur. Tabi ki bu uygulama uygun bir w ve $x(y)$ bulunduğunda daha etkindir.

Değişken değiştirmeyi anlamak için daha genel bir yol da x 'deki noktaların dağılımının $dy/dx = w(x)$ ifadesini sağlaması halinde y 'deki noktaların dağılımının tekdüze olmasında yatar. Bunun anlamı şudur ki w 'nin (ve f nin) büyük olduğu x noktalarının en önemli değerli noktalarına yoğunlaşılır ve oldukça az bir hesaplama gücü, w ve f 'nin küçük olduğu x değerlerinin önemsiz noktaları için integrandı hesaplamaya harcanır.

Yukarıda tartışılan değişken değiştirmesi, yüksek boyutlara genelleştirilebilir. Normalize bir $w(x)$ ağırlık fonksiyonu için integrasyonun yeni değişkeni y 'dir, burada $|\partial y / \partial x| = w(x)$ Jakobyendir. $x(y)$ ' yi oluşturmak oldukça zordur, öyleki aşağıda tartışılan çok-boyutlu durumdaki değişken değiştirmeyi düşünmek daha uygundur, yani w dağılımlı $x_i(y_i)$ noktaları dağıtır. Keyfi w için bunu sağlayan birkaç yöntem aşağıda tartışılmıştır.

Yukarıdaki tartışma gösterir ki Monte Carlo hesabı iki temel işlemi içerir: Özel bir $w(x)$ dağılımlı integrasyon hacmi üzerinden rasgele apsisler üretmek ve bu apsisde f/w fonksiyonunu hesaplamak. İkinci operasyon yani f/w fonksiyonunun hesaplanması bir sorun oluşturmaz, ancak deterministik bir bilgisayarda rasgele sayıların nasıl üretileceği aşikâr değildir.

Bir bilgisayar programını defalarca tekrarlırsak her defasında aynı sonucu verir. Oysa rasgele bir olayı incelemek üzere yazılan programın önceden kestirilemeyen bir yönde gelişmesi gerekir. Bilgisayarda bu işi gören altprogramlara rasgele sayı üretici denir. Rasgele sayı üretimi karışık bir dağılımın herhangi bir davranışını içeren bilgisayar işlemidir. Bu basit görevi yerine getirmek için ve gerekli rasgele sayılara denk gelen rasgele sayıları kontrol etmek için çok sayıda

yöntem vardır. Bu yöntemlerin ortak yönü, iki büyük sayının birbiriyle çarpılıp, diğer bir büyük sayı ile bölümünün kalanının alınmasıdır. Böyle bir işlem defalarca tekrarlandığında birbirleriyle alakası olmayan sayılar üretir. Düzgün dağılım, üstel dağılım, Gauss dağılımı gibi yöntemlerle rasgele sayılar üretilebilir. Monte Carlo yöntemi hakkında daha ayrıntılı bilgi edinmek için şu kaynaklara bakılmalıdır: Koonin ve Meredith 1990, Press ve ark. 1992, Thijssen 1999, Karaoğlu 2004.

3.1.1. Metropolis algoritması

Özel bir dağılım için rasgele sayıların üretilmesinde oldukça etkili yöntemler olmasına rağmen, çok boyutlu karmaşık bir ağırlık fonksiyonuna bunları genelleştirmek oldukça zordur. Keyfi durumlu olasılık yoğunluklarına sahip rasgele sayılar üretmek için Metropolis algoritması kullanılır. (Metropolis ve ark. 1953). Bu yolla integrasyon değişkenlerinin verilen bir değeri için ağırlık fonksiyonu hesaplanabildiği gibi bu algortima istatistik mekanik problemlerinde oldukça yaygın olarak kullanılır.

Metropolis algoritmasının çok çeşitli uygulamaları vardır, ancak biz basit bir kavram ile başlayacağız. Varsayalım ki $w(\mathbf{X})$ olasılık yoğunluğuyla dağılmış \mathbf{X} değişkenleri uzayında noktalardan oluşan bir küme üretmek istiyoruz. Metropolis algoritması $\mathbf{X}_0, \mathbf{X}_1, \dots$ şeklinde bir noktalar dizisi üretir. Bunlar \mathbf{X} uzayı üzerinde rasgele bir yürüyüş hareketi ile ulaşılan noktalardır. Yürüyüş uzadıkça elde edilen \mathbf{X} noktalarının dağılımı $w(\mathbf{X})$ olasılık fonksiyonuna yakınsar.

Varsayalım ki bir yürüyücü dizideki bir \mathbf{X}_n noktasında bulunsun. \mathbf{X}_{n+1} noktasını üretmek için yeni bir \mathbf{X}_t noktasına bir deneme adımı atılır. Bu deneme adımı

$$r = \frac{w(\mathbf{X}_t)}{w(\mathbf{X}_n)}$$

olasılığıyla kabul edilir. Bunun için eğer r birden büyükse adım kabul edilir (yani \mathbf{X}_{n+1} yerine \mathbf{X}_r koyulabilir). Eğer r birden küçükse $[0,1]$ aralığında rasgele bir η sayısı üretilir. Eğer $\eta < r$ ise bu adım kabul edilir, eğer $\eta > r$ ise bu deneme adımı reddedilir ve eskisiyle devam edilir yani $\mathbf{X}_{n+1} = \mathbf{X}_n$ alınır. \mathbf{X}_{n+1} bu şekilde üretilir ve aynı işlemler \mathbf{X}_{n+2} 'yi üretmek için başlar. Herhangi bir \mathbf{X}_0 noktası rasgele yürüyüş için başlangıç noktası olarak alınabilir.

Bu algoritmanın uygulanması sonucunda elde edilen noktaların yoğunluğunun w olasılık dağılımına uyacağını ispatlamak için farklı başlangıç noktalarından başlayan ve \mathbf{X} uzayı boyunca özgürce hareket eden geniş bir yürüyücüler sayısı düşünelim. Eğer $N_n(\mathbf{X})$, n adım sonunda \mathbf{X} 'deki bu yürüyücülerin yoğunluğuysa, bir sonraki adımdaki \mathbf{X} noktasından \mathbf{Y} noktasına hareket eden yürüyücülerin net sayısı

$$\begin{aligned}\Delta N(\mathbf{X}) &= N_n(\mathbf{X})P(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y}) - N_n(\mathbf{Y})P(\mathbf{Y} \rightarrow \mathbf{X}) \\ &= N_n(\mathbf{Y})P(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y}) \left[\frac{N_n(\mathbf{X})}{N_n(\mathbf{Y})} - \frac{P(\mathbf{Y} \rightarrow \mathbf{X})}{P(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y})} \right]\end{aligned}\quad (3.13)$$

şeklindedir.

\mathbf{X} 'te bulunan bir yürüyücünün \mathbf{Y} 'ye yapacağı bir geçişi, $P(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y})$ olasılığı ile verilir. Bu eşitlik gösterir ki

$$\frac{N_n(\mathbf{X})}{N_n(\mathbf{Y})} = \frac{N_e(\mathbf{X})}{N_e(\mathbf{Y})} = \frac{P(\mathbf{Y} \rightarrow \mathbf{X})}{P(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y})}\quad (3.14)$$

olduğunda denge vardır (popülasyonda net bir değişim yokken) ve $N(\mathbf{X})$ teki değişimler, sistem dengede değilken sistemin dengeye doğru gitmesini sağlar. (yani $\Delta N(\mathbf{X})$ pozitifdir eğer \mathbf{X} 'de çok fazla yürüyücü varsa veya $N_n(\mathbf{X})/N_n(\mathbf{Y})$ eğer denge değerinden daha büyükse). Buradan da olasıdır ki, çok büyük adım sayılarından sonra yürüyücülerin popülasyonu, denge dağılımındaki değerine, N_e 'ye yerleşecektir.

Geriye de Metropolis algoritmasının geçiş olasılıkları yürütücülerin bir denge dağılımına $N_e(\mathbf{X}) \sim w(\mathbf{X})$ 'e gideceğini göstermek kalacaktır. \mathbf{X} 'den \mathbf{Y} 'ye bir adım atmanın olasılığı

$$P(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y}) = T(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y})A(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y})$$

şeklindedir. Burada T , \mathbf{X} 'den \mathbf{Y} 'ye bir deneme adımı atmanın olasılığıdır. Eğer \mathbf{Y} 'ye, tek bir adımda \mathbf{X} 'den ulaşırsa (yani merkezi \mathbf{X} civarında olan δ kenarlı bir küpün içindeyse)

$$T(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y}) = T(\mathbf{Y} \rightarrow \mathbf{X})$$

Olur, öyleki rasgele Metropolis yürütücülerinin denge dağılımı

$$\frac{N_e(\mathbf{X})}{N_e(\mathbf{Y})} = \frac{A(\mathbf{Y} \rightarrow \mathbf{X})}{A(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y})} \quad (3.15)$$

ifadesini sağlar. Eğer $w(\mathbf{X}) > w(\mathbf{Y})$ ise $A(\mathbf{Y} \rightarrow \mathbf{X}) = 1$ 'dir ve

$$A(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y}) = \frac{w(\mathbf{Y})}{w(\mathbf{X})}$$

şeklindedir, eğer $w(\mathbf{X}) < w(\mathbf{Y})$ ise

$$A(\mathbf{Y} \rightarrow \mathbf{X}) = \frac{w(\mathbf{X})}{w(\mathbf{Y})}$$

şeklindedir ve $A(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y}) = 1$ 'dir. Böylece her iki durumda rasgele Metropolis yürütücülerinin denge popülasyonu

$$\frac{N_e(\mathbf{X})}{N_e(\mathbf{Y})} = \frac{w(\mathbf{X})}{w(\mathbf{Y})}$$

ifadesini sağlar, böylece yürütücüler doğru dağılımla dağılırlar.

\mathbf{X}_n komşuluğundaki \mathbf{X}_i 'yi seçmekle tartışmayı somutlaştırdığımız halde,

$$\frac{w(\mathbf{X})}{w(\mathbf{Y})} = \frac{T(\mathbf{Y} \rightarrow \mathbf{X})A(\mathbf{Y} \rightarrow \mathbf{X})}{T(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y})A(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y})} \quad (3.16)$$

ilişkisini sağlayan herhangi bir geçiş ve kabul kuralını kullanabiliriz. Aslında $A=1$ iken \mathbf{X} 'den bağımsız tek limitli durum $T(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y}) = w(\mathbf{Y})$ dir. Hiçbir deneme adımı reddetme yoluyla kullanılmamışken bu en etkili seçimdir. Ancak bu seçim pratik değildir, çünkü eğer deneme adımını almak için w ' yı nasıl örnekleyeceğimizi bilseydik, zaten bu algoritmayı kullanmaya gerek duymazdık.

Eğer deneme adımları \mathbf{X}_n komşuluğu içine alınsaydı, adım boyutu δ 'yı nasıl seçerdik? Bunu cevaplamak için \mathbf{X}_n 'nin, w 'nin bir maksimumunda olduğunu varsayalım. Eğer δ büyükse, $w(\mathbf{X}_i)$, muhtemel olarak $w(\mathbf{X}_n)$ den çok küçük olacaktır ve çoğu deneme adımı reddedilecektir. Eğer δ çok küçükse, çoğu deneme adımı kabul edilecektir, ancak rasgele yürüyücü fazla uzağa gitmeyecektir ve bu yüzden de dağılımın zayıf bir örneklemesine gidecektir. İyi bir kural şudur ki deneme adımının boyutu öyle seçilmelidir ki deneme adımlarının yaklaşık yarısı kabul edilsin.

Bir dağılım örneğine Metropolis algoritması uygulanmasının tek zararı şudur ki rasgele yürüyüşten kaynaklanan $\mathbf{X}_0, \mathbf{X}_1, \dots$ noktaları üretildikleri yoldan bağımsız değildir, yeni \mathbf{X}_{n+1} 'in , \mathbf{X}_n 'nin komşuluğunda olması muhtemeldir. Böylece ancak yürüyüş çok uzun olursa noktalar düzgün bir şekilde dağıtılabilir, bunlar birbirinden istatistiksel olarak bağımsız değildir ve integralleri hesaplamada onları kullanırken biraz daha dikkat edilmelidir. Örneğin eğer

$$I = \frac{\int d\mathbf{X} w(\mathbf{X}) f(\mathbf{X})}{\int d\mathbf{X} w(\mathbf{X})}$$

integralini rasgele yürüyüşten gelen noktalar üzerinden f 'nin değerlerinin ortalaması ile hesaplırsak, Denk.(3.6) daki varyansın olağan hesabı geçersizdir, çünkü $f(\mathbf{X}_i)$ 'ler istatistiksel olarak bağımsız değildir. Bu oto-korelasyon fonksiyonu hesabıyla niceliklendirilebilir.

$$C(k) = \frac{\langle f_i f_{i+k} \rangle - \langle f_i \rangle^2}{\langle f_i^2 \rangle - \langle f_i \rangle^2} \quad (3.17)$$

Burada $\langle \dots \rangle$ rasgele yürüyüş üzerinden ortalamayı belirler; örneğin,

$$\langle f_i f_{i+k} \rangle = \frac{1}{N-k} \sum_{i=1}^{N-k} f(\mathbf{X}_i) f(\mathbf{X}_{i+k})$$

Tabii ki $C(0)=1$ dir ancak $k \neq 0$ için kaybolmayan C nin anlamı f^2 'nin bağımsız olmamasıdır. Sabit bir aralıkla ayrılmış rasgele yürüyüşler boyunca noktaları kullanarak integrali ve varyansını hesaplamak için pratikte ne yapılabilir, aralık öyle seçilmelidir ki kullanılan noktalar arasında etkili bir korelasyon yoktur. Uygun bir örnekleme aralığı, C küçük olduğunda k 'nin değerinden hesaplanabilir.

