



T.C.
SELÇUK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

SINIRLANDIRILMIŞ FERMİ GAZININ
FİZİKSEL ÖZELLİKLERİ

MELEK YAĞCILAR

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

Ağustos-2011
KONYA
Her Hakkı Saklıdır

TEZ KABUL VE ONAYI

Melek YAĞCILAR tarafından hazırlanan “**Sınırlandırılmış Fermi Gazının Fiziksel Özellikleri**” adlı tez çalışması 22/08/2011 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oy birliği ile Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı’nda YÜKSEK LİSANS Tezi olarak kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri

Başkan

Prof. Dr. Ülfet ATAV

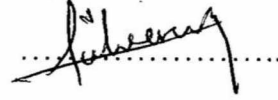

Danışman

Yrd. Doç. Dr. Berna GÜLVEREN

Üye

Yrd. Doç. Dr. İlkay Hilal GÜBBÜK

İmza



Yukarıdaki sonucu onaylarım.

Prof. Dr. Bayram SADE
FBE Müdürü

TEZ BİLDİRİMİ

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

DECLARATION PAGE

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

Melek YAĞCILAR

Tarih:

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ

SINIRLANDIRILMIŞ FERMİ GAZININ FİZİKSEL ÖZELLİKLERİ

Melek YAĞCILAR

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

Danışman: Yrd. Doç. Dr. Berna GÜLVEREN

2011, 67 Sayfa

Jüri

**Yrd. Doç. Dr. Berna GÜLVEREN
Prof. Dr. Ülfet ATAV
Yrd. Doç. Dr. İlkey Hilal GÜBBÜK**

Bu çalışmada, Fermi sisteminin fiziksel özellikleri teorik olarak incelenmiştir. Bu amaçla, ilk olarak serbest (sınırlandırılmamış) gazın ısı sığası basıncı gibi temel özellikleri yüksek sıcaklık ve düşük yoğunluk gibi bazı özel durumlar için açıklanmıştır. Daha sonra n boyutta tuzaklandırılmış Fermi gazının fiziksel özellikleri açıklanmıştır. Thomas-Fermi modeli ve relativistik şekli gösterilmektedir. Kuvvet-kanun potansiyelinde zayıf etkileşen Fermi gazının davranışı, uzaydaki parçacık değişimi ve momentumu incelenmiştir. Sonunda kuvvet kanun potansiyelinde sınırlandırılmış iki boyutlu Fermi sistemi için Thomas-Fermi yaklaşımı kullanılarak hesaplamalar yapılmıştır. Sayısal hesaplamalarda sonlu farklar yöntemi kullanılmıştır. Sistemin fiziksel özelliklerinde sıcaklık değişimi, sınırlandırma şekli, Coulomb etkileşimlerinin etkileri de ele alınmıştır. Thomas-Fermi yaklaşımının etkinliği literatürde bilinen sonuçlar ile karşılaştırılarak kontrol edilmiştir.

Anahtar Kelimeler: Fermi Sistemler, Thomas-Fermi Yaklaşımı

ABSTRACT

M.Sc. THESIS

THERMODYNAMICS PROPERTIES OF CONFINED FERMİ GAS

Melek YAĞCILAR

**The Graduate School of Natural and Applied Science of Selçuk University
The Degree of Master of Science
in Department of Physics**

Advisor: Asst. Prof. Dr. Berna GÜLVEREN

2011, 67 Pages

Jury

Asst. Prof. Dr. Berna GÜLVEREN

Prof. Dr. Ülfet ATAV

Asst. Prof. Dr. İlkay Hilal GÜBBÜK

In this study, the physical properties of fermi systems have been investigated theoretically. For this purpose, firstly some simple properties like pressure, heat capacity of a free(non-confined) gas are described for some special conditions like high temperature and low densities. Then the physical properties of trapped fermi gas in n dimension are explained. The Thomas-Fermi model and it's relativistic form is presented. The behavior of weakly interacting fermi gas in a power law potential and the variation of the particles in the space and their momentums are also described. At last, calculations have been performed by using the Thomas-Fermi approximation for two dimensional fermi system confined in a power law potential. In numerical calculations finite difference method has been used. The effects of Coulomb interactions, type of confinement, variations of temperature on the physical properties of the system have also been discussed. The efficiency of Thomas-Fermi approximation is also checked by comparing known results given in the literature.

Key words: Fermi systems, Thomas- Fermi approximation.

ÖNSÖZ

Bu çalışma, Selçuk Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü öğretim üyelerinden Yrd. Doç. Dr. Berna GÜLVEREN danışmanlığında tamamlanarak, Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü'ne Yüksek Lisans Tezi olarak sunulmuştur.

Yüksek lisans eğitimim süresince çalışmalarımı yönlendiren, bilgi ve tecrübelerini esirgemeyerek gelişmeme yardımcı olan, tez çalışmamın her aşamasında sabır ve hoşgörüsü ile bana destek olan çok değerli hocam ve tez danışmanım Yrd. Doç. Dr. Berna GÜLVEREN' e sonsuz saygı ve şükranlarımı sunarım.

Tez çalışmam süresince yardımcı olan herkese ve öğrenim hayatım boyunca emeği geçen tüm hocalarıma teşekkür ederim.

Ayrıca tez çalışmam süresince de maddi ve manevi birçok fedakarlık göstererek beni destekleyen ve her zaman yanımda olan aileme sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

Melek YAĞCILAR

KONYA-2011

İÇİNDEKİLER

ÖZET	iv
ABSTRACT.....	v
ÖNSÖZ	vi
İÇİNDEKİLER	vii
1. GİRİŞ	1
2. FERMİ SİSTEMLER.....	5
2.1. Giriş.....	5
2.2. İdeal Fermi Gazının Durum Denklemi.....	5
2.3. Yüksek sıcaklık ve düşük yoğunlukta Fermi gazı.....	8
2.4. Düşük sıcaklık ve yüksek yoğunlukta Fermi gazı.....	9
3. HERHANGİ BİR BOYUTTA TUZAKLANDIRILMIŞ İDEAL BİR SİSTEMİN TERMODİNAMİK ÖZELLİKLERİ VE DURUM YOĞUNLUĞU.....	13
3.1. Giriş	13
3.2. İdeal Bir Sistemin Termodinamik Nicelikleri ve Durum Yoğunluğu.....	13
3.3. Dejenere Fermi Gazının Termodinamik Özellikleri.....	17
3.4. Dejenere Olmayan ve Zayıf Dejenere İdeal Sistemlerin Termodinamik Özellikleri.....	18
3.5. Faz Dönüşümü ve Durum Yoğunluğu.....	20
4. SONLU SICAKLIKLARDA RELATİVİSTİK THOMAS-FERMİ MODELİ.22	
4.1. Giriş.....	22
4.2. Klasik Thomas-Fermi Modeli.....	22
4.3. Sıcaklığa Bağlı Relativistik olmayan Model.....	24
4.4. $T=0'$ da Relativistik Model.....	25
4.5. Sıcaklığa Bağlı Relativistik Model.....	27
5. KUVVET-KANUN POTANSİYELİNDE TUZAKLANDIRILMIŞ ZAYIF ETKİLEŞEN FERMİ GAZININ DÜŞÜK SICAKLIKLARDA DAVRANIŞI.....	29
5.1. Giriş.....	29
5.2. Teoriksel Değerlendirme.....	29
6. BİR DIŞ POTANSİYELDE TUZAKLANDIRILMIŞ ZAYIF ETKİLEŞEN FERMİ GAZININ UZAY VE MOMENTUM DAĞILIMI.....	38
6.1. Giriş.....	38
6.2. $T=0K$ Durumunda Fermi Gazın Uzay ve Momentum Dağılımı.....	38
6.3. $T \neq 0K$ Durumunda Fermi gazın Uzay ve Momentum Dağılımı.....	43

7. $V(r)$ POTANSİYELİNDE SINIRLANDIRILMIŞ ELEKTRON GAZININ TABAN DURUM ÖZELLİKLERİ.....	61
7.1. Giriş.....	47
7.2. Teori.....	47
SONUÇ VE ÖNERİLER.....	60
KAYNAKLAR.....	62
ÖZGEÇMİŞ	67

1. GİRİŞ

Son yıllarda, atomları tuzaklama ve soğutma tekniklerinin gelişmesi sonucunda 1995 yılında Bose-Einstein yoğunlaşması deneysel olarak gözlenmiştir. Bu, tüm fizik dünyasında sansasyona yol açmıştır. Dış potansiyelin, dejenere atomik gazları kontrol etmek ve onların performansını nicel olarak incelemek için elverişli koşullar yarattığı söylenebilir. Bose gazından farklı olarak, ideal Fermi gazı, dış potansiyellerin kısıtlı koşulları altında ve çok düşük sıcaklıklarda, faz geçişine maruz kalmaz. Bununla beraber, doğal dünyadaki iki tip kuantum sisteminin birisi olarak, Fermi gazı, çok düşük sıcaklıklarda ve fermiyonların Fermi çiftleri oluşturabileceği uygun koşullar altında bazı eşsiz kuantum karakteristikleri göstermektedir ve bir Bose sistemi oluşturmaktadır. Bu nedenle, Fermi gazının karakteristik özelliklerini dış potansiyellerde incelemek önemlidir.