Metropolis algoritmasının uygulamasındaki bir başka sorunda rasgele yürüyüşün nerede başlayacağıdır; yani \mathbf{X}_0 için ne alınmalıdır. Prensip, hiçbir yer uygun değildir. Ancak yürüyüş, yeterli sayıda adım sonrasında dengeye ulaşır ve bu başlangıçtaki seçimden bağımsızdır. Bu sebeple başlama noktasına bağlılığı kaldırmak için asıl örnekleme başlamadan önce bazı termalizasyon adımları yapılır (Konin ve Meredith 1990, Pang 1997, Thijssen 1999).

3.1.2. Varyasyonel Monte Carlo yöntemi

Varyasyonel Monte Carlo (VMC) yöntemi, verilen bir deneme dalga fonksiyonu için belirli bir operatörün beklenen değerlerinin hesabını içeren bir yöntemdir. VMC, bir $P(\Omega)$ olasılık dağılımına uyan bir konfigürasyonlar topluluğu üzerinden alınan bir ortalama ile sistemin o gibi bir özelliğini inceleme yeteneğine bağlıdır. VMC kullanarak $\langle o \rangle$ beklenen değerini elde etmek için tek yol $P(\Omega)$ olasılık dağılımının, Hamiltoniyenin öz durumunun karesi olmasıdır ($|\psi|^2$).

VMC genellikle çok-cisim kuantum sisteminin toplam enerjisini hesaplamak için kullanılır, örneğin bu yolla çok-cisim Hamiltoniyenin beklenen değeri hesaplanabilir.

Tartışmamıza genel bir kuantum çok-cisim problemiyle başlayalım, öyle ki Hamiltoniyenin genel ifadesi

$$H = \sum_{i=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + U_{ext}(\mathbf{r}_i) \right] + \sum_{i>j} V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \quad (3.18)$$

şeklinde olup, burada $-\hbar^2 \nabla_i^2 / 2m_i$ kinetik enerji, $U_{ext}(\mathbf{r}_i)$ i . parçacığa etki eden harici potansiyel ve $V(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ ise i . ve j . parçacıklar arası etkileşim potansiyelidir. Özdeş parçacıklardan oluşan bir sistem için bütün parçacıkların kütlesi aynıdır.

Sembolik olarak zamandan bağımsız çok-cisim Schrödinger eşitliğini

$$H\Phi(\Omega) = E_n \Phi(\Omega) \quad (3.19)$$

olarak yazabiliriz. Burada $\Omega = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$, $\Phi_n(\Omega)$ n . öz durum ve E_n ise bu öz duruma denk gelen H 'nin özdeğeridir. Etkileşim potansiyelinin karmaşıklığı nedeniyle ikiden fazla parçacığa sahip bir sistem için analitik veya kesin sonuçlar elde etmek kolay değildir. Farklı yaklaşımlar, çok-cisim probleminin farklı yönlerini çalışmak için önemlidir. Çok-cisim sisteminin taban durumunu çalışmak kolaydır. Taban durumla ilişkili özellikler durumun düzenini, kolektif uyarılmaları ve yapısal bilgiyi içerir.

Varyasyonel ilkeye göre herhangi bir durum, sistemin taban durumundan daha büyük bir toplam enerji beklenen değerine sahip olacaktır. Taban duruma yaklaşmak için bir $\Psi(\Omega)$ deneme durumunu ele alırız. $\Psi(\Omega)$, parametreleştirilmiş bir fonksiyon veya özel bir fonksiyon formu olabilir. $\Phi_n(\Omega)$ daki varyasyonel fonksiyon veya parametreler

$$E[\alpha_i] = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \geq E_0 \quad (3.20)$$

varyasyonel ilke yoluyla optimize edilebilir. Burada α_i varyasyonel parametrelerin bir kümesi veya Ω 'ların fonksiyonlarıdır. Bu eşitsizlik $\Phi_n(\Omega)$ 'nın, Hamiltoniyenin $\Psi(\Omega)$ öz durumlarına göre

$$\Psi(\Omega) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \Phi_n(\Omega) \quad (3.21)$$

şeklinde açılmasıyla gösterilebilir. $\Psi(\Omega)$ bütün $\Phi_n(\Omega)$ 'lar için aynı sınır şartını sağlar. Varyasyonel ilke

$$E_n \geq E_0$$

ifadesinin anlaşılması ve $\Psi(\Omega)$ 'nin açılımının (3.20) de sağ tarafa koyulmasıyla elde edilir. $n > 0$ için ve Hermityen bir operatörün özdeğerleri birbirlerine diktir:

$$\langle \Phi_n | \Phi_m \rangle = \delta_{nm} \quad (3.22)$$

Optimize edilmiş bir dalga fonksiyonunu elde etmek için varyasyonel dalga fonksiyonundaki özel fonksiyonlara veya varyasyonel parametrelere

$$\frac{\partial E[\alpha_i]}{\partial \alpha_j} = 0 \quad (3.23)$$

şeklindeki Euler-Lagrange eşitliğinde bağımsız değişkenler olarak muamele edilir. Burada $j = 1, 2, 3, \dots$ şeklindedir. Tartışmamızı sadeleştirmek için varsayalım ki sistemimiz sürekli ve α_i varyasyonel parametreler kümesi olsun. Böylelikle beklenen değeri

$$E[\alpha_i] = \frac{\int \Psi^\dagger(\Omega) H \Psi(\Omega) d\Omega}{\int |\Psi(\Omega')|^2 d\Omega'} = \int w(\Omega) \varepsilon(\Omega) d\Omega \quad (3.24)$$

şeklinde bir integral formunda yazabiliriz. Buradaki $w(\Omega) = \frac{|\Psi(\Omega)|^2}{\int |\Psi(\Omega')|^2 d\Omega'}$ bir

dağılım fonksiyonu olarak yorumlanabilir ve

$$\varepsilon(\Omega) = \frac{1}{\Psi(\Omega)} H \quad (3.25)$$

ifadesi özel bir Ω konfigürasyonundaki yerel bir enerji olarak görülebilir. Eğer özel bir α_i parametreleri seti için $\varepsilon(\Omega)$ ve $w(\Omega)$ ifadeleri verilirse, beklenen değer Monte Carlo hesabıyla bulunabilir. $\Psi(\Omega)$ deneme dalga fonksiyonundaki α_i parametreleri, $E[\alpha_i]$ beklenen değerinin minimizasyonu ile optimize edilebilir (Pang 1997, Thijssen 1999, DuBois 2002).

3.2. Gross-Pitaevskii Denkleminin Çözümünde Kullanılan Teknikler

Bölüm (2.3)' de seyrek bir Bose gazının temel bir tanımını ortalama alan yaklaşımı teorisi çerçevesinde vermiştik. Oldukça düşük sıcaklıklarda zayıf etkileşimli bozonlardan oluşan sistemlerde gözlenen Bose-Einstein yoğuşması, Gross-Pitaevskii denklemi olarak bilinen nonlineer bir Schrödinger denklemi ile ifade edilir. Denk. (2.42)'de Φ ile $\hat{\Psi}$ 'nin yer değiştirmesi uygun olup, bu denklem dış potansiyel $V_{ext} = \frac{1}{2} m \omega_{ho}^2$ ve atom-atom etkileşmesini karakterize eden

$g = \frac{4\pi \hbar^2 a}{m}$ niceliğiyle yeniden yazılırsa

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\mathbf{r}, t) = & -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Phi(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{2} m \omega_{ho}^2 \Phi(\mathbf{r}, t) \\ & + \frac{4\pi \hbar^2 a}{m} |\Phi(\mathbf{r}, t)|^2 \Phi(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (3.26)$$

ifadesini elde ederiz. Bu eşitlik nonlineer bir Schrödinger denklemi formundadır. Bu denklemde $\Phi(\mathbf{r}, t)$ Bose-Einstein Yoğuşma dalga fonksiyonunu, m her bir parçacığın kütleini, ω_{ho} ise tuzağın açısal frekansını gösterir. Bu denklem tuzağın simetrisine göre yani izotropik ve anizotropik tuzaklar göz önüne alınarak çözülebilir. Bu çözümlerden yoğuşma fonksiyonu elde edilebilir. Bu kısımda izotropik ve anizotropik durum için nonlineer Schrödinger denkleminin çözümlerinin nasıl elde

edilebileceğinin ayrıntıları incelenmiştir. Ancak 4. bölümde çözümleri VMC ile karşılaştırdığımızda yalnız anizotropik durumu göz önüne aldık. Bunun iki ana nedeni vardır: Birincisi, deneysel uygulamalarda kullanılan tuzakların anizotropik olması, ikincisi ise anizotropik durumun zaten izotropik durumu da kapsamasıdır. Ancak literatürdeki birçok teorik çalışma izotropik durum için yapıldığından çalışmanın bütünlüğü açısından izotropik durumu ayrı olarak ele almak faydalı olacaktır.

3.2.1. İzotropik tuzaklar için taban durum

Denk.(3.26)'daki nonlinear Schrödinger denkleminde bir çözüm bulmak için yoğunlaşma dalga fonksiyonunu

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \Phi(\mathbf{r}) \exp(-i\mu t / \hbar) \quad (3.27)$$

şeklinde yazalım. Burada μ kimyasal potansiyeldir ve $\Phi(\mathbf{r})$ 'nin parçacıkların toplam sayısına normalize olduğu varsayılır,

$$\int d\mathbf{r} \Phi^2 = N. \quad (3.28)$$

Yoğuşmada N tane atom bulunuyorsa ve atom-atom etkileşmelerini karakterize eden $\frac{4\pi\hbar^2 a}{m}$ ifadesine U_0 dersek (3.26) denklemi

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Phi(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{2} m \omega_{ho}^2 \Phi(\mathbf{r}, t) + NU_0 |\Phi(\mathbf{r}, t)|^2 \Phi(\mathbf{r}, t) \quad (3.29)$$

halini alır. Denk.(3.27)'yi burada yerine koyarsak

$$\mu \Phi(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Phi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} m \omega_{ho}^2 \Phi(\mathbf{r}) + NU_0 |\Phi(\mathbf{r})|^2 \Phi(\mathbf{r}) \quad (3.30)$$

ifadesi bulunur.

Bose-Einstein yoğuşma taban durum dalga fonksiyonu küresel olarak simetrik olduğundan

$$\Phi(\mathbf{r}) = \frac{A\phi(\mathbf{r})}{r} \quad (3.31)$$

formunda yazılabilir. A burada normalizasyon sabitidir. Bunu da denk.(3.30)' da yerine koyarsak

$$\begin{aligned} \mu \frac{A\phi(\mathbf{r})}{r} = & -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \frac{A\phi(\mathbf{r})}{r} + \frac{1}{2} m\omega_{ho}^2 \frac{A\phi(\mathbf{r})}{r} \\ & + NU_0 \left| \frac{A\phi(\mathbf{r})}{r} \right|^2 \frac{A\phi(\mathbf{r})}{r} \end{aligned} \quad (3.32)$$

ifadesi bulunur. Buradaki Laplasyen, küresel koordinatlarda olduğundan

$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$ ifadesini kullanırsak

$$\nabla^2 \left(\frac{A\phi(r)}{r} \right) = \frac{A}{r} \frac{\partial^2 \phi(r)}{\partial r^2} \quad (3.33)$$

ifadesini elde ederiz. Bu da (3.32) denkleminde yerine konulup denklem sadeleştirilirse

$$\begin{aligned} \mu \frac{A\phi(r)}{r} = & -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{A}{r} \frac{\partial^2 \phi(r)}{\partial r^2} + \frac{1}{2} m\omega_{ho}^2 r^2 \frac{A\phi(r)}{r} \\ & + NU_0 A^2 \left[\frac{\phi^2(r)}{r^2} \right] \frac{A\phi(r)}{r} \end{aligned} \quad (3.34)$$

olur ve bu denklemin sadeleşmiş hali de

$$\mu\phi(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi(r)}{\partial r^2} + \frac{1}{2} m\omega_{ho}^2 r^2 \phi(r) + NU_0 A^2 \left[\frac{\phi^2(r)}{r^2} \right] \phi(r) \quad (3.35)$$

şeklinde yazılır. Nümerik çalışmada uygun bir denklem elde etmek için

$r = \left(\frac{\hbar}{2m\omega_{ho}} \right)^{1/2} x$ ile boyutsuz uzunluk birimlerine dönüşüm yapalım, bunun için

$\frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial r} = \left(\frac{2m\omega_{ho}}{\hbar} \right)^{1/2} \frac{\partial}{\partial x}$ olur. Buradan da $\frac{\partial^2}{\partial r^2} = \left(\frac{2m\omega_{ho}}{\hbar} \right) \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ şeklinde

yazılabilir, bu ifadeleri (3.35) denkleminde yerine koyarsak

$$\begin{aligned} \mu\phi(x) = & -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2m\omega_{ho}}{\hbar} \right) \frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m\omega_{ho}^2 \left(\frac{\hbar}{2m\omega_{ho}} \right) x^2 \phi(x) \\ & + NU_0 A^2 \left[\frac{\phi^2(x)}{\left(\frac{\hbar}{2m\omega_{ho}} \right) x^2} \right] \phi(x) \end{aligned} \quad (3.36)$$

Buradan da

$$\begin{aligned} \mu\phi(x) = & -\hbar\omega_{ho} \frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} + \frac{\omega_{ho}\hbar}{4} x^2 \phi(x) \\ & + NU_0 A^2 \left(\frac{2m\omega_{ho}}{\hbar} \right) \left[\frac{\phi^2(x)}{x^2} \right] \phi^2(x) \end{aligned} \quad (3.37)$$

elde edilir. Buradaki $\frac{2mU_0}{\hbar^2}$ ifadesine γ dersek (3.37) denkleminin her iki tarafı $\hbar\omega_{ho}$ ile bölünürse

$$\frac{\mu\phi(x)}{\hbar\omega_{ho}} = -\frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{4} x^2 \phi(x) + \gamma NA^2 \left[\frac{\phi^2(x)}{x^2} \right] \phi(x) \quad (3.38)$$

ifadesi elde edilir. Burada $\frac{\mu}{\hbar\omega_{ho}}$ ifadesine de β deyip denklemini yeniden düzenlersek

$$\frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} + \beta\phi(x) - \frac{1}{4} x^2 \phi(x) - NA^2 \gamma \left[\frac{\phi^2(x)}{x^2} \right] \phi(x) = 0 \quad (3.39)$$

ve sonuçta

$$\frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + \left[\beta - \frac{1}{4} x^2 - NA^2 \gamma \left[\frac{\phi^2(x)}{x^2} \right] \right] \phi(x) = 0 \quad (3.40)$$

ifadesini elde etmiş oluruz. Burada $x = \sqrt{\frac{2m\omega_{ho}}{\hbar}}r$, $\phi(x) = \sqrt{8\pi ar}\psi(r)$ ve $\beta = \frac{\mu}{\hbar\omega_{ho}}$ şeklindedir. Buradaki amacımız hesaplamaları kolaylaştırabilmek için denkleminizi boyutsuz birimlerde yazmaktır. Denk.(3.37)'deki $\phi(x)$ normalize edilirse

$$\int_0^{\infty} dx |\phi(x)|^2 = n \quad (3.41)$$

şeklinde bir n sayısı tanımlanır. Bu N atom sayısı ile $n = 2N|a|\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}$ şeklinde ilişkilidir. (3.40) denklemini Edwards ve Burnett (1995) tarafından sınır özdeğer yöntemleriyle çözülmüştür. Bu yazarlar tek boyutta Gross-Pitaevskii denklemini küresel harmonik bir potansiyelde düşünerek sınır özdeğer problemini Runge-Kutta uzaysal-adım yöntemiyle çözmüşlerdir. Bu çözüm A , γ , β ve N parametrelerine bağlıdır ve $x=0$ ile $x \rightarrow \infty$ 'daki sınır koşullarından belirlenir. Sınır koşulları, denk.(3.40)'in asimptotik davranışının incelenmesiyle elde edilir. Burada $\phi(x)$ ve $\phi'(x)$ 'in $x=0$ 'daki değerleri ve $x \rightarrow \infty$ 'daki asimptotik davranışları belirlenir. Buradan belirlenen $\phi(0)$ ve $\phi'(0)$ değerleriyle A , γ , β ve N parametreleri kullanılarak (3.40) denkleminin çözümü $x=0$ 'dan başlanarak Runge-Kutta yöntemiyle belirli bir x_{max} değerine kadar sayısal olarak elde edilir, bu noktada asimptotik çözümlerle nümerik çözümün Wronskiyeni sıfır olacak şekilde, dalga fonksiyonunun normalizasyon parametresi olan A 'nın değeri ayarlanır. Bu yöntem genelde çözümleri büyük mesafelerde yokolan ikinci mertebeden denklemler için kullanılır.

3.2.2. Anizotropik tuzaklar için taban durum

Gross-Pitaevskii teorisinde m kütleli yoğunlaşmış bozonlar için taban durum enerjisi

$$E[\phi] = \int d\mathbf{r} \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\phi(\mathbf{r})|^2 + \frac{m}{2} (\omega_{\perp}^2 x^2 + \omega_{\perp}^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) |\phi(\mathbf{r})|^2 + \frac{2\pi\hbar^2 a}{m} |\phi(\mathbf{r})|^4 \right] \quad (3.42)$$

fonksiyoneliyle verilir, burada $\psi(\mathbf{r})$ yoğunlaşma dalga fonksiyonu, ω_{\perp} ve ω_z anizotropik tuzanın dış potansiyeliyle alakalı iki açısal frekanstır ve a ise s -dalga saçılma uzunluğudur. Dalga fonksiyonunun yoğunlaşmadaki atomların sayısına normalize olduğu varsayılır.

$$\int d\mathbf{r} |\phi(\mathbf{r})|^2 = N$$

(3.30) denklemindeki tuzanın frekansını anizotropik olarak düşünersek yani z aksinel koordinat ve $r_{\perp} = (x^2 + y^2)^{1/2}$ radyal koordinat olarak tanımlanırsa uygun frekanslar da ω_z ve $\omega_{\perp} = \omega_x = \omega_y$ olur. Silindirik ve radyal frekansların oranı $\lambda = \omega_z / \omega_{\perp}$ tuzanın asimetrisini belirler. $\lambda < 1$ iken tuzak puro şeklindedir, $\lambda > 1$ ise tuzak disk şeklindedir, $\lambda = 1$ durumu zaten izotropik durumu belirtmekteydi. O halde anizotropik tuzaktaki dış potansiyelin ω_{\perp} ve ω_z frekanslarına göre (3.30) denklemini yeniden yazarsak

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{m}{2} (\omega_{\perp}^2 x^2 + \omega_{\perp}^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) + \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} |\phi(\mathbf{r})|^2 \right] \psi(\mathbf{r}) = \mu \phi(\mathbf{r}) \quad (3.43)$$

ifadesi elde edilir, burada μ kimyasal potansiyeldir. Bu eşitlik nonlineer bir Schrödinger denklemi formuna sahiptir. Taban durum için etkili bir nümerik hesaplama Dalfovo ve Stringari (1996) tarafından yapılmıştır. Bu yazarlar en dik iniş yöntemiyle (3.42)'deki enerji fonksiyonelinin doğrudan minimizasyonunu içeren bir çözüm üretmişlerdir.

Gross-Pitaevskii teorisinin uygulanabilmesi için sistemin seyrek bir yapıda olması beklenir. Eğer n bozonların yoğunluğuysa, teorisinin uygulanabilirliğini ölçen parametre na^3 çarpımıdır ki bu 1'den daha küçük olmalıdır (a bozonların sert küre

yarıçapıdır). Bu şart deneylerde kullanılan alkali atom örnekleriyle sağlanır. Örneğin ^{87}Rb ile yapılan deneylerde 10000 atomun merkezi yoğunluğunun $10^{12} - 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ civarında olması beklenir ki bu $na^3 \cong 10^{-6}$ veya daha azına gider. Yoğuşmadaki atomların sayısının daha fazla olduğu sodyumla yapılan deneylerde (Davis ve ark. 1995) bile na^3 niceliği çok küçük kalır ($\cong 10^{-5}$). Teori, negatif saçılma uzunluğuna sahip seyrek durumdaki bozon sistemleri için de sağlanır. Ancak bu durumda, N sayısının büyük olduğu durumda çekici etkileşimle ortaya çıkan olası kararsızlıkta göz önünde bulundurulmalıdır. Sistemdeki parçacıklar çarpışırken, kısa mesafeli etkileşimler için daha uygun bir teori gerekir.

Buradaki formalizmi kolaylaştırmak için uzunluk ve dışarıdaki harmonik potansiyelin enerjisi gibi hesaplama ölçeğindeki bütün uzunluklarda ve enerjilerde geçerli olan farklı bir notasyon seçilmiştir. Bu nedenle standart uzunluklara giriş yaparız

$$a_{\perp} = \left(\frac{\hbar}{m\omega_{\perp}} \right)^{1/2}, a_z = \left(\frac{\hbar}{m\omega_z} \right)^{1/2} \quad (3.44)$$

ve uzaysal koordinat, enerji ve dalga fonksiyonu

$$\mathbf{r} = a_{\perp} \mathbf{r}_1 \quad (3.45)$$

$$E = \hbar\omega_{\perp} E_1 \quad (3.46)$$

$$\phi(\mathbf{r}) = \sqrt{N/a_{\perp}^3} \phi_1(\mathbf{r}_1) \quad (3.47)$$

şeklinde yeniden yazılır. Buradaki ϕ_1 dalga fonksiyonu 1'e normalizedir. Sonuçta

$$\lambda = \omega_z / \omega_{\perp} \quad (3.48)$$

asimetri parametresini tanımlarız ve

$$u_1 = \frac{8\pi a N}{a_{\perp}} \quad (3.49)$$

niceliğini tanımlarız. Bu değişiklerle Gross-Pitaevskii enerji fonksiyoneli

$$\frac{E_1}{N} = \int d\mathbf{r}_1 \left[|\nabla_1 \phi_1(\mathbf{r}_1)|^2 + (x_1^2 + y_1^2 + \lambda^2 z_1^2) |\phi_1(\mathbf{r}_1)|^2 + \frac{u_1}{2} |\phi_1(\mathbf{r}_1)|^4 \right] \quad (3.50)$$

formunu alır ve nonlinear Schrödinger eşitliği

$$\begin{aligned} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{m}{2} (\omega_\perp^2 x^2 + \omega_\perp^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) + \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \frac{N}{a_\perp^3} |\phi_1(\mathbf{r}_1)|^2 \right] \sqrt{\frac{N}{a_\perp^3}} \phi_1(\mathbf{r}_1) \\ = \mu \sqrt{\frac{N}{a_\perp^3}} \phi_1(\mathbf{r}_1) \end{aligned} \quad (3.51)$$

haline gelir. $a_\perp^2 = \frac{\hbar}{m\omega_\perp}$ olduğundan $\frac{1}{2} m\omega_\perp^2 = \frac{\hbar\omega_\perp}{2a_\perp^2}$ ve $\frac{\hbar^2}{2m} = a_\perp^2 \omega_\perp \hbar$ ifadeleri elde

edilip bu denklemden yerine koyulur ve

$$\left[-\frac{a_\perp^2 \omega_\perp \hbar}{2} \nabla^2 + \frac{\hbar\omega_\perp}{2a_\perp^2} (x^2 + y^2 + \lambda^2 z^2) + \frac{8\pi a N}{a_\perp} |\phi_1(\mathbf{r}_1)|^2 \right] \phi_1(\mathbf{r}_1) = \mu \phi_1(\mathbf{r}_1) \quad (3.52)$$

ifadesi bulunur, bu denklem $\frac{\hbar\omega_\perp}{2}$ parantezine alınır

$$\frac{\hbar\omega_\perp}{2} \left[-a^2 \nabla^2 + \frac{1}{a_\perp^2} (x^2 + y^2 + \lambda^2 z^2) + \frac{8\pi a N}{a_\perp} |\phi_1(\mathbf{r}_1)|^2 \right] \phi_1(\mathbf{r}_1) = \mu \phi_1(\mathbf{r}_1) \quad (3.53)$$

bulunur. Burada $\frac{8\pi a N}{a_\perp} = u_1$ olarak alınır ve sonra da $a_\perp = 1$ alınır denklemin

$$\frac{1}{2} \left[-\nabla^2 + (x^2 + y^2 + \lambda^2 z^2) + u_1 |\phi_1(\mathbf{r}_1)|^2 \right] \phi_1(\mathbf{r}_1) = \frac{\mu}{\hbar\omega_\perp} \phi_1(\mathbf{r}_1) \quad (3.54)$$

olur, $\frac{\mu}{\hbar\omega_\perp}$ ifadesine de μ_1 dersek

$$\left[-\nabla^2 + (x^2 + y^2 + \lambda^2 z^2) + u_1 |\phi_1(\mathbf{r}_1)|^2 \right] \phi_1(\mathbf{r}_1) = 2\mu_1 \phi_1(\mathbf{r}_1) \quad (3.55)$$

haline gelir, burada $\mu = \hbar\omega_{\perp}\mu_1$ şeklindedir. (3.55) denkleminin sol tarafına gelen u_1 boyutsuz niceliği yoğunlaşma için eşitlikteki etkileşmenin etkisini karakterize eder. Her ne kadar sistem çok seyrek olsa da etkileşmeler Gross-Pitaevskii denklemlerinin çözümlerinin belirlenmesinde önemli bir rol oynamaz. Şimdi denk.(3.55)'in çözümünün analitik olarak mevcut olduğu iki durumu; etkileşmeyen parçacıkların durumunu ve güçlü itici etkileşmeleri kısaca tartışacağız.