Fermi sistemlerini farklı boyutlarda sınırlandırarak incelemek, kuantum istatistiksel olarak analiz etme imkânını sağlar. Örneğin, Hore ve Frankerl (2003) zayıf bir manyetik alan içinde iki ve üç boyutta sınırlandırılmış fermiyon gazını incelemiştir. Yan (2006), termodinamik özellikler ve sınırlandırma biçiminin Fermi sistemlerinin parçacık dağılımını nasıl değiştirdiği üzerinde çalışmıştır.

Atomik gazlar için dış potansiyelin sınırlandırma çeşidi, gazların davranışını değiştirebilir. Birçok durumda, harmonik olarak sınırlandırılmış olan Fermi sistemi, gerçek sistemleri modellemek için iyi bir yaklaşımdır. Örneğin Van Zyl (1990), n boyutlu uzayda harmonik olarak sınırlandırılmış Fermi sistemi için analitik bir ifade ortaya koymuştur. Harmonik bir potansiyelde hapsedilmiş birbiriyle etkileşmeyen iki Fermi gazının sıcaklık davranışı Köhl (1991) tarafından analiz edilmiştir. Yoshimoto ve Kurihara (2003), keyfi boyutlarda izotropik harmonik bir tuzaktaki etkileşen Fermi gazının normal durum özelliklerini incelemiştir. Kimyasal potansiyel ve taban durum enerjisindeki birinci dereceden pertürbasyon terimini tam olarak hesaplamışlardır. Kimyasal potansiyel ve toplam enerjinin basit analitik ifadelerini elde etmiştir.

Birçok durumda, elektronlar ideal Fermi gazı gibi ele alınmıştır. Sözgelimi, harmonik bir potansiyel içinde hapsedilmiş olan birbiriyle etkileşmeyen Fermi gazının termodinamik özellikleri, parçacık sayısı etkilerini göz önüne almak suretiyle, Su

(1998) tarafından incelenmiştir. Herhangi bir boyutta kuvvet yasası potansiyeli ($u = br^l$) içinde hapsedilen, ideal Fermi gazının toplam parçacık sayısı, kimyasal potansiyeli ve ısı sığası gibi özellikleri, T-F yöntemini kullanarak incelemiştir. Bu çalışmada, yazar, çoğunlukla, kimyasal potansiyelin ve ısı sığasının davranışı üzerinde durmuştur.

Sınırlandırılmış Fermi gazının termodinamik özelliklerini incelemek oldukça ilgi çekici olmuştur. Su ve Men (2003), zayıf etkileşen Fermi gazları için termodinamik nicelikleri analitik olarak ifade etmişlerdir. Su, kuvvet-yasası potansiyelinde tuzaklandırılmış zayıf etkileşen Fermi gazının düşük sıcaklıktaki davranışını, bölgesel yoğunluk yaklaşımına (LDA) ve sözde hacim metoduna dayanarak incelemiştir. Kimyasal potansiyel, toplam enerji, entropi ve ısı sığası olmak üzere birkaç termodinamik niceliklerin ifadelerini analitik olarak türetmiştir. Parçacıklar arasındaki etkileşimleri göz önünde bulundurarak termodinamik niceliklere düzeltme terimleri getirmişlerdir. Men (2006), zayıf manyetik alan içinde zayıf olarak etkileşen Fermi gazı için küçük r parametresinin ısı sığası, kimyasal potansiyel ve iç enerjisinin analitiksel ifadeleri topluluk teorisi ve sözde potansiyel metodu kullanarak türetmiştir. Türetilen ifadelerle dayanarak yüksek ve düşük sıcaklıklarda zayıf manyetik alan içerisinde zayıf olarak etkileşen Fermi gazının termodinamik özelliklerini vermiştir. Parçacıklar arası etkileşimlerin ve manyetik alanın termodinamik özelliklere etkileri tartışılmıştır. Manyetik tuzak ve üç boyutlu harmonik tuzağın farklılıklarının sistemin özellikleri üzerine etkileri ve bu etkilerin sebeplerini incelemiştir. n boyutlu uzayda yine genel bir kuvvet-yasası potansiyelinde tuzaklanmış ideal gaz sisteminin termodinamik özellikleri ve durum yoğunluğu Yan (1999) tarafından incelenmiştir. Sami M. Al-Jaber (1999), ise D -boyutlu uzayda Fermi gazını ele alıp sistemin fiziksel özelliklerinin D -boyutunun bir fonksiyonu olarak nasıl davrandığını göstermiştir. Özellikle durum yoğunluğu, Fermi enerjisi ve Fermi küresinin yarıçapı göz önüne alınmıştır. Harmonik osilatör potansiyellerindeki Fermi gazı için Yi ve Su (1999), Büyük kanonik istatistiğinin geçerliliğini varsayarak, harmonik olarak tuzaklandırılmış kutuplanmış spinli fermi gazının özelliklerini incelemiştir. Tuzaklandırılmış Fermi gazının parçacık başına ısı sığası, iç enerjisi U , Fermi sıcaklığı T_F evrensel biçimlerde parçacık sayısının bir fonksiyonu olarak hesaplanmış ve sonuçlar sonsuz sayıda parçacık durumundaki sonuçlar ile karşılaştırmıştır. Toms (2005) ise hapsedici harmonik osilatör potansiyelindeki ideal bir fermiyon gazının termodinamik özelliklerini incelemiştir. Bu problemle Haas-van Alphen etkisi arasındaki paralellik tartışılmış ve hem izotropik hem

de izotropik olmayan potansiyelerde kimyasal potansiyel ve ısı sığası için analitik sonuçlar elde etmede kullanmıştır. İlk defa sayısal çalışmalarda gözlemlenen kimyasal potansiyelin merdiven benzeri davranışı analitik olarak elde edip parçacık sayısı değiştirildiğinde bunun ısı sığasının salınım yapmasına yol açtığını göstermiştir. Bu salınımların kökeni termodinamik potansiyelin bir kısmının Haas-van Alphen etkisinden sorumlu olmasıdır. Düşük sıcaklıklarda ısı sığasında beklenen doğrusal sıcaklık bağımlılığından, yine termodinamik potansiyelin Haas-van Alphen kısmından kaynaklanan, ciddi miktarda sapmalar olduğunu analitik olarak göstermiştir. Sonuçları bir, iki ve üç uzay boyutu için vermiştir. İzotropik olmayan durumda salıngaç sıklıklarının oranı değiştikçe ısı sığasının nasıl atlamalar yaptığını göstermiştir.

Thomas-Fermi (T-F) modeli, doğrudan elektrik potansiyelini elektron yoğunluğu ile ilişkilendirerek Fermi gazının fiziksel özelliklerinin araştırılmasını sağlar. T-F yöntemi, orijinalinde elektronlar ile termal etkiler arasındaki değişim kuvvetlerini hesaba katmaz. Ancak, zaman içinde modele gelen ek terimler sebebiyle değiş tokuş ve korelasyon etkileri de göz önünde bulundurulurken daha düşük parçacıklı sistemler incelenebilmektedir. Bu anlamda yoğunluk fonksiyonel teoreminin temelini oluşturmaktadır. Yöntem, yıllardır atomlar ve iyonlar gibi Fermi sistemlerini analiz etmek için kullanılmaktadır (Lieb, 1981; Pino, 1998; Sinha, 2000). Son yıllarda yöntemin nanoyapılara da uygulamaları söz konusudur (Puente ve ark., 2000; Gülveren ve ark., 2005, 2009,2010; Su ve ark., 2003; Bethe ve ark., 1940). Örneğin, kuantum nokta yapılar gibi.

Literatürdeki birçok makaledeki T-F çözümleri, Fermi-Dirac dağılım fonksiyonunun seri açılımından faydalanılabilmesi sebebiyle düşük ve yüksek sıcaklıklarla sınırlıdır (Su ve ark., 2004). Aynı zamanda, bazı durumlarda problem, sıfır sıcaklığa gelen pertübasyonlar olarak ele alınmıştır (Li ve ark., 1998). Schneider ve Wallis (1998) harmonik potansiyelde sınırlandırılmış oldukça soğutulmuş atomları mesoskopik yaklaşımlar kullanarak sistemi Fermi gazı gibi ele almış ve termodinamik özelliklerini incelemiştir. Kimyasal potansiyel, ısı sığası ve yoğunluk dağılımının sıcaklık ve parçacık sayısına bağıllığı elde etmiştir. İzotropik ve izotropik olmayan tuzakları karşılaştırmıştır. Olası deneysel durumları tartışılmıştır. Butts ve ark. (1997), ise Thomas-Fermi yaklaşımı kullanarak harmonik olarak tuzaklandırılmış spin-polarize Fermi gazının özellikleri üzerinde çalışmışlardır. Uzaysal ve momentum dağılımlarının genel biçimleri hesaplanmış ve sonuçlar seyretilmiş bose gazının ilgili özellikleri ile

karşılaştırılmışlardır. Fan (2010), genel bir dış potansiyelde tuzaklandırılmış Fermi gazının termodinamik niceliklerine dayanarak kuantum istatistiği ve sayısal benzetmeler kullanılarak, relativistik Fermi sisteminin ısı sığası ve enerjisinin analitik ifadelerini veren ve enerji ve ısı kapasitesi üzerinde relativistik etkisi incelenen sert bir küre içinde tuzaklandırılmış Fermi gazının termodinamik özelliklerini ele almıştır. Sonuçlar relativistik Fermi sisteminin ısı sığası ve enerjisinin relativistik olmayan durumdan daha büyük olduğunu göstermiştir.

Bu tez çalışmasındaki asıl amaç sınırlandırılmış Fermi gazının fiziksel özelliklerini teorik olarak araştırılması ve incelenmesidir. İkinci bölümde, ilk olarak fermiyonlar ve bozonların temel özelliklerinden bahsedilmiş ve dağılım fonksiyonları gösterilmiştir. Üçüncü bölümde, ideal Fermi gazının termo-istatistiksel özellikleri incelenmiştir. Büyük kanonik dağılım yardımıyla ideal Fermi gazının düşük ve yüksek sıcaklıktaki davranışı ele alınmıştır. Dördüncü bölümde n-boyutlu uzayda tuzaklandırılmış ideal bir Fermi sisteminin termodinamik özellikleri incelenmiştir. Durum yoğunluğu için genel ifadeler türetilmiştir. Beşinci bölümde sonlu sıcaklıklarda relativistik Thomas-Fermi modelinin sıcaklığa bağlı ifadelerinden bahsedilmiştir. Altıncı bölümde Kuvvet-kanun potansiyelinde tuzaklandırılmış zayıf etkileşen Fermi gazının düşük sıcaklıkta davranışı incelenmiştir. Zayıf etkileşen Fermi gazı için önemli bazı termodinamik niceliklerin analitik ifadeleri türetilmiştir. Yedinci bölümde dış potansiyelde tuzaklandırılmış Fermi gazının uzay ve momentum dağılımı incelenmiştir. Son bölümde ise $v(r)$ potansiyelinde sınırlandırılmış Fermi gazının taban durum ve termodinamik özellikleri etkileşen ve etkileşmeyen sistemler için tartışılmıştır.

2. FERMİ SİSTEMLER

2.1. Giriş

Bu bölümde fermiyon sistemlerinin fiziksel özellikleri yüksek sıcaklık, düşük yoğunluk; düşük sıcaklık, yüksek yoğunluk gibi durumlarda incelenecektir.

2.2. İdeal Fermi Gazının Durum Denklemi

Spinsiz ideal Fermi gazının durum denklemi,

$$\frac{\lambda^3}{v} = f_{3/2}(z) \quad (2.1)$$

Eşitliği cinsinden ifade edilebilir. Burada $v = V/N$, $\lambda = \sqrt{2\pi\hbar^2/mkT}$ ısı dalgı boyudur ve $f_{3/2}(z)$ Fermi-Dirac fonksiyonudur;

$$f_{3/2}(z) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dx \frac{x^2}{z^{-1}e^{x^2} + 1} \quad (2.2)$$

İfadesinden faydalanılarak küçük z değeri için kuvvet serisi açılımı,

$$f_{3/2}(z) = z - \frac{z^2}{2^{3/2}} + \frac{z^3}{3^{3/2}} - \frac{z^4}{4^{3/2}} + \dots \quad (2.3)$$

ve büyük z değeri için Sommerfeld metoduyla asimptotik bir açılım yapılabilir.

$$y = \log z = \frac{\mu}{kT} \quad (2.4)$$

eşitliği kullanılarak $f_{3/2}(z)$ fonksiyonu

$$f_{3/2}(z) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dx \frac{x^2}{e^{x^2-v} + 1} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dy \frac{\sqrt{y}}{e^{y-v} + 1} = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dy \frac{y^{3/2} e^{y-v}}{(e^{y-v} + 1)^2} \quad (2.5)$$

şeklinde yazılabilir. Kısmi integrasyon yolu ile $y^{3/2}$ terimi v civarında Taylor serisine açılması sonucu $f_{3/2}(z)$ fonksiyonu

$$\begin{aligned} f_{3/2}(z) &= \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dy \frac{e^{y-v}}{(e^{y-v} + 1)^2} \times \left[v^{3/2} + \frac{3}{2} v^{1/2}(y-v) + \frac{3}{8} v^{-1/2}(y-v)^2 + \dots \right] \\ &= \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_{-v}^{\infty} dt \frac{e^t}{(e^t + 1)^2} \left(v^{3/2} + \frac{3}{2} v^{1/2}t + \frac{3}{8} v^{-1/2}t^2 + \dots \right) \end{aligned} \quad (2.6)$$

şeklinde yazılabilir.

Bu integral,

$$\int_{-v}^{\infty} = \int_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{-v},$$

şeklinde yazılır.

İkinci integral e^{-v} nin mertebesidir. Böylece $f_{3/2}(z)$ integrali

$$\begin{aligned} f_{3/2}(z) &= \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \frac{e^t}{(e^t + 1)^2} \left(v^{3/2} + \frac{3}{2} v^{1/2}t + \frac{3}{8} v^{-1/2}t^2 + \dots \right) + O(e^{-v}) \\ &= \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left(I_0 v^{3/2} + \frac{3}{2} I_1 v^{1/2} + \frac{3}{8} I_2 v^{-1/2}t^2 + \dots \right) + O(e^{-v}) \end{aligned} \quad (2.7)$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada I_n integrali aşağıdaki gibi tanımlanabilir:

$$I_n \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} dt \frac{t^n e^t}{(e^t + 1)^2} \quad (2.8)$$

t^n faktöründen başka integre edilmiş t 'nin çift bir fonksiyonudur. Bundan dolayı tek n için $I_n = 0$ dır. $n = 0$ için I_0 integrali aşağıdaki gibi bulunur:

$$I_0 = -2 \int_0^{\infty} dt \frac{d}{dt} \frac{1}{(e^t + 1)} = 1 \quad (2.9)$$

$n > 0$ değerleri için I_n integralinin çözümü aşağıdaki gibidir:

$$\begin{aligned} I_n &= -2 \left[\frac{\partial}{\partial \lambda} \int_0^{\infty} dt \frac{t^{n-1}}{e^{\lambda t} + 1} \right]_{\lambda=1} = 2n \int_0^{\infty} du \frac{u^{n-1}}{e^u + 1} \\ &= (n-1)! (2n)(1 - 2^{1-n}) \xi(n) \end{aligned} \quad (2.10)$$