3.2.2.1. Etkileşmeyen model

Saçılma uzunluğu olan a yok iken, problem anizotropik harmonik osilatör için kararlı Schrödinger denkleminin çözümüne indirgenir.

Şimdi tek boyutta herhangi bir potansiyeli bir x_0 noktası civarında Taylor serisine açtığımızı düşünelim:

$$V(x) = V(x_0) + \left(\frac{dV}{dx} \right)_{x=x_0} (x - x_0) + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2V}{dx^2} \right)_{x=x_0} (x - x_0)^2 + \dots \quad (3.56)$$

Eğer x_0 , potansiyelin bir minimum değeri ise serideki ikinci terim sıfır olur ve birinci terimin enerjiye katkısı sıfır olduğundan üçüncü terimi kullanırız. Böylece bir ilk yaklaşıklıkla minimum civarında $\frac{1}{2}k(x - x_0)^2$ potansiyeline sahip bir basit harmonik salıncı gibi davranabilir. Böyle bir sistemin potansiyel enerjisini tüm x değerleri için

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \quad (3.57)$$

seçeriz. Bu durum için Schrödinger denkleminin çözümü $\psi(x) = h(x)e^{-\alpha^2 x^2/2}$ ile verilir, burada $\alpha^2 = \sqrt{km}/\hbar$ şeklinde olup, $h(x)$ fonksiyonu Hermite polinomları ile ilgilidir. Normalize edilmiş çözümlerin tam ifadesi

$$\psi_n(x) = \left(2^n n! \sqrt{\pi}\right)^{-1/2} H_n(\alpha x) e^{-\alpha^2 x^2/2} \quad (3.58)$$

şeklindedir. Buradaki H_n Hermite polinomları, Rodrigues formülü ile

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2/2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \quad (3.59)$$

şeklinde verilebilir. Polinomun derecesi enerji seviyelerini etiketleyen n kuantum sayısı ile belirlenir. Schrödinger denkleminin çözümünden bulunabilen enerji seviyeleri de

$$E_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (3.60)$$

şeklindedir, burada $\omega_0 = \sqrt{k/m}$ salıncının klasik açısal frekansıdır.

Yukarıda anlattıklarımızı üç boyutta alkali atomları manyetik bir tuzakta sınırlayan bir potansiyele uyguladığımızda

$$V_{ext}(r) = \frac{m}{2} (\omega_x x^2 + \omega_y y^2 + \omega_z z^2) \quad (3.61)$$

kuadratik formunu elde edebiliriz. Atom-atom etkileşmesinin ihmal edildiği bu durumda, hâlihazırda bütün öngörüler analitiktir ve nispeten basittir. Çok-cisim Hamiltoniyeni, özdeğerleri

$$\mathcal{E}_{n_x, n_y, n_z} = \left(n_x + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_x + \left(n_y + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_y + \left(n_z + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_z \quad (3.62)$$

formuna sahip tek parçacık Hamiltoniyenlerinin toplamıdır, burada $\{n_x, n_y, n_z\}$ negatif olmayan tamsayılardır. (3.61) potansiyeliyle sınırlanmış N tane etkileşmeyen

bozonun $\phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ taban durumu, bütün parçacıkları en düşük tek-cisim durumuna koyarak elde edilir ve

$$\phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \prod_i \varphi_0(\mathbf{r}_i) \quad (3.63)$$

çarpımıyla verilir, buradaki $\varphi_0(\mathbf{r})$

$$\varphi_0(\mathbf{r}) = \left(\frac{m\omega_{ho}}{\pi\hbar} \right)^{3/4} \exp\left[-\frac{m}{2\hbar} (\omega_x x^2 + \omega_y y^2 + \omega_z z^2) \right] \quad (3.64)$$

ile verilir ve osilatör frekanslarının geometrik ortalamasını ortaya çıkarmış oluruz

$$\omega_{ho} = (\omega_x \omega_y \omega_z)^{1/3}. \quad (3.65)$$

Yoğunluk dağılımı da $n(\mathbf{r}) = N |\varphi_0(\mathbf{r})|^2$ şeklinde olur ve bunun değeri de N ile artacaktır. Bulutun boyutu, N^3 den bağımsızdır ve buna karşılık gelen harmonik osilatörün genişliği ile belirlenir:

$$a_{ho} = \left(\frac{\hbar}{m\omega_{ho}} \right)^{1/2} \quad (3.66)$$

Bu sistemin en önemli genişlik ölçülerinden biri olan harmonik osilatörün etkin genişliğidir.

Sınırlayıcı alanın şekli problemin simetrisini belirler. Bose-Einstein yoğunlaşmasını gözlemek için rubidyum ve sodyum üzerine yapılan ilk deneylerde silindirik simetri kullanılmıştır. Şimdi burada z 'yi eksenal koordinat ve $r_{\perp} = (x^2 + y^2)^{1/2}$ 'yi ise radyal koordinat olarak tanımlayalım ve bunlara karşılık gelen frekanslarda ω_z ve $\omega_{\perp} = \omega_x = \omega_y$ olsun. Eksenal ve radyal frekanslar arasındaki oran $\lambda = \omega_z / \omega_{\perp}$ tuzanın simetrisini belirleyen parametredir.

(3.64) denklemini ω_{\perp} ve ω_z 'ye göre düzenlersek

$$\varphi_0(\mathbf{r}) = \left(\frac{m\omega_{ho}}{\pi\hbar} \right)^{3/4} \exp \left[-\frac{m}{2\hbar} \omega_{\perp} \left(x^2 + y^2 + \frac{\omega_z}{\omega_{\perp}} z^2 \right) \right] \quad (3.67)$$

ifadesini elde ederiz. (3.65) denkleminde $\omega_z = \lambda\omega_{\perp}$ yerine koyulursa

$$\omega_{ho} = \omega_{\perp} \lambda^{1/3} \quad (3.68)$$

bulunur, ayrıca $a_{\perp}^2 = \frac{\hbar}{m\omega_{\perp}}$ şeklindedir, buradan $\omega_{\perp} = \frac{\hbar}{ma_{\perp}^2}$ ve $\frac{m\omega_{\perp}}{\pi\hbar} = \frac{1}{\pi a_{\perp}^2}$ elde edilir, bu ifadeler (3.67) denkleminde yerine koyulursa

$$\varphi_0(r) = \left(\frac{\lambda^{1/3}}{\pi a_{\perp}^2} \right)^{3/4} \exp \left[-\frac{1}{2a_{\perp}^2} (x^2 + y^2 + \lambda z^2) \right] \quad (3.69)$$

ifadesi elde edilir. $x^2 + y^2 = r_{\perp}^2$ olduğundan bunu denk.(3.69)'de yerine koyup bu denklemi düzenlersek

$$\varphi_0(r) = \frac{\lambda^{1/4}}{\pi^{3/4} a_{\perp}^{3/2}} \exp \left[-\frac{1}{2a_{\perp}^2} (r_{\perp}^2 + \lambda z^2) \right] \quad (3.70)$$

ifadesi elde edilir, burada $a_{\perp} = \lambda^{1/6} a_{ho}$ şeklinde olduğu da görülür.

Böylelikle $a_{\perp} = 1$ alınarak taban durumun dalga fonksiyonu

$$\phi_1(r_1) = \lambda^{1/4} \pi^{-3/4} \exp \left[-\frac{1}{2} (x_1^2 + y_1^2 + \lambda z_1^2) \right] \quad (3.71)$$

şekline gelir. Bu bir Gaussyen eğriyi ifade eder. Parçacık başına düşen enerjiye denk gelen kimyasal potansiyel $1 + \lambda/2$ ifadesine dönüşür. Gaussyen farklı yatay ve düşey genişliklere sahiptir. Özellikle $\langle x_1^2 \rangle = \langle y_1^2 \rangle = 1/2$ ve $\langle z_1^2 \rangle = 1/2\lambda$ şeklindedir. Momentum operatörleri p_x^2 ve p_z^2 'nin ortalama değerleri de kolayca hesaplanabilir. Buradan da

$$\sqrt{\langle p_z^2 \rangle / \langle p_x^2 \rangle} = \sqrt{\langle x_1^2 \rangle / \langle z_1^2 \rangle} = \sqrt{\lambda} \quad (3.72)$$

niceliği asimetriden kaynaklanan şekil oranının (aspect ratio) bir ölçütü olarak düşünülür bu da hız dağılımının anizotropisini karakterize eder.

3.2.2.2. Güçlü itici durum

Parçacıkların sayısı çok fazla veya etkileşmeler çok güçlü iken karşıt durum elde edilir, öyle ki enerji fonksiyonundaki kinetik enerji ihmal edilebilir. Bu da u_1 parametresinin çok büyük değerlerine karşılık gelir. Çözüm denk. (3.55) deki kinetik enerji terimi düşürülerek kolayca elde edilebilir. Böylece

$$\phi_1^2(\mathbf{r}_1) = \frac{1}{u_1} (2\mu_1 - x_1^2 - y_1^2 - \lambda^2 z_1^2) \quad (3.73)$$

ifadesi elde edilir. Kimyasal potansiyel $\int \psi_1^2 d\mathbf{r}_1 = 1$ normalizasyon şartıyla hesaplanır. Buradan

$$\mu_1 = \frac{1}{2} \left(\frac{15}{8\pi} \lambda u_1 \right)^{2/5} \quad (3.74)$$

ve $\mu = \hbar \omega_{\perp} \mu_1$ bulunur. Denk(3.49)'da verilen u_1 tanımını ve $\mu = dE/dN$ ilişkisini kullanarak $E/N = (5/7)\mu$ ilişkisi de bulunabilir. Atom bulutu $R_1 = \sqrt{2\mu_1}$ yarıçapını ve $Z_1 = \lambda R_1$ düşey boyutunu aşar. Böylece sonuçlar $\langle x_1^2 \rangle$ ve $\langle z_1^2 \rangle$ kare yarıçapları için

$$\langle x_1^2 \rangle = \frac{2\mu_1}{7} \quad \langle z_1^2 \rangle = \frac{2\mu_1}{7\lambda^2} \quad (3.75)$$

bulunur. z değişkenine göre dalga fonksiyonunun farklı ölçekli özellikleri nedeniyle bu durumdaki $\sqrt{\langle p_z^2 \rangle / \langle p_x^2 \rangle}$ şekil oranı (aspect ratio) λ 'ya eşittir, ancak etkileşmeyen durumda bu geçerli değildir. Bulutun merkezi yoğunluğu $\sqrt{2\mu_1/u_1}$ şeklindedir. Gerçek dalga fonksiyonunun düzgün olarak kaybolduğu yüzey

bölgesinin yapısından ayrı olan (3.73) denklemindeki dalga fonksiyonunun, büyük N değerleri için (3.55) deki nonlinear Schrödinger denkleminin gerçek çözümüne yaklaşması gerekir. Bu gerçek izotropik tuzaklarda Edwards ve Burnett(1995) tarafından zaten çözülmüştür. Ancak bazı gözlenebilirler büyük N değerinde bile bu yüzey yapısı ile etkilenebilirler.



4. HESAPLAMALARIN AYRINTILARI ve SONUÇLAR

Bu bölümde tuzaklarla sınırlanmış sert küre bozonlarda gözlenen Bose-Einstein yoğuşmasının özelliklerinin incelenmesi için Gross-Pitaevskii denkleminin çözümünde kullanılan yöntemin ayrıntıları ile bu sistemin Varyasyonel Monte Carlo yöntemi ile incelenmesinin ayrıntılarını ele alacağız. Bu yöntemlerden elde edilen sonuçları karşılaştırmalı olarak sunacağız.