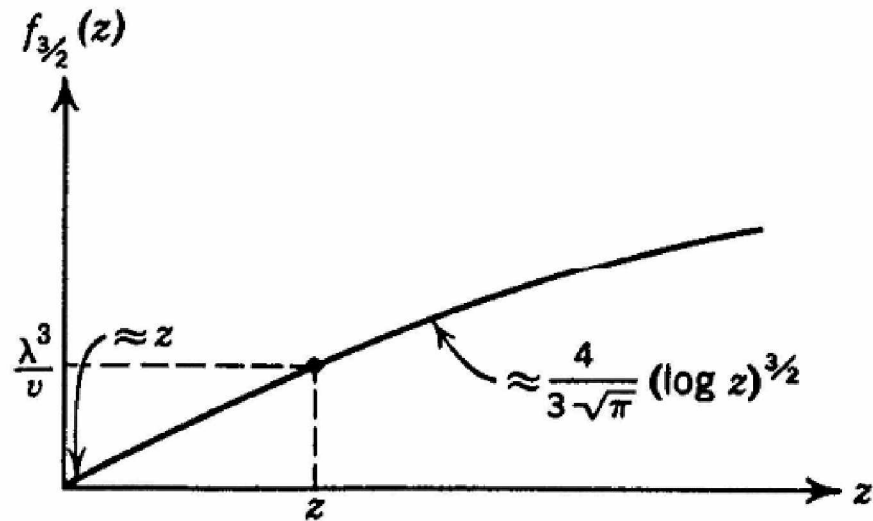
Burada $\xi(n)$ Riemann zeta fonksiyonudur ve farklı n değerleri için aşağıdaki değerleri alır:

$$\xi(2) = \frac{\pi^2}{6}, \quad \xi(4) = \frac{\pi^4}{90}, \quad \xi(6) = \frac{\pi^6}{945}$$

Böylece $f_{3/2}(z)$ fonksiyonu,

$$f_{3/2}(z) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left[(\log z)^{3/2} + \frac{\pi^2}{8} (\log z)^{-1/2} + \dots \right] + O(z^{-1}) \quad (2.11)$$

şeklinde yazılabilir.



Şekil 2.1. $f_{3/2}(z)$ fonksiyonunun z değerlerine bağlı değişimi (Huang,1987)

$f_{3/2}(z)$ fonksiyonunun z ile değişimi şekil 2.1 de gösterilmiştir. λ^3/v ifadesinin herhangi bir pozitif değeri için (2.1) denklemi ile belirlenen z 'nin değeri grafikteki gibi okunabilir. λ^3/v değerinin artmasıyla beraber z değeri düzenli bir şekilde artmaktadır. v sabit tutulduğu için z , sıcaklık azaldıkça düzgün bir şekilde artar.

2.3. Yüksek sıcaklık ve düşük yoğunlukta Fermi gazı

$(\lambda^3/v) \ll 1$ durumunda, parçacıklar arasındaki ortalama uzaklık ($v^{1/3}$), λ ısı dalga boyundan çok daha büyüktür. Bu durumda, parçacıklar arasındaki kuantum etkisi ihmal edilebilir. (2.1) ve (2.3) denklemlerinden yararlanılarak

$$\frac{\lambda^3}{v} = z - \frac{z^2}{2^{3/2}} + \dots$$

bağıntısı elde edilir. Bu eşitlik aşağıdaki bağıntının verilmesiyle çözülebilir:

$$z = \frac{\lambda^3}{v} = \frac{1}{2^{3/2}} \left(\frac{\lambda^3}{v} \right)^2 + \dots \quad (2.12)$$

Böylece $\lambda^3 \rightarrow 0$ ($T \rightarrow \infty$) limitinde z değeri, Boltzmann gazının z değerine indirgenmiş olur. Ortalama işgal sayısı,

$$\langle n_p \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{N=0}^{\infty} Z^N \sum_{(n_p)} n_p e^{-\beta \sum \varepsilon_p n_p} = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_p} \log Z = \frac{z e^{-\beta \varepsilon_p}}{1 \mp z e^{-\beta \varepsilon_p}}$$

Maxwell-Boltzmann gazı formuna aşağıdaki şekilde indirgenir:

$$\langle n_p \rangle \approx \frac{\lambda^3}{v} e^{-\beta \varepsilon_p} \quad (2.13)$$

Bu yaklaşım sonucunda durum denkleminin aşağıdaki şekli alır:

$$\frac{Pv}{kT} = \frac{v}{\lambda^3} \left(z - \frac{z^2}{2^{5/2}} + \dots \right) = 1 + \frac{1}{2^{5/2}} \frac{\lambda^3}{v} + \dots \quad (2.14)$$

Bu denklem virial açılımı formundadır. Klasik ideal gaz yasasındaki düzeltmeler moleküller arası etkileşimlerden dolayı değildir fakat kuantum etkisinden dolayıdır. Yukarıdaki seride ikinci virial katsayısı aşağıdaki gibidir:

$$\frac{\lambda^3}{2^{5/2}} = \frac{1}{2} \left(\frac{\pi \hbar^2}{mkT} \right)^{3/2} \quad (2.15)$$

2.4. Düşük sıcaklık ve yüksek yoğunlukta Fermi gazı

$(\lambda^3/v) \gg 1$ durumunda, sistemdeki bir parçacığın de Broglie dalga boyu, parçacıklar arası ortalama uzaklıktan çok daha büyüktür. Bundan dolayı kuantum etkisi ve özellikle Pauli dışarlama ilkesinin etkisi çok fazladır.

Mutlak sıfır civarında (2.1) ve (2.11) denklemlerinden yararlanılarak

$$\frac{1}{v} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mkT} \right)^{3/2} \approx \frac{4}{3\sqrt{\pi}} (\log z)^{3/2} \quad (2.16)$$

eşitliği elde edilir. Buradan hareketle

$$z \approx e^{\beta\varepsilon_F} \quad (2.17)$$

şeklinde tanımlanabilir. Burada mutlak sıcaklıkta kimyasal potansiyel Fermi enerjisi olarak isimlendirilir ve ε_F simgesi ile gösterilir:

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{6\pi^2}{v} \right)^{2/3} \quad (2.18)$$

Mutlak sıfır civarında ortalama parçacık sayısı ise

$$\langle n_p \rangle \approx \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_p - \varepsilon_F)} + 1} \quad (2.19)$$

şeklinde ifade edilir.

$T \rightarrow 0$ ($\beta \rightarrow \infty$) durumunda, eğer $\varepsilon_p < \varepsilon_F$ ise paydadaki üstel terim kaybolur. Yani $\langle n_p \rangle = 1$ dir. Eğer $\varepsilon_p > \varepsilon_F$ ise $\langle n_p \rangle = 0$ dır. Böylece ortalama parçacık sayısı,

$$\langle n_p \rangle_{T=0} = \begin{cases} 1 & (\varepsilon_p < \varepsilon_F) \\ 0 & (\varepsilon_p > \varepsilon_F) \end{cases} \quad (2.20)$$

şeklinde ifade edilebilir. Bu bağıntının fiziksel anlamı çok açıktır. Pauli dışarlama ilkesinden dolayı aynı kuantum enerji durumunda iki parçacık bulunamaz. Bu yüzden sistemin taban durumunda parçacıklar olası en düşük enerji seviyesinde bulunurlar ve sonlu enerji seviyelerinin yukarı seviyelerini doldururlar. Böylece ε_F , N tam durumu

olan tek parçacık enerji seviyesidir. Momentum uzayında parçacıklar p_F yarıçaplı bir küreyi doldururlar. Bu kürenin yüzeyine Fermi yüzeyi denir.

Fermi enerjisi daha genel şartlar altında bağımsız olarak hesaplanabilir. Tüm tek parçacık enerji seviyelerinin g -kat dejenere olduğunu farz edelim. Örneğin s spinli parçacık için $g=2s+1$ olur. Bu şartlar altında, toplam parçacık sayısı aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$g \sum_p \langle n_p \rangle_{T=0} = N \quad (2.21)$$

Bu bakış açısıyla (2.20) eşitliğinden, Fermi enerjisi altında N tane enerji durumu olduğu söylenebilir. $\varepsilon_F = p_F^2/2m$ eşitliği yerine konularak

$$\frac{g}{(2\pi\hbar)^3} \frac{4\pi}{3} p_F^3 = \frac{N}{V} \quad (2.22)$$

eşitliği bulunur.