4.1. Gross-Pitaevskii Denkleminin Çözümü

Burada amacımız taban durum özelliklerini incelemek için

$$E[\phi] = \int d\mathbf{r} \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \phi(\mathbf{r})|^2 + \frac{m}{2} (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) |\phi(\mathbf{r})|^2 + \frac{2\pi\hbar^2 a}{m} |\phi(\mathbf{r})|^4 \right] \quad (4.1)$$

Gross-Pitaevskii fonksiyoneli minimum yapan dalga fonksiyonunu belirlemektir. Biz burada sayısal olarak bu minimizasyonu gerçekleştirmek için Dalfovo ve Stringari'nin (1996) önerdikleri en dik iniş yöntemini (*steepest descent method*) kullandık. Bu yöntemde temel olarak rasgele bir ilk durumdan başlanır ve sanal bir zaman içinde ilerletilir. Şimdi normalize edilmiş bir $\phi(\mathbf{r}, t)$ dalga fonksiyonu düşünelim. Böyle bir dalga fonksiyonunun normalize olması sınırlaması altında (4.1) denkleminde verilen GP fonksiyonelinin türevi

$$\frac{\partial(E/N)}{\partial\phi(r,t)} = \hat{H}\phi(r,t) \quad (4.2)$$

şeklinde elde edilir. Zamana bağlı Schrödinger denklemini hatırlarsak $\left(i\hbar \frac{\partial\phi}{\partial t} = \hat{H}\phi \right)$

yukarıdaki denklemin sol tarafını zamana göre dalga fonksiyonunun türevi gibi düşünebiliriz. Ancak burada sadece kararlı durumlarla ilgilendiğimiz için bahsedilen zaman gerçek bir zaman değildir. Sanal (hayali) bir zaman değişkeni için

$$\frac{\partial}{\partial t} \phi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\bar{\partial}(E/N)}{\bar{\partial}\phi(\mathbf{r}, t)} = -\hat{H}\phi(\mathbf{r}, t) \quad (4.3)$$

şeklinde, burada \hat{H} Gross-Pitaevskii Hamiltoniyenidir ve ϕ 'ye nonlineer olarak bağımlıdır. Hayali zaman sonsuza giderken, zamana göre türevi sıfıra gider ve (4.1) fonksiyonelinin minimum olduğu duruma karşılık gelen çözüm elde edilir yani $\phi(\mathbf{r}, \infty) = \phi_1(\mathbf{r})$ 'dir. (4.3) denklemindeki $\frac{\bar{\partial}}{\bar{\partial}\phi}$ işlemi normalizasyon sınırlaması altında fonksiyonel türevdir. Esas olarak bu denklem dalga fonksiyonu uzayında izlenen yolu tanımlar ve buradaki sanal zaman sadece farklı durumlara karşılık gelen dalga fonksiyonlarını etiketleyen bir değişkendir.

Uygulamada, keyfi bir zaman adımı Δt seçilir ve Δt zaman adımı sonrasındaki dalga fonksiyonu

$$\phi(\mathbf{r}, t + \Delta t) \approx \phi(\mathbf{r}, t) - \Delta t H \phi(\mathbf{r}, t) \quad (4.4)$$

denkleminde elde edilir. Dalga fonksiyonu her adımda yeniden normalize edilir. Bu anlamda Δt zaman adımı yakınsama hızını kontrol eden bir parametredir.

Pratikte (r_{\perp}, z) uzayı iki boyutlu bir örgüye ayrılır öyle ki dalga fonksiyonu bir matris haline gelir. Her zaman adımında matris elemanları denk.(4.4)'deki gibi değişir, burada Hamiltoniyen içinde bulunan türevler sonlu-fark formülleriyle hesaplanır. Algoritma; harmonik potansiyelin analitik çözümüyle etkileşmeyen durumun sonuçları karşılaştırılarak test edilebilir. Etkileşimli durumda, N sayısı büyükken, nümerik sonuçları denk.(3.73)'deki analitik çözümle karşılaştırmak da olasıdır. Uygun diğer bir test de virial teoremi ile verilebilir, bu yöntem de herhangi bir N değerinde sistemin kinetik ve potansiyel enerjilerine olan katkıları arasındaki ilişkileri belirler.

Sistem $0 < r_{\perp} < 5$ aralığında 50 noktalı bir bölme kullanılarak oldukça iyi tanımlanır, aynı şeyler z içinde geçerlidir. Hayali zamandaki gerekli adımların sayısı, istenen yakınsama derecesine ve ilk deneme dalga fonksiyonunun seçimine bağlıdır.

4.2. VMC Uygulamasının Ayrıntıları

3. bölümde tanımlandığı gibi VMC varyasyonel ilkeye dayanan bir kuantum Monte Carlo yöntemidir. Bu yöntemin başlangıç noktası bir Hamiltoniyen ve varyasyonel dalga fonksiyonunun uygun bir seçimidir. Burada ele alınan problem için çok cisim Hamiltoniyeni

$$H = \sum_i^N \frac{1}{2} (-\nabla_i^2 + x_i^2 + y_i^2 + \lambda^2 z_i^2) + \sum_{i < j} V_{\text{int}}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \quad (4.5)$$

formundadır, buradaki V_{int} sert küre potansiyeli olup

$$V_{\text{int}}(r) = \begin{cases} \infty & r \leq a \\ 0 & r > a \end{cases} \quad (4.6)$$

şeklinde. Burada uzunluklar, tuzağın karakteristik uzunluğunun birimlerinde (a_{ho}) ve enerji de harmonik osilatörün enerjisi birimlerinde ($\hbar\omega_{\perp}$) ifade edilmiştir. λ parametresi, z eksenini doğrultusundaki tuzak frekansı (ω_z) ile xy düzlemindeki tuzak frekansının (ω_{\perp}) oranıdır. Yapılan hesaplamalarda küresel simetrik tuzak için $\lambda = 1$ alınmıştır, eliptik simetriye sahip olan tuzaklarda ise $\lambda = \sqrt{8}$ olarak alınır. Bu değer Anderson ve arkadaşlarının (1995) deneylerde kullandığı değere karşılık gelir. Bir sert küre potansiyeli ile etkileşim modellerinin seçimi bölüm 2.1'de tartışılmıştır. Özet olarak, yoğunlaşmış durumdaki seyreltik bozon sistemleri için $n\lambda_T^3 \geq 2,616$ 'dır, burada λ_T termal dalga boyudur (Huang 2001). Bunun anlamı şudur ki atomik dalga boyu, sert küre çapıyla karşılaştırıldığında oldukça büyüktür ($\lambda_T \gg a$ veya $ka \ll 1, k = 2\pi/\lambda_T$). Bu bölgede iki parçacığın saçılması olayında saçılma açılımının s -dalga bileşeni ile baskın olur ve atomlar arası potansiyel için yapılacak küresel simetrik seçimlerin çoğu birbirine denktir. Basit bir sert küre potansiyeli genel olarak yeterlidir ve bir temas potansiyeli yaklaşımıyla doğrudan karşılaştırılması $a \ll \lambda_T$ bölgesinde mümkündür ki ve bu yaklaşım GP denklemi ile ifade edilir.

4.2.1. Deneme dalga fonksiyonu

Bu çalışmada deneme dalga fonksiyonu olarak iki cisim etkilerini de içeren

$$\psi_v = \prod_i g(r_i) \prod_{i<j} f(r_{ij}) \quad (4.7)$$

formunda bir dalga fonksiyonu kullandık. Bu dalga fonksiyonu şekli ilk olarak Jastrow (1955) tarafından önerilmiştir ve Jastrow formu olarak adlandırılır. Buradaki $g(r_i)$ fonksiyonu taban durumunda tuzak potansiyelinden ve diğer parçacıklar tarafından oluşturulan ortalama alandan gelen etkileri içeren tek parçacık terimidir. $f(r_{ij})$ ise parçacıklar arası etkileşimin katkısını içeren bir Jastrow terimidir. Bu çalışmada DuBois ve Glyde (2001) tarafından önerildiği gibi $k \ll 1$ durumunda katı küre saçılma probleminin s -dalga çözümü olan

$$f(r_{ij}) = \begin{cases} (1 - a/r_{ij}) & r_{ij} > a \\ 0 & r_{ij} \leq a \end{cases} \quad (4.8)$$

fonksiyonu Jastrow çarpanı olarak kullanılmıştır. Tek parçacık terimi $g(r_i)$ için ise

$$g(r_i) = \exp(-\alpha(x_i^2 + y_i^2 + \beta z_i^2)) \quad (4.9)$$

formu kullanılmıştır. Buradaki α ve β varyasyonel parametrelerdir. Bu dalga fonksiyonu şeklinin iki-parçacık korelasyonlarını da içeren harmonik olarak tuzaklanmış bir Bose sistemini oldukça iyi bir şekilde tanımlaması beklenir.

Bölüm (3.1.2)'de bir gözlenebilirin beklenen değerini vermiştik, bu durumda sistemin toplam enerjisinin beklenen değeri

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \langle \psi_v(R; \alpha) | H | \psi_v(R; \alpha) \rangle = \int \psi_v^*(R; \alpha) H \psi_v(R; \alpha) dR \\ &= \int |\psi_v(R; \alpha)|^2 \frac{1}{\psi_v(R; \alpha)} H \psi_v(R; \alpha) dR \end{aligned} \quad (4.10)$$

şeklinde verilir. Burada R vektörü, N parçacıklı bir sistemde bütün parçacıkların konumlarını gösteren $3N$ boyutlu bir vektördür ve α dalga fonksiyonunda yer alan

serbest parametrelerdir. $\frac{1}{\psi} \hat{H}\psi$ ifadesi “lokal enerji” olarak adlandırılır ve parçacıkların yerleşiminin R vektörü ile verildiği duruma karşılık gelen enerjidir.

Daha önce anlatılan Monte Carlo integrasyon yönteminde $\frac{|\psi_v(R; \alpha)|^2}{\int |\psi_v(R; \alpha)|^2 dR}$ ağırlık

fonksiyonu olarak kullanılarak (4.10) denkleminin integral hesaplanabilir. Sistemin taban durumunu en iyi tanımlayan çözümü elde etmek için enerjinin beklenen değerini minimum yapan parametrelerin belirlenmesi gerekir. Bu çalışmada kullanılan dalga fonksiyonu sadece iki serbest parametre (α ve β) içermektedir. Dolayısıyla enerjinin beklenen değeri sadece bu iki parametreye bağlı olacaktır, yani $\langle E \rangle = E(\alpha, \beta)$ yazabiliriz. Enerjinin minimum noktası

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha} = 0, \frac{\partial E}{\partial \beta} = 0 \quad (4.11)$$

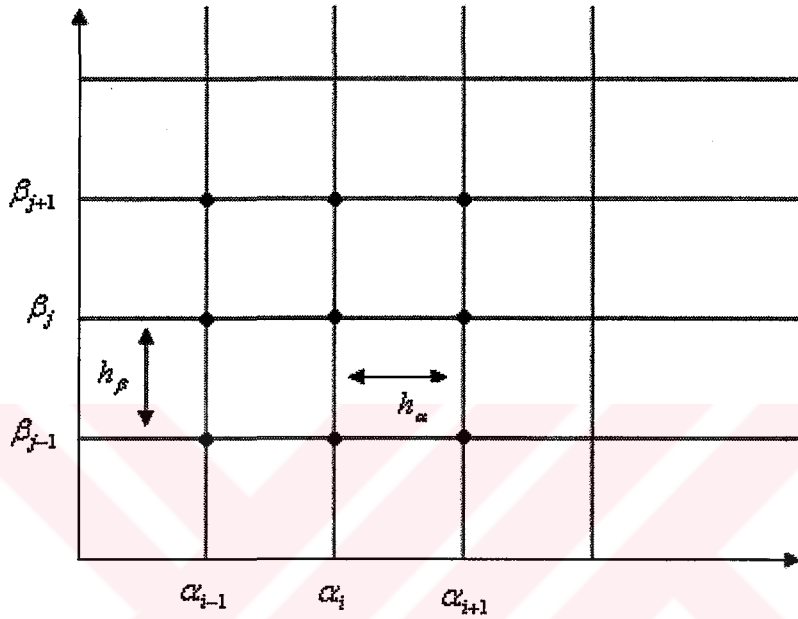
denklemlerini sağlar. Bu iki denklem α ve β bilinmeyenleri için çözülerek aranan dalga fonksiyonu elde edilir. Bu çalışmada bu denklemlerin çözümü için iyi bilinen Newton-Raphson yönteminin iki bilinmeyenli fonksiyonlar için geliştirilmiş bir hali kullanılmıştır. Bu yaklaşımda Newton-Raphson iterasyonunun bir adımını için

$$\alpha_{n+1} = \alpha_n - \frac{\left(\frac{\partial E}{\partial \alpha}\right)\left(\frac{\partial^2 E}{\partial \beta^2}\right) - \left(\frac{\partial E}{\partial \beta}\right)\left(\frac{\partial^2 E}{\partial \alpha \partial \beta}\right)}{\left(\frac{\partial^2 E}{\partial \alpha^2}\right)\left(\frac{\partial^2 E}{\partial \beta^2}\right) - \left(\frac{\partial^2 E}{\partial \alpha \partial \beta}\right)^2} \quad (4.12)$$

$$\beta_{n+1} = \beta_n - \frac{\left(\frac{\partial E}{\partial \beta}\right)\left(\frac{\partial^2 E}{\partial \alpha^2}\right) - \left(\frac{\partial E}{\partial \alpha}\right)\left(\frac{\partial^2 E}{\partial \alpha \partial \beta}\right)}{\left(\frac{\partial^2 E}{\partial \alpha^2}\right)\left(\frac{\partial^2 E}{\partial \beta^2}\right) - \left(\frac{\partial^2 E}{\partial \alpha \partial \beta}\right)^2} \quad (4.13)$$

denklemleri kullanılır. α ve β parametreleri için verilen başlangıç değerleri aranan çözüme yeterince yakın olduğu zaman bu iterasyon daima yakınsar. Burada enerjinin α ve β parametrelerine göre türevlerini hesaplamak için basit sonlu farklar

yaklaşımı kullanılmıştır. Bu kısmi türevleri hesaplamak için α ve β parametrelerinin 9 farklı değerinde enerjinin beklenen değeri hesaplanmıştır. Bu 9 noktaya karşılık gelen α ve β değerleri sembolik olarak aşağıdaki şekilde gösterilmiştir.



Enerjinin α_i, β_j noktalarına karşılık gelen beklenen değerini $E(\alpha_i, \beta_j) = E_{ij}$ ile gösterirsek, kısmi türevleri

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha} = \frac{E_{i+1,j} - E_{i-1,j}}{2h_\alpha}$$

$$\frac{\partial E}{\partial \beta} = \frac{E_{i,j+1} - E_{i,j-1}}{2h_\beta}$$

$$\frac{\partial^2 E}{\partial \alpha^2} = \frac{E_{i+1,j} - 2E_{i,j} + E_{i-1,j}}{h_\alpha^2}$$

$$\frac{\partial^2 E}{\partial \beta^2} = \frac{E_{i,j+1} - 2E_{i,j} + E_{i,j-1}}{h_\beta^2}$$

$$\frac{\partial^2 E}{\partial \alpha \partial \beta} = \frac{E_{i+1,j+1} - E_{i+1,j-1} - E_{i-1,j+1} + E_{i-1,j-1}}{4h_\alpha h_\beta}$$

şeklinde verilebilir.

Bu kısmi türevlerin hesaplanabilmesi için her 9 α ve β parametre çiftine karşılık gelen noktada enerjinin beklenen değerinin hesaplanması gerekir. Ancak her farklı parametre çifti için ayrı bir Monte Carlo integrasyonunun yapılması hem çok uzun hesaplama zamanı gerektirir, hem de farklı yollar boyunca ilerleyen sistemler sebebiyle istatistiksel hatalarla karşılaşılır ve türevleri hesaplarken bu hatalar daha da belirgin hale gelir.

Bu hataları engellemek için bu çalışmada bağımlı örnekleme (correlated sampling) yöntemi kullanılmıştır. Bağımlı örneklemede Monte Carlo integrasyonu sırasında örnekleme bir α ve β parametre çiftine göre yapılır, diğer parametre çiftleri için ise, örneğin (α', β') , aşağıdaki yaklaşım kullanılır.

Enerjinin α', β' parametreleri için beklenen değeri (4.10) denklemine göre

$$E(\alpha', \beta') = \int |\psi(\alpha', \beta')|^2 \frac{1}{\psi(\alpha', \beta')} H\psi(\alpha', \beta') dR \quad (4.14)$$

şeklindedir, bu integralin içini $|\psi(\alpha, \beta)|^2$ ile çarpıp bölersek

$$E(\alpha', \beta') = \int |\psi(\alpha, \beta)|^2 \left| \frac{\psi(\alpha', \beta')}{\psi(\alpha, \beta)} \right|^2 \frac{1}{\psi(\alpha', \beta')} H\psi(\alpha', \beta') dR \quad (4.15)$$

ifadesini elde ederiz. Bu son ifadede $|\psi(\alpha, \beta)|^2$ 'yi ağırlık fonksiyonu olarak düşünürsek dağılımı $|\psi(\alpha, \beta)|^2$ 'ye göre örneklenmiş noktalar üzerinden yapılacak bir integrasyon bize $E(\alpha', \beta')$ değerini verecektir. Ancak bu yöntemin verimli sonuç verebilmesi için $\left| \frac{\psi(\alpha', \beta')}{\psi(\alpha, \beta)} \right|^2 \approx 1$ olması yani α, β parametre çifti ile α', β' çifti arasında çok büyük fark olmaması gerekir.

Bu çalışmada önce yukarıda anlatılan yöntemle enerjinin beklenen değeri minimize edilerek uygun α ve β değerleri dolayısıyla taban durum dalga fonksiyonu belirlenmiştir. Daha sonra bu dalga fonksiyonu kullanılarak sistemin fiziksel özellikleri bulunmuştur.

4.3. Sonular

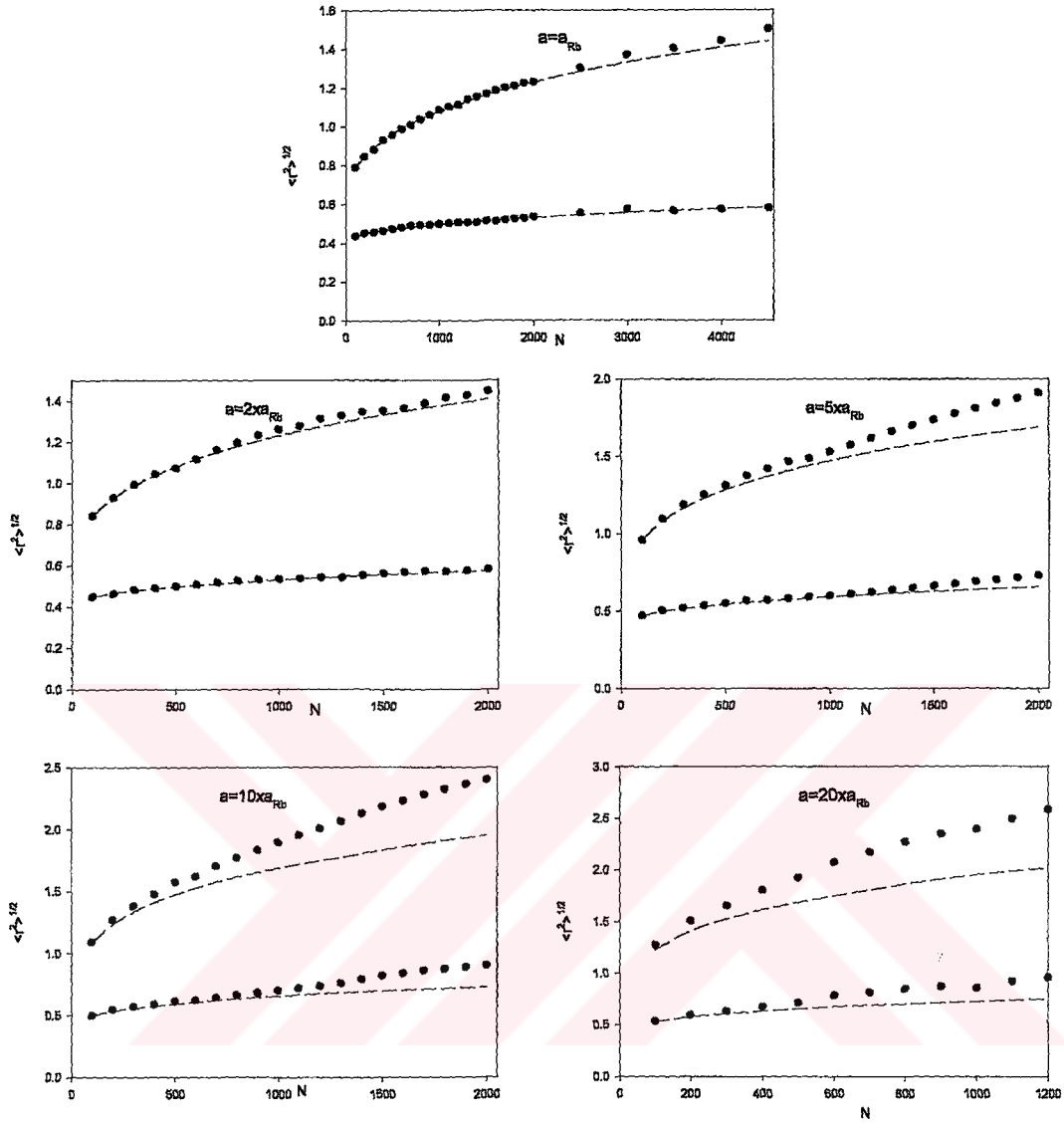
Bu b6l6mde anizotropik bir tuzakta tutulan seyrek bir katı k6re bozon sistemi iin elde ettiėimiz sonuları vereceėiz. Bu sonulara gemeden 6nce katı k6re etkileşim potansiyeli yaklaşımının son derece basit bir yaklaşım olduėunu ancak seyrek bir gazın genel davranış 6zelliklerini incelemek iin yeterli bir model olduėunu vurgulamak faydalı olacaktır. Bu sebeple hem GP denkleminin 6z6mlerinde hem de VMC analizinde paracıklar arası etkileşim potansiyelinin bir katı k6re potansiyeli olduėu varsayılmıştır.

4.3.1. Uzaysal daėılım

Bozon bulutunun uzaysal daėılımının anlaşılması aısından paracıkların ortalama aksenel ve radyal konumları 6nemlidir. Ayrıca bu ortalama konumların sistemin diėer parametreleriyle nasıl deėiştiiėinin g6r6lmesi de 6nemlidir. Bu sebeple Őekil 4.1.'de katı k6re yarıapının farklı deėerleri iin elde edilen radyal ve aksenel yer deėiştirmelerin kok ortalama deėerleri tuzakta bulunan paracık sayısına karřılık izilmiştir. Grafikteki noktalar VMC sonularını kesikli izgiler ise Gross-Pitaevskii denkleminin 6z6m6nden elde edilen sonuları g6stermektedir. Grafiklerden de g6r6leceėi gibi saılma uzunluėunun k66k deėerlerinde ve tuzaktaki paracık sayısının az olması halinde her iki y6ntemden elde edilen sonular birbirleriyle son derece uyumludur.