Buradan çakışıklık sayısının $g=1$ olduğu durumda Fermi enerjisi aşağıdaki şekilde elde edilir:

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{6\pi^2}{gV} \right)^{2/3} \quad (2.23)$$

Ayrıca (2.21) eşitliği aşağıdaki gibi yorumlanabilir. Farklı kuantum numaralı parçacıklar, onların durumlarındaki iç değişimlerle ilgili olarak, herhangi bir simetri tarafından zorlanmazlar.

Düşük sıcaklıklar ve yüksek yoğunluklarda, kimyasal potansiyel için termodinamik fonksiyonları elde etmek için ilk olarak (2.1) ve (2.11) denklemlerinden aşağıdaki seri açılım elde edilir:

$$kT \log z = kT \log Z = \varepsilon_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\varepsilon_F} \right)^2 + \dots \right] \quad (2.24)$$

Burada (kT/ε_F) seri açılım parametresidir. Fermi sıcaklığı olan T_F ,

$$kT_F \equiv \varepsilon_F \quad (2.25)$$

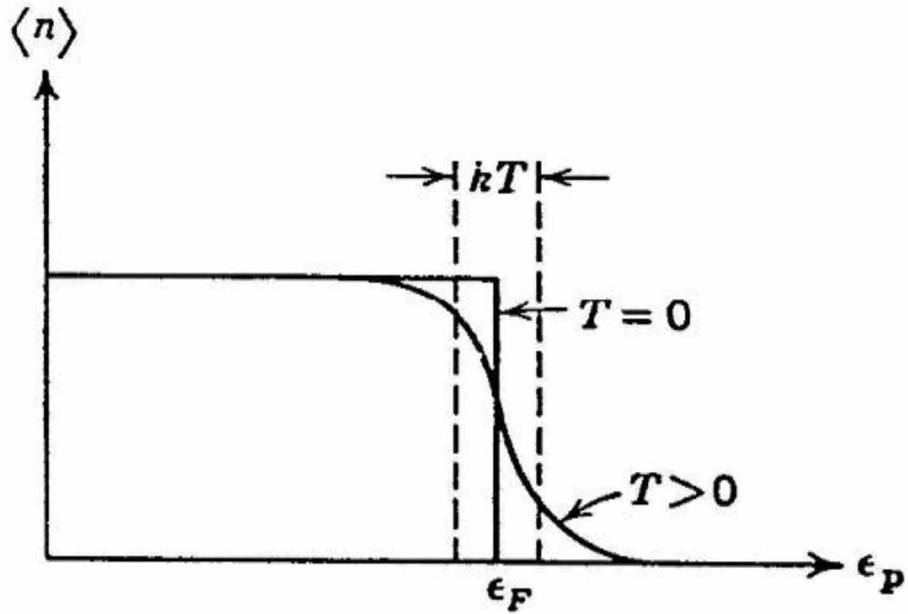
ifadesi ile yoğunluk fonksiyonu olarak tanımlanır.

Düşük sıcaklık ve yüksek yoğunluklarda, yani $T \ll T_F$ limit durumundaki gaz için çakışık (dejenere) olduğu söylenebilir. Çünkü parçacıklar düşük enerji seviyelerine geçme eğilimi gösterirler. Bu nedenle T_F Fermi sıcaklığı dejenere sıcaklık olarak da adlandırılır.

Ortalama parçacık sayısı aşağıdaki gibi olur:

$$\langle n_p \rangle = \frac{1}{e^{\beta \epsilon_p - \nu} + 1} \quad (2.26)$$

Buradaki ν ifadesi (2.24) denkleminde verilmiştir.



Şekil 2.2. İdeal Fermi gazında ortalama parçacık sayısı (Huang, 1987)

$\epsilon_p = p^2/2m$ olduğunda n_p , p^2 den dolayı sadece p 'ye bağlıdır. n_p 'nin grafiği şekil 2.2'de gösterilmiştir.

İç enerji,

$$U = \sum_p \epsilon_p \langle n_p \rangle = \frac{V}{\hbar^3} \frac{4\pi}{2m} \int_0^\infty dp p^4 \langle n_p \rangle$$

ifadesi ile gösterilir. Kısmi integralden sonra aşağıdaki ifade elde edilir:

$$U = \frac{V}{4\pi^2 m \hbar^3} \int_0^\infty dp \frac{p^5}{5} \left(-\frac{\partial}{\partial p} \langle n_p \rangle \right) = \frac{\beta V}{20\pi^2 m^2 \hbar^3} \int_0^\infty dp \frac{p^6}{(e^{\beta \varepsilon_p - \nu} + 1)^2} \quad (2.27)$$

Şekil 2.2'den $\partial \langle n_p \rangle / \partial p$ ifadesinin $p = p_F$ de keskin olarak tepe noktasına ulaştığı görülmektedir. Gerçekte mutlak sıfırda $p = p_F$ de δ fonksiyonudur. Böylece (2.27) denklemindeki integral p^6 faktörünün açılmasıyla hesaplanabilir. Yöntem elde edilen (2.11) denklemindeki kullanılan yöntem ile aynıdır. (2.24) denkleminde ν eklendikten sonra aşağıdaki asimptotik açılım elde edilir:

$$U = \frac{3}{5} N \varepsilon_F \left[1 + \frac{5}{12} \pi^2 \left(\frac{kT}{\varepsilon_F} \right)^2 + \dots \right] \quad (2.28)$$

İlk terim verilen yoğunluktaki Fermi gazının taban durum enerjisidir. Aşağıdaki verilen ifade ile doğrulanabilir:

$$\sum_{|p| < p_F} \frac{p^2}{2m} = \frac{3}{5} N \varepsilon_F \quad (2.29)$$

Sabit hacimde ısı sığası (2.28) denkleminde doğrudan elde edilebilir:

$$\frac{C_v}{Nk} \approx \frac{\pi^2 kT}{2 \varepsilon_F} \quad (2.30)$$

Burada C_v , $T \rightarrow 0$ gittikçe doğrusal olarak sıfıra gider. Bu da termodinamiğin üçüncü yasasını sağlamaktadır. $T \rightarrow \infty$ giderken C_v/Nk değeri $3/2$ değerine yaklaşır. $T > 0$ sıcaklığında $\langle n_p \rangle$, $T = 0$ sıcaklığından farklılık gösterir. Çünkü parçacık sayısı $\varepsilon_p > \varepsilon_F$ enerji seviyelerine uyarılmıştır. Kabaca söylemek gerekirse, ε_F seviyesi altında kT enerjili parçacıklar, ε_F seviyesi üzerine kT enerjilerine uyarılır. Böylece parçacık sayısı $(kT/\varepsilon_F)N$ mertebesine uyarılır. Böylece taban durumu üzerinde uyarılmış toplam enerji, $C_v \approx (kT/\varepsilon_F)Nk$ ifadesinden yola çıkılarak $\Delta U \approx (kT/\varepsilon_F)NkT$ şeklinde ifade edilebilir.

3. HERHANGİ BİR BOYUTTA TUZAKLANDIRILMIŞ İDEAL BİR SİSTEMİN TERMODİNAMİK ÖZELLİKLERİ VE DURUM YOĞUNLUĞU

3.1. Giriş

Bu bölümde, n-boyutlu uzayda genel kuvvet-kanun potansiyelinde tuzaklandırılmış ideal bir gaz düşünülmüştür. Durum yoğunluğu için genel ifadeler türetilmiştir. Sistemin büyük potansiyelinden başlayarak dejenere ve dejenere olmayan fermi sistemlerin termodinamik özellikleri için birleştirilmiş ifadeleri verilmiştir (Yan ve ark., 1999).