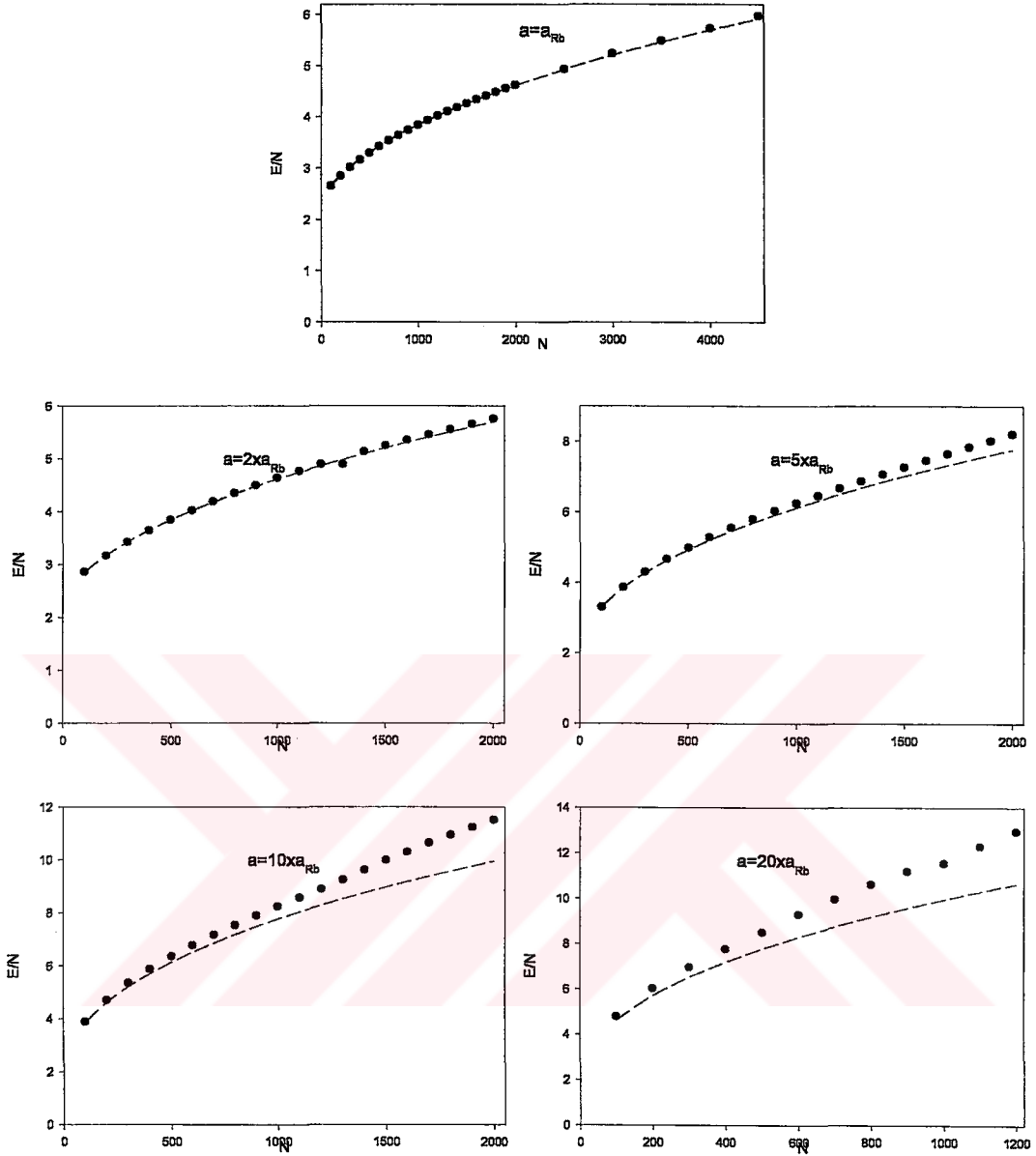
D6ř6k paracık sayısı ve k66k saılma uzunluėu seyrek gaz limitine karřılık gelir ve Gross-Pitaevskii denklemleri bu b6lgede geerlidir. VMC y6nteminden bulunan sonuların seyrek gaz limitinde Gross-Pitaevskii denklemiyle uyumlu sonular vermesi kullanılan VMC yaklaşımının g6venli bir yaklaşım olduėunu g6sterir.

Seyrek gaz limitinden uzaklařıldıka her iki y6ntem arasında bir farkın ortaya ıktıėı Őekil 4.1.'den g6r6lmektedir. Y6ksek yoėunluklarda Gross-Pitaevskii denklemleri bozon bulutunun yarıapını daha k66k bulmaktadır. Bozonların tuzak



Şekil 4.1. Katı küre yarıçapının farklı değerleri için elde edilen radyal ve eksenel yer değiştirmelerin kok ortalama değerleri tuzakta bulunan parçacık sayısına karşılık çizilmiştir.

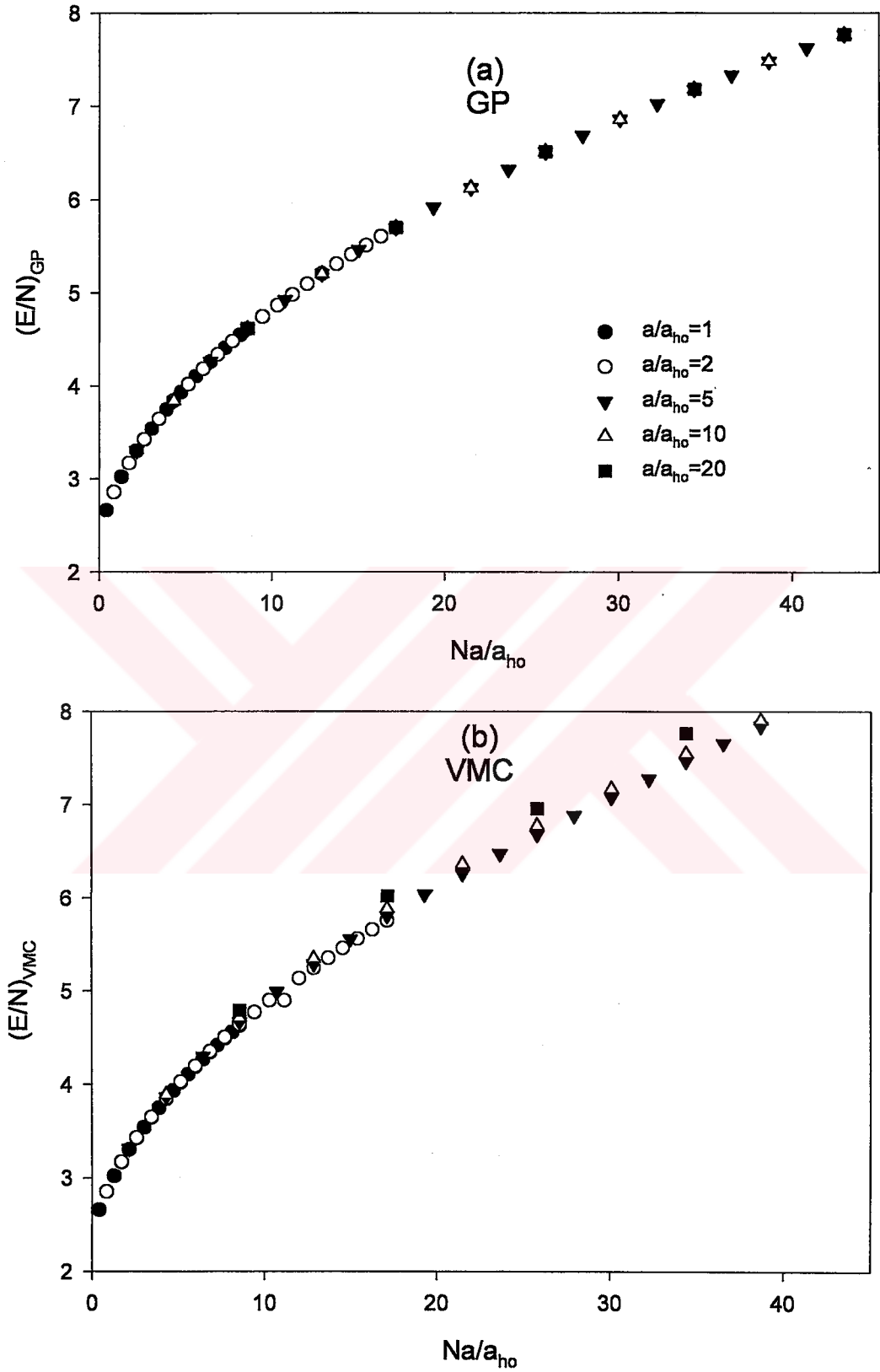
potansiyeliyle olan etkileşimlerinden kaynaklanan potansiyel enerjileri doğrudan $\langle r^2 \rangle$ ve $\langle z^2 \rangle$ ile orantılı olduğundan Gross-Pitaevskii yaklaşımı sistemin toplam enerjisine olan potansiyel enerji katkısını daha küçük bulur. Ancak, bulut daha toplu bulunduğu için Gross-Pitaevskii yaklaşımında parçacıklar arası etkileşimden gelen potansiyel enerji katkısı daha büyük bulunur.



Şekil 4.2. Parçacık başına enerjinin tuzaktaki toplam parçacık sayısı ile değişimi farklı saçılma uzunlukları için verilmiştir.

Gross-Pitaevskii denklemi bulut yarıçapını hafifçe küçük bulmakla birlikte, Şekil 4.1.'den de görüldüğü gibi bulutun genişleme davranışını, oldukça yüksek parçacık sayılarında bile oldukça iyi açıklamaktadır.

Parçacık başına enerjinin tuzaktaki toplam parçacık sayısı ile değişimi Şekil 4.2.'de farklı saçılma uzunlukları için verilmiştir. Bu şekilden de görüleceği gibi gene seyrek gaz limitine karşılık gelen düşük parçacık sayılarında ve küçük saçılma

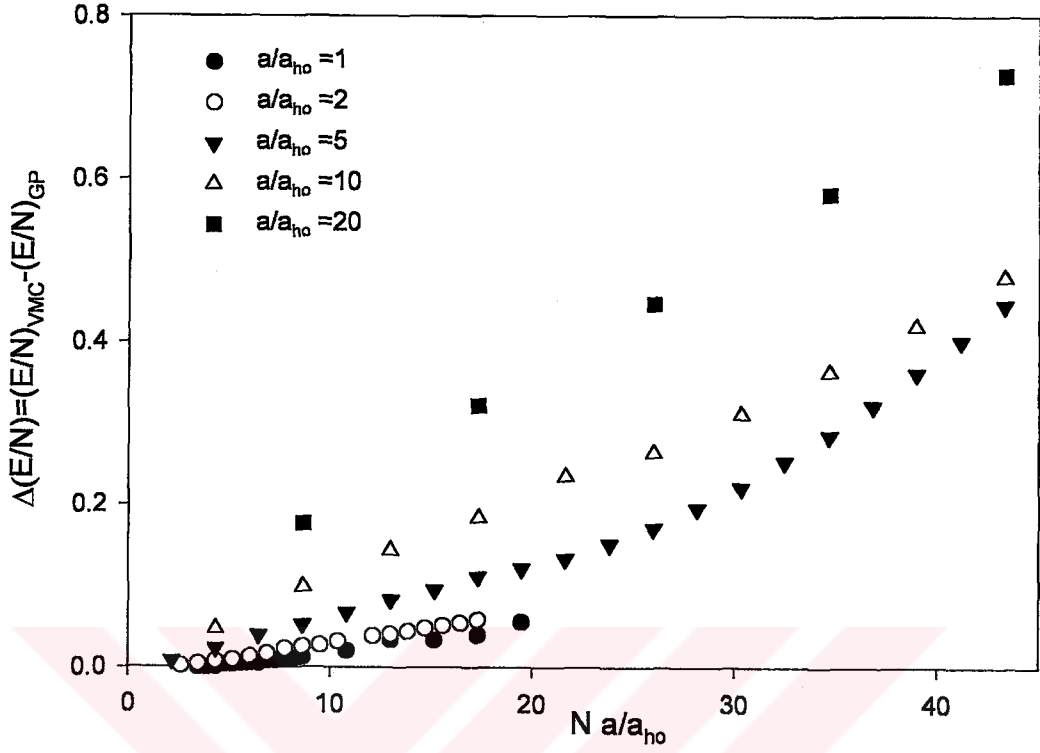


Şekil 4.3. Şek.(a)'da farklı parçacık sayıları için Gross-Pitaevskii denkleminde elde edilen parçacık başına enerjiler Na/a_{ho} 'ya karşılık çizilmiştir. Şek.(b)'de ise VMC yönteminden bulunan parçacık başına enerjiler Na/a_{ho} 'ya karşılık çizilmiştir.

uzunluklarında iyi bir uyum gözlenmektedir. Seyrek gaz limitinden uzaklaştıkça her iki yöntem arasındaki fark artmakta ve Gross-Pitaevskii denklemi parçacık başına enerjiyi hafifçe daha küçük bulmaktadır. Parçacık başına düşen kinetik enerjilerde her iki yöntem arasında büyük bir fark olması beklenmez. Dolayısıyla her iki yöntemden bulunan enerjiler arasındaki fark potansiyel enerjiden kaynaklanmaktadır. Yukarıda Şekil 4.1. hakkında yapılan tartışma hatırlanırsa Gross-Pitaevskii yaklaşımı tuzak potansiyelinin katkısını daha düşük bulurken parçacıklar arası etkileşim potansiyelini daha yüksek bulur. Bu sonuç toplam enerjinin Gross-Pitaevskii denklemiyle daha düşük bulunduğu sonucuyla da birleştirilirse, tuzak potansiyelinin parçacıklar arası etkileşim potansiyelinden daha büyük olduğu sonucuna varırız.

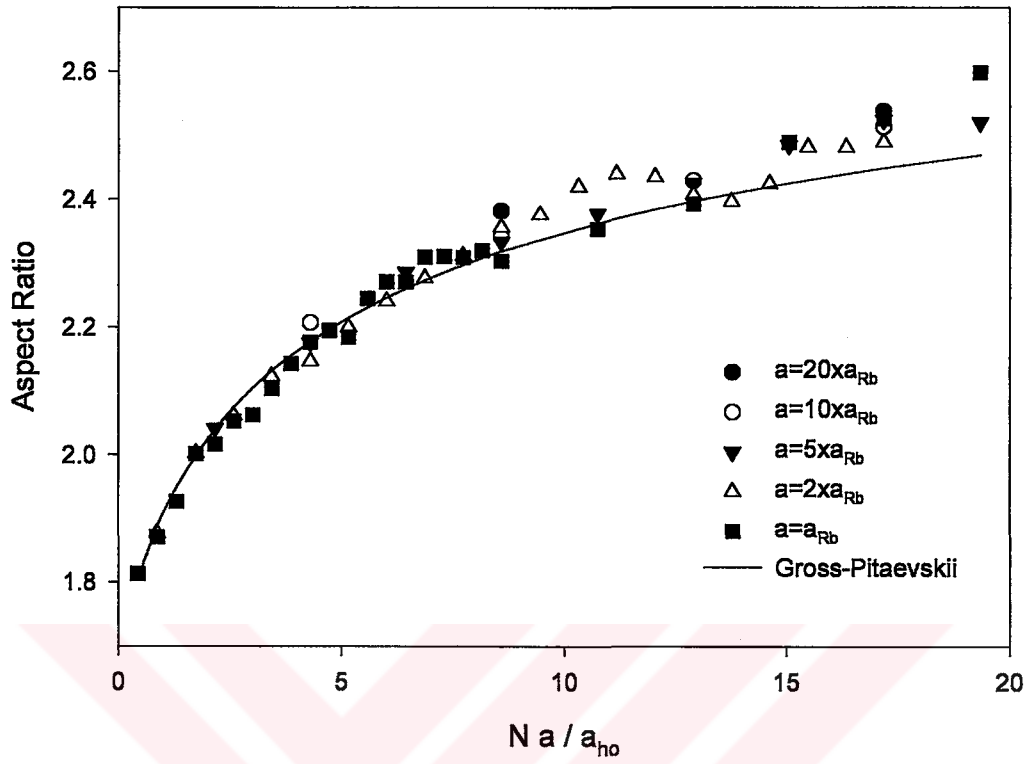
Gross-Pitaevskii denklemi incelendiğinde parçacıklar arası etkileşmelerin katkısının parçacık sayısıyla saçılma uzunluğunun çarpımıyla (Na) orantılı olduğu görülür. Şekil 4.3.a'da farklı parçacık sayıları için Gross-Pitaevskii denkleminde elde edilen parçacık başına enerjiler Na/a_{ho} 'ya karşılık çizilmiştir. Farklı saçılma uzunluklarını temsil eden noktalar farklı şekillerle gösterilmiştir ancak bütün noktaların tek bir eğri üzerinde olduğu açıkça görülmektedir.

Şekil 4.3.b'de ise VMC yönteminden bulunan parçacık başına enerjiler Na/a_{ho} 'ya karşılık çizilmiştir. Burada noktalar tek bir çizgi üzerinde değildir. Ancak saçılma uzunluğunun artışıyla birlikte düzenli bir artış olduğu hissedilmektedir. Bu farkı daha net görebilmek için VMC yönteminden ve Gross-Pitaevskii denkleminde bulunan enerjilerin farkları ($\Delta E = E_{VMC} - E_{GP}$) Şekil 4.4.'te Na/a_{ho} 'ya karşılık çizilmiştir. Farklı saçılma uzunluklarına karşılık gelen değerler farklı şekillerle gösterilmiştir. Şekil 4.4.'ten de açıkça görülebileceği gibi parçacık başına düşen toplam enerji sadece Na çarpımına değil N ve a 'ya ayrı ayrı bağlıdır. Bu ayrılığın sağlanamaması Gross-Pitaevskii yaklaşımının önemli bir eksikliğidir.



Şekil 4.4. VMC yönteminden ve Gross-Pitaevskii denkleminde bulunan enerjilerin farkları ($\Delta E = E_{VMC} - E_{GP}$) Na/a_{ho} 'ya karşılık çizilmiştir.

Son olarak Şekil 4.5'te bulutun radyal ve aksiyel boyutlarının birbirine oranının Na/a_{ho} 'la değişimi verilmiştir. Sürekli çizgi Gross-Pitaevskii denkleminin sonuçlarını göstermektedir. Farklı saçılma uzunluklarına karşılık gelen VMC sonuçları ise farklı şekillere sahip noktalarla gösterilmiştir.



Şekil 4.5. Bulutun radyal ve aksenal boyutlarının birbirine oranının Na/a_{ho} 'la değişimi verilmiştir.

5. SONUÇ ve ÖNERİLER

Bu çalışmada harmonik olarak tuzaklanmış alkali atomların gazlarında gözlenen Bose-Einstein yoğunlaşmasının taban durum özelliklerinin tuzakta bulunan parçacık sayısına ve parçacıklar arası etkileşiminin şiddetine göre değişimi hem Gross-Pitaevskii denklemleri hem de VMC yöntemi kullanılarak incelenmiş ve her iki yöntemden elde edilen sonuçlar karşılaştırılmıştır.

Parçacık sayısının küçük ve parçacıklar arası etkileşimin zayıf olduğu seyrek gaz limitinde her iki yöntem arasında mükemmel bir uyum gözlenmiştir. Ancak seyrek gaz limitinden uzaklaşıldıkça her iki yöntem arasında farklılıklar gözlenmeye başlanmıştır.

Gross-Pitaevskii yaklaşımında etkileşen tuzaklanmış bozonlar için sistemin özellikleri sadece parçacık sayısı ile saçılma uzunluğunun çarpımına bağlı bulunurken, VMC yönteminden bulunan sonuçların bunu doğrulamadığı sistemin özelliklerinin parçacık sayısı ve etkileşim şiddetine ayrı ayrı bağlı olduğu gözlemiştir. Bu sebeple Gross-Pitaevskii denklemine bu doğrultuda bir düzeltme teriminin eklenmesi faydalı olacaktır.

Kullanılan VMC yaklaşımında parçacıklar arası etkileşim potansiyelinin bir katı küre olduğu varsayılmıştır. Daha sonraki çalışmalarda bu potansiyel yerine daha gerçekçi potansiyel modelleri kullanılabilir.

Yapılan çalışmada seyrek gaz limitinden uzaklaşırken VMC yönteminde enerjinin beklenen değerinde yakınsama problemiyle karşılaşmıştır. Bu sorunun parçacık sayısındaki artışla birlikte ortaya çıkan bir sıfır sıcaklık faz geçişinden kaynaklandığını düşünüyoruz. Şu an için bu varsayım tamamen bir spekülasyon olmakla birlikte çalışmalarımızda bu tür faz geçişlerini araştırmayı planlıyoruz.

KAYNAKLAR

- Anderson, M. H., Ensher J. R., Matthews M. R., Wieman C. E., and Cornell, E. A. 1995. Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor. *Science* **269**, 198-201
- Andrews, M. R., Kurn, D. M., Miesner, H. J., Durfee, D. S., Townsend, C. G., Inouye, S. and Ketterle, W. 1997. Observation of interference between two Bose condensates *Science* **275**, 637
- Bardeen, J., Cooper, L. N. and Schrieffer, J. R. 1957. Theory of Superconductivity. *Phys. Rev.* **108**, 1175
- Bogoliubov, N. 1947. On the theory of Superfluidity. *J. Phys. (Moscow)* **11**, 23
- Bose, S. N. 1924. *Z. Phys.* **26**, 178
- Bradley, C. C., Sackett C. A. and Hulet, R. G. 1995. Evidence of Bose-Einstein Condensation in an atomic gas with attractive interactions. *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1687
- Chu, S. 1991. Laser Manipulation of Atoms & Particles. *Science* **253**, 361
- Cohen-Tannoudji, C. and Philips, W. D. 1990. New mechanism for laser cooling. *Physics Today* 33
- Cornell, E. A., Wiemann, C. E. 2002. Nobel Lecture: Bose-Einstein Condensation in a dilute gas, the first 70 years and some recent experiments. *Rev. Mod. Phys.* **74**, 875
- Dalfovo, F. and Stringari, S. 1996. Bosons in anisotropic traps: Ground state and vortices. *Phys. Rev. A* **53**, 2477
- Dalfovo, F. Giorgini S., Pitaevskii L. and Stringari, S. 1999. Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases. *Rev. Mod. Phys.* **71**, 463
- Davis, K. B., Mewes M. D., Andrews M. R., van Druten N. J., Durfee D. S., Kurn D. M. and Ketterle, W. 1995. Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms. *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969
- DuBois, J. L. 2002. Bose-Einstein Condensation in Traps: A quantum Monte Carlo study. Ph.D. Thesis University of Delaware
- DuBois, J. L. and Glyde, H. R. 2001. Bose-Einstein Condensation in trapped bosons: A variational Monte Carlo analysis. *Phys. Rev. A* **63**, 023602
- Edwards, M., Burnett, K. 1995. Numerical solution of the nonlinear Schrödinger equation for small samples of trapped neutral atoms. *Phys. Rev. A* **51**, 1382
- Einstein, A. 1924. Sitzber. Kgl. Preuss. Akad. Wiss. 261
- Einstein, A. 1925. Sitzber. Kgl. Preuss. Akad. Wiss. 3
- Ginzburg, V. L. and Landau, L. D. 1950. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **20**, 1064

- Gross, E. P. 1961. Structure of a quantized vortex in boson systems. *Nuovo Cimento* **20**, 454
- Hansch, T., Schawlow, A. 1975. Cooling of gases by laser radiation. *Opt. Commun.* **13**, 68
- Hess, H. F. 1986. Evaporative cooling of magnetically trapped and compressed spin-polarized hydrogen. *Phys. Rev. B.* **34**, 3476
- Hoofit, G. 2002. Maddenin Son Yapıtaşları (Çeviri). TÜBİTAK Popüler Bilim Kitapları, Ankara.
- Huang, K. 2001. *Introduction to Statistical Physics*. Taylor & Francis, London
- Jastrow, R. 1955. Many-Body Problem with Forces. *Phys. Rev.* **98**, 1479
- Karaoğlu, B. 2004. *Sayısal Fizik*. Seyir Yayıncılık, İstanbul.
- Ketterle, W. 2002. Nobel Lecture: when atoms behave as waves: Bose-Einstein Condensation and the atom laser. *Rev. Mod. Phys.* **74**, 1131
- Ketterle, W., Andrews, M. R., Davis, K. B., Durfee, D. S., Kurn, D. M., Mewes, M.-O. and van Druten, N. J. 1996. Bose-Einstein condensation of ultracold atomic gases. *Physica Scripta* T66, 31-37
- Koonin, S., Meredith, D. 1990. *Computational Physics (FORTRAN Version)* Addison-Wesley
- Krane, K. S. 2001. *Nükleer Fizik I (Çeviri Editörü: Başar Şarer)* Palme Yayıncılık, Ankara.
- Krauth, W. 1996. Quantum Monte Carlo calculations for a large number of bosons in a harmonic trap. *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3695
- London, F. 1938. On the Bose-Einstein condensation. *Phys. Rev.* **54**, 947
- Löwdin, P. O. 1955. *Phys. Rev.* **37**, 1474
- Metropolis, N., Rosenbluth A. E., Rosenbluth M. N., Teller A. H. and Teller, E. 1953. Equation of state calculations by fast computing machines. *J. Chem. Phys.* **21**, 1087
- Minguzzi, A., Succi, S., Toschi, F., Tosi, M. P., Vignolo, P. 2004. Numerical methods for atomic quantum gases with applications to Bose-Einstein condensates and to ultracold fermions. *Physics Reports* 395
- Monroe, C., Swann, W., Robinson, H. and Wieman, C. 1990. Very cold trapped atoms in a vapor cell. *Phys. Rev. Lett.* **65**, 1571
- Onsager, L., Penrose, O. 1956. Bose-Einstein condensation and liquid helium. *Phys. Rev.* **104**, 576
- Pang, T. 1997. *An Introduction to Computational Physics*. Cambridge University Press
- Penrose, O. 1951. *Philos. Mag.* **42**, 1373.
- Pethick, C. J., Smith, H. 2001 *Bose-Einstein Condensation in Dilute gases*, Cambridge University Press.

- Petrich, W., Anderson, M. H., Ensher, J. R. and Cornell, E. A., 1995. Stable, Tightly Confining Magnetic Trap for Evaporative Cooling of Neutral Atoms. *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3352
- Pitaevskii, L. P. 1961. Vortex lines in an imperfect Bose gas. *Zh. Eksp. Teor.Fiz.* **40**, 646 (1961 *Sov. Phys. JETP* **13**, 451)
- Press, W. H., Teukolsky S. A., Vetterling W. T. and Flannery, B. P. 1992. *Numerical Recipes in FORTRAN 77* (2nd. Edition). Cambridge University Press
- Ruprecht, P. A., Holland, M. J., Burnett, K. and Edwards, M. 1995. Time-dependent solution of the nonlinear Schrödinger equation for Bose-condensed trapped neutral atoms. *Phys. Rev. A* **51**, 4704
- Stwalley, W. C. and Nosanov, L. H. 1976. Possible "New" Quantum Systems. *Phys. Rev. Lett.* **36**, 910
- Thijssen, J. M. 1999. *Computational Physics*. Cambridge University Press.