Bu bölüm aşağıdaki gibi organize edilmiştir. Bölüm 3.2 de ideal bir sistemin büyük potansiyeli ve durum yoğunluklarının genel ifadeleri türetilmiştir. Sistemin termodinamik nicelikleri büyük potansiyelin terimleri içinde verilmiştir. Bölüm 3.3'te dejenere Fermi sistemlerin termodinamik özellikleri analiz edilmiştir. Bölüm 3.4'te zayıf dejenere ve dejenere olmayan sistemlerin termodinamik özellikleri yukarıdaki sonuçlardan basitçe türetilmiştir. Bölüm 3.5'te faz dönüşümü ve durum yoğunluğu arasındaki ilişki saptanmıştır.

3.2. İdeal Bir Sistemin Termodinamik Nicelikleri ve Durum Yoğunluğu

$$H = \varepsilon_0 \left(\frac{p}{p_0} \right)^s + \sum_{i=1}^n U_i \left| \frac{r_i}{L_j} \right|^{t_i} \quad (3.1)$$

(3.1) eşitliğindeki gibi tek parçacık Hamiltonian ile n boyutlu uzayda genel kuvvet-kanunu potansiyelinde tuzaklandırılmış ideal bir sistem düşünelim; Burada ε_0 , p_0 , U_i , L_j ve t_i hepsi pozitif sabitlerdir ve p momentum, r_i ise parçacığın koordinat bileşenleridir.

Sistemin parçacık sayıları çok büyük ve bir tuzak içindeki parçacıkların potansiyel enerjileri, kinetik enerjilerinden çok küçük olduğunda Thomas-Fermi yaklaşımı geçerlidir (Chou ve ark., 1996). Böylece kuantum durumları üzerinden

toplamlar faz uzayındaki integraller ile yer değiştirebilir. $H \leq \varepsilon$ için kuantum durumlarının toplam sayısı,

$$\sum(\varepsilon) = \frac{g}{h^n} \int_{H \leq \varepsilon} \prod_{i=1}^n (dr_i dp_i) \quad (3.2)$$

eşitlik (3.2)'de ki gibi ifade edilebilir. Burada h Plank sabiti ve g spin dejenere faktörüdür. n boyutsal kürenin $V(n, R) = C_n R^n = [\pi^{n/2} / \Gamma(n/2 + 1)] R^n$ hacim ifadesinden

$$dV(n, R) = S(n, R) dR = n C_n R^{n-1} dR \quad (3.3)$$

denklem (3.3) elde edilebilir.

Burada $S(n, R)$ n boyutlu kürenin yüzey alanıdır. Denklem (3.3) ve

$$B(x, y) = \int_0^1 t^{x-1} (1-t)^{y-1} dt = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)}$$

Beta fonksiyonu kullanılarak denklem (3.2),

$$\begin{aligned} \sum(\varepsilon) &= \frac{g}{h^n} \int \prod_{i=1}^n dr_i \int_0^{p_1} n C_n p^{n-1} dp = \frac{g C_n}{h^n} \int \prod_{i=1}^n (p_1)^n dr_i \\ &\equiv \frac{g C_n P_0^n}{h^n \varepsilon_0^{n/s}} \varepsilon^{n/s} \left(\prod_{i=1}^n \frac{L_i \varepsilon^{1/t_i}}{U_i^{1/t_i}} \right) \int \left[1 - \sum_{i=1}^n |Y_i|^{t_i} \right]^{n/s} \prod_{i=1}^n dY_i \\ &\equiv \frac{g C_n P_0^n}{h^n \varepsilon_0^{n/s}} \varepsilon^\lambda \left(\prod_{i=1}^n \frac{L_i}{U_i^{1/t_i}} \right) F(t_1, \dots, t_n) \equiv \alpha \frac{\Gamma(n/s + 1)}{\Gamma(\lambda + 1)} \varepsilon^\lambda \end{aligned} \quad (3.4)$$

denklem(3.4) şeklinde ifade edilebilir. Burada ;

$$\alpha = \frac{g 2^n C_n P_0^n}{h^n \varepsilon_0^{n/s}} \prod_{i=1}^n \frac{L_i \Gamma(1/t_i + 1)}{U_i^{1/t_i}} \quad (3.5)$$

$$\lambda = \frac{n}{s} + \sum_{i=1}^n \frac{1}{t_i} \quad (3.6)$$

$\Gamma(l) = \int_0^\infty y^{l-1} e^{-y} dy$ ifadesi Gama fonksiyonudur. ε ifadesine bağlı olarak (3.4) denkleminin türetiminden durum yoğunluğu,

$$D(\varepsilon) = \frac{\partial \sum(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} = \alpha \frac{\Gamma(n/s + 1)}{\Gamma(\lambda)} \varepsilon^{\lambda-1} \quad (3.7)$$

ifadesi gibi yazılabilir.

Küresel simetrik potansiyellerdeki durum için tek parçacık Hamiltonian, $H = \varepsilon_0(p/p_0)^s + U_0(r/L_0)^t$ ifadesi ile verilir. Yukarıda bahsedilen benzer metot kullanılarak kuantum durumlarının toplam sayısı ve durum yoğunluğu sırasıyla;

$$\sum(\varepsilon) = \alpha_0 \frac{\Gamma(n/s + 1)}{\Gamma(\lambda_0 + 1)} \varepsilon^{\lambda_0} \quad (3.8)$$

$$D(\varepsilon) = \alpha_0 \frac{\Gamma(n/s + 1)}{\Gamma(\lambda_0)} \varepsilon^{\lambda_0-1} \quad (3.9)$$

(3.8) ve (3.9) denklemleri ile verilir.

Burada;

$$\alpha_0 = \frac{g C_n^2 P_0^n L_0^n}{h^n \varepsilon_0^{n/s} U_0^{n/t}} \Gamma(n/t + 1) \quad (3.10)$$

ve

$$\lambda_0 = n/s + n/t \quad (3.11)$$

ifadeleri ile gösterilir. Bu çok açık bir ifade değildir. $n=1$, $t_i = 2$ veya $t_i \rightarrow \infty$ kaydıyla (3.7) denklemi (3.9) denklemine indirgenebilir. n ve t_i nin diğer değerleri için (3.9) denklemi (3.7) denkleminde çıkarılamaz.

Sistemi büyük kanonik topluluk ile tanımlandığında, büyük potansiyel;

$$q(z, \beta, \alpha) = q_0 + \frac{1}{b} \int_0^\infty \ln(1 + bze^{-\beta\varepsilon}) D(\varepsilon) d\varepsilon \quad (3.12)$$

(3.12) denklemi ile verilebilir. Burada $\beta = 1/kT$, k Boltzmann sabiti, T mutlak sıcaklık, $z = \exp(\mu/kT)$ fugasite, μ kimyasal potansiyel, b ise Fermi ve klasik sistemler için sırasıyla 1 ve 0 a eşittir. Ve $q_0 = (1/b) \ln(1 + bz)$ ifadesine eşittir. (3.7) denklemi, (3.12) denkleminde yerine konularak;

$$q(z, \beta, \alpha) = q_0 + \frac{\alpha \Gamma(n/s + 1)}{b \Gamma(\lambda + 1)} \int_0^\infty \ln(1 + bze^{-\beta\varepsilon}) d\varepsilon^\lambda \quad (3.13)$$

(3.13) eşitliği elde edilir.

Parçalar halinde integral alınarak denklem(3.13) aşağıdaki gibi ifade edilebilir;

$$\begin{aligned} q &= q_0 + \alpha\beta \frac{\Gamma(n/s + 1)}{\Gamma(\lambda + 1)} \int_0^\infty \frac{1}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon} + b} \varepsilon^\lambda d\varepsilon \\ &= q_0 + \alpha\Gamma(n/s + 1)(kT)^\lambda \times \begin{cases} f_{\lambda+1}(z), & \text{Fermi sistem} \\ z, & \text{Klasik sistem} \end{cases} \\ &\equiv q_0 + NB \end{aligned} \quad (3.14)$$

Burada N sistemin toplam parçacık sayısıdır ve

$$N = z \left[\frac{\partial q}{\partial z} \right]_{\beta, \alpha} = N_0 + \alpha\Gamma(n/s + 1)(kT)^\lambda \times \begin{cases} f_\lambda(z), & \text{Fermi sistem} \\ z, & \text{Klasik sistem} \end{cases} \quad (3.15)$$

(3.15) eşitliği ile ifade edilir.

$$N_0 = z \left[\frac{\partial q_0}{\partial z} \right]_{\beta, \alpha} = \frac{z}{1 + bz} \quad (3.16)$$

(3.16) eşitliği ise işgal edilen taban durumunu ifade etmektedir. Bose sistemlerinde $z=1$ durumu haricinde N ile karşılaştırıldığında sıfıra eşittir.

$$B = \begin{cases} f_{\lambda+1}/f_\lambda(z), & \text{Fermi sistem} \\ 1, & \text{Klasik sistem} \end{cases} \quad (3.17)$$

ve

$$g_x(z) = \frac{1}{\Gamma(x)} \int_0^\infty \frac{y^{x-1} dy}{z^{-1}e^y - 1} = \sum_{j=1}^\infty \frac{z^j}{j^x} \quad (3.18)$$

$$f_x(z) = \frac{1}{\Gamma(x)} \int_0^\infty \frac{y^{x-1} dy}{z^{-1}e^y + 1} = \sum_{j=1}^\infty (-1)^{j-1} \frac{z^j}{j^x} \quad (3.19)$$

(3.18) ve (3.19) denklemleri sırasıyla Bose ve Fermi integralleridir.

Termodinamik niceliklerin istatistiksel ifadeleri kullanılarak, (3.14) eşitliğinden termodinamik niceliklerden biri kolaylıkla elde edilebilir. Örneğin sistemin toplam enerjisi E ve entropisi sırasıyla;

$$E = - \left[\frac{\partial q}{\partial \beta} \right]_{z, \alpha} = NkT\lambda B \quad (3.20)$$

ve

$$S = k(q - N \ln z + \beta E) = Nk[B(\lambda + 1) - \ln z] \quad (3.21)$$

(3.20) ve (3.21) denklemleriyle verilmiştir.

3.3. Dejenere Fermi Gazının Termodinamik Özellikleri

Fermi sistemlerinde fugasite (z) sınırlandırılmaz. Düşük sıcaklıklarda çok büyük değere sahip olabilir. Fermi integrallerinin hızlı yakınsayan serilerini elde etmek için z nin yerine $\ln z = \mu/(kT)$ değişkenini tanımlanabilir ve Fermi integrallerini seriye açmak için Sommerfeld yaklaşımını kullanılır (Pathria, 1977);

$$f_x(z) = \frac{(\ln z)^x}{\Gamma(x+1)} \left[1 + x(x-1) \frac{\pi^2}{6} \frac{1}{(\ln z)^2} + x(x-1)x(x-2)(x-3) \frac{7\pi^4}{360} \frac{1}{(\ln z)^4} + \dots \right] \quad (3.31)$$

Düşük sıcaklıklarda, (3.15), (3.20) ve (3.21) denklemlerine, (3.31) denklemindeki ilk iki terim yerine konulursa aşağıdaki denklemleri verir;

$$\mu = \mu_0 \left[1 - (\lambda - 1) \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{kT}{\mu_0} \right)^2 \right] \quad (3.32)$$

$$\frac{E}{N} = \frac{\lambda}{\lambda + 1} \mu_0 \left[1 + (\lambda + 1) \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{kT}{\mu_0} \right)^2 \right] \quad (3.33)$$

ve

$$\frac{S}{Nk} = \frac{\lambda \pi^2}{3\mu_0} kT \quad (3.34)$$

Burada Fermi enerjisi,

$$\mu_0 = \left[\frac{N\Gamma(\lambda + 1)}{\alpha\Gamma(n/s + 1)} \right]^{1/\lambda} \quad (3.35)$$

sistemin uzaysal boyutuna, dış potansiyelin şekline, parçacıkların kinematik karakteristiklerine bağlıdır. (3.33) ve (3.34) denklemlerinden ısı sığası,

$$\frac{C}{Nk} = \frac{\lambda\pi^2}{3\mu_0} kT \quad (3.36)$$

(3.36) eşitliği gibi elde edilir.

(3.34) ve (3.36) denklemlerinden Fermi sisteminin ısı sığası ve entropisinin düşük sıcaklıklarda aynı olduğu görülmektedir. Bu sıcaklıkla orantılı olduklarını ifade eder. Orantı katsayısı bu parametrelere bağlı iken, sistemin uzaysal boyutundan, parçacıkların kinematik karakteristiklerinden ve dış potansiyelin şeklinden bağımsız olmasının ortak özelliğidir.

3.4. Dejenere Olmayan ve Zayıf Dejenere İdeal Sistemlerin Termodinamik Özellikleri

Sistemin sıcaklığı yükseldiğinde z değeri düşer ve çok küçük değere sahip olur. (3.17) denklemine, (3.18) ve (3.19) denklemlerindeki ilk iki terim yerine konulduğunda

$$B \approx 1 \mp \frac{z}{2^{\lambda+1}} \quad (3.37)$$

denklem (3.37) elde edilir.

(3.14), (3.20) ve (3.21) denklemlerine (3.37) eşitliği yerine konularak, zayıf dejenere Fermi ve Bose sistemlerinin termodinamik fonksiyonlarını aşağıdaki gibi elde edilir:

$$q = N \left(1 \mp \frac{z}{2^{\lambda+1}} \right) \quad (3.38)$$

$$\frac{E}{N} = \lambda kT \left(1 \mp \frac{z}{2^{\lambda+1}} \right) \quad (3.39)$$

ve

$$\frac{S}{Nk} = (\lambda + 1) \left(1 \mp \frac{z}{2^{\lambda+1}} \right) - \ln z \quad (3.40)$$

(3.37)-(3.40) arasındaki denklemlerdeki negatif işaret Bose sistemleri için geçerli iken pozitif işaret ise Fermi sistemleri için geçerlidir. Yüksek sıcaklık limitinde (3.37) denklemi,

$$B_{Fermi} = B_{Bose} = B_{Klasik} = 1 \quad (3.41)$$

(3.41) denklemi olarak ifade edilir.

Böyle bir durumda, bir kuantum sistemi klasik bir sistem eğilimindedir. Bu nedenle yukarıdaki sonuçlar kullanılarak, klasik sistemin termodinamik özelliklerini

$$q = N \quad (3.42)$$

$$\frac{E}{N} = \lambda kT \quad (3.43)$$

ve

$$\frac{S}{Nk} = \lambda + 1 - \ln z \quad (3.44)$$

(3.42), (3.43) ve (3.44) eşitliklerinde olduğu gibi türetilebilir.

Burada;

$$z = \frac{N}{\alpha \Gamma(n/s + 1) (kT)^\lambda} \quad (3.45)$$

(3.45) eşitliği, (3.15) denkleminde türetilmiştir.

3.5. Faz Dönüşümü ve Durum Yoğunluğu

Denklem (3.7) ve (3.9) dan da görüldüğü gibi parçacıklar ister küresel simetride isterse simetrik olmayan dış potansiyelde zorlandırılınsın, durum yoğunluğu parçacıkların dağılım karakteristiklerinden bağımsız iken sadece Hamiltonian bağlıdır.

n boyutta relativistik olmayan ideal sistemler için parçacıkların durum yoğunluğu dış potansiyel sınırlandırması olmaksızın (3.7) denkleminde türetilir;

$$D(\varepsilon) = \frac{gV_n(2\pi m)^{n/2}}{h^n \Gamma(n/2)} \varepsilon^{n/2-1} \quad (3.46)$$

Burada V_n , n boyutlu kabın hacmi, m ise parçacığın kütlesidir. Denklem (3.46)'da görüldüğü gibi diğer şartlar aynı olduğunda düşük enerjili uyarılmış durumların yoğunluğu uzaysal boyuta bağlıdır. Üç boyutlu sistem için, $D(\varepsilon) \propto \varepsilon^{1/2}$. $\varepsilon \rightarrow 0$ durumunda $D(\varepsilon) \rightarrow \infty$. Böylece düşük sıcaklıkta ısıl dalgalanmalar çok küçüktür. Bundan dolayı sistem uzun menzilli düzende tutulabilir. Sadece ısıl dalgalanmaların uzun menzilli düzeni yok ettiği durumlarda sıcaklık yükselir ve faz dönüşümü oluşur. Bir boyutlu sistemler için düşük enerjili uyarılmış durum yoğunluğu $D(\varepsilon) \propto \varepsilon^{1/2}$. $\varepsilon \rightarrow 0$ durumunda $D(\varepsilon) \rightarrow \infty$. Böylece sıcaklık ne kadar azalır ise ısıl-uyarmadan kaynaklanan dalgalanmaların hepsi çok güçlü olur. Bundan dolayı sistem düzende tutunamaz ve faz dönüşümü oluşmaz. İki boyutlu sistem için, durum yoğunluğu sabittir ve burada her zaman belli bir ısıl dalgalanma vardır. Böylece, genel olarak uzun menzilli düzen yoktur ve iki boyutlu sistemler için sadece yarı uzun menzilli düzen vardır. Bu farklı uzaysal boyutlardaki parçacıklarının durum yoğunluklarının her birinin diğerinden farklı olduğunu gösterir. Bundan dolayı farklı boyutlu sistemlerin özellikleri farklıdır. Örneğin BEC, üç boyutlu serbest Bose sistemlerinde oluşur fakat, bir ve iki boyutlu serbest Bose sistemlerinde oluşmaz.

Dış potansiyelin varlığında, $D(\varepsilon) \sim \varepsilon$ ilişkisi değiştirilebilecek. Örneğin bir küresel simetrik harmonik dış potansiyeli için, denklem (3.9) kullanılarak, n boyutta relativistik olmayan ideal bir sistem için durum yoğunluğu

$$D(\varepsilon) = \frac{g}{(\hbar\omega)^n \Gamma(n)} \varepsilon^{n-1} \quad (3.47)$$

ifadesi ile tanımlanabilir. Burada ω harmonik dış potansiyelin frekansıdır. Denklem (3.47)'den de görüldüğü gibi üç ve iki boyutlu sistemler için durum yoğunluğu sırasıyla ε^2 ve ε ile orantılıdır. $\varepsilon \rightarrow 0$ durumunda $D(\varepsilon) \rightarrow 0$ gider. Bundan dolayı ısı dalgaları düşük sıcaklıklarda çok küçüktür, sistem uzun menzilli düzende tutunabilir. Böylece BEC, harmonik dış potansiyelde tuzaklandırılmış iki ve üç boyutlu Bose sistemlerinde oluşacağı açıktır. Bu (3.25) denklemleri ile uyumludur. Ayrıca (3.46) ve (3.47) denklemlerinden de görülebildiği gibi durum yoğunluğu sadece uzaysal boyuttan değil ayrıca dış potansiyelin sınırlandırmasında da etkilenir. Üç boyutlu sistem için, $\varepsilon \rightarrow 0$ durumunda, dış potansiyelin varlığı $D(\varepsilon)$ nun çok daha hızlı sıfıra yakınsamasını sağlar. Bu, dış potansiyel ile sınırlandırılan sistemin serbest bir sistemden daha kolay uzun menzilli düzende tutunabildiğini gösterir. Öyle ki faz dönüşümü, öyle bir sistem için daha yüksek sıcaklıklarda oluşabilir. Bu sonuçlar deneyler tarafından desteklenmiştir.

4. SONLU SICAKLIKLARDA RELATİVİSTİK THOMAS-FERMİ MODELİ

4.1. Giriş

Thomas-Fermi istatistiksel modeli, farklı fiziksel koşullar altında (Lundqvist ve ark., 1983), atomların ve katıların elektronik yapılarını hesaplamak için 1927 den beri yaygın olarak kullanılmaktadır (Thomas, 1927 ve Fermi 1928). Daha önceki çalışmalarda bu model soğuk beyaz cücelerin denge durumlarını ve durum denklemlerini hesaplamak amacıyla relativistik olarak kullanılmıştır. (Bertone ve ark., 2000; Ruffini ve ark., 1981; Ferreira ve ark., 1980). Bu bölümde durum sonlu sıcaklığın durum denklemi üzerindeki etkisi ve relativistik Thomas-Fermi modelinin sıcaklığa bağlı formülü hakkında bilgi verilecektir (Bertone, 2001).

4.2. Klasik Thomas-Fermi Modeli

Z elektronlu tamamen dejenere bir gaz ile etkileşen Z protonları ve A nükleonları ile bir çekirdeğin küresel simetrik problemi Poisson denklemi

$$\Delta V(r) = 4\pi en_e(r) \quad (4.1)$$

aracılığı ile çözülebilir. Bu ifadede $V(r)$ elektrostatik potansiyel ve $n_e(r)$ elektronların durum yoğunluğudur.

Elektrostatik potansiyel Fermi momentumu

$$p_F^2(r)/2m - eV(r) = \text{sabit} \equiv E_F \quad (4.2)$$

aracılığı ile ilişkilendirilebilir. Burada E_F Thomas-Fermi kimyasal potansiyel veya elektronların Fermi enerjisi olarak isimlendirilebilir. $\Phi(r)$ fonksiyonu

$$\Phi(r) = V(r) + E_F/e \quad (4.3)$$

ve boyutsal fonksiyon χ ,

$$\Phi(r) = \frac{Ze\chi}{r} \quad (4.4)$$

ile tanımlandığında

Ayrıca yeni bağımsız x değişkeni, $r = bx$ ifadesi ile verilen r yarıçapı ile ilişkilendirilir. Burada b ifadesi aşağıdaki gibi tanımlanmıştır.

$$b = (3\pi)^{2/3} \frac{\hbar^2}{me^2} \frac{1}{2^{7/3}} \frac{1}{Z^{1/3}} \quad (4.5)$$

Thomas-Fermi denkleminin klasik boyutsal şekli olan

$$\frac{d^2\chi}{dx^2} = \frac{\chi^{3/2}}{x^{1/2}} \quad (4.6)$$

ifadesinden denklem (4.1)'in yazılabileceğini göstermek kolaydır.

Bu denklem için ilk başlangıç durumu çekirdeğe doğru gittikçe

$$\chi(0) = 1 \quad (4.7)$$

koşulunu sağlamasıdır.

İkinci koşulda normalizasyon durumu

$$N = \int_0^{r_0} 4\pi n_e r^2 dr \quad (4.8)$$

ifadesinden gelir. Bu ifade

$$N = Z[x_0\chi'(x_0) - \chi(x_0) + 1] \quad (4.9)$$

(4.9) denklemini verir. Nötr atomlar için ($N=Z$),

$$x_0\chi'(x_0) = \chi(x_0) \quad (4.10)$$

ifadesi yazılabilir.

4.3. Sıcaklığa Bağlı Relativistik olmayan Model

T sıcaklığında elektron gazın yoğunluğu,

$$n_e = \frac{\sqrt{2}m_e^{3/2}}{\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\varepsilon}}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{kT}} + 1} d\varepsilon = \frac{\sqrt{2}m_e^{3/2}}{\pi^2\hbar^3} (KT)^{3/2} I_1\left(\frac{\mu}{kT}\right) \quad (4.11)$$

şeklinde verilebilir. Burada I_1 aşağıdaki şekilde tanımlanır:

$$I_1(x) = \int_0^\infty \frac{\sqrt{y}}{e^{y-x} + 1} dy \quad (4.12)$$

Bölüm 4.2'deki boyutsuz değişkenler kullanılarak ve τ ,

$$\tau = \frac{b}{Ze^2} KT \quad (4.13)$$

sıcaklık parametresi olarak ifade edildiğinde elektron yoğunluğu,

$$n_e = \frac{\sqrt{2}m_e^{3/2} Z^{3/2} e^3 \tau^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3 b^{3/2}} I_1\left(\frac{\chi}{\tau x}\right) \quad (4.14)$$

eşitliği ile yeniden yazılabilir. Böylece aşağıdaki elektrostatik denklem yeni değişkenler cinsinden ifade edilir:

$$\frac{d^2\chi}{dx^2} = \frac{3}{2} \tau^{3/2} x I_1\left(\frac{\chi}{\tau x}\right) \quad (4.15)$$

Bu denklem tamamen dejenere olan durumda elde edilenden formül olarak farklıdır. Yinede küçük sıcaklıklar için (4.11) denkleminde görülen integral geliştirilirse aşağıdaki formülde birinci mertebeyi alacağı kolaylıkla görülebilir.

$$\frac{d^2\chi}{dx^2} = \frac{\chi^{3/2}}{x^{1/2}} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \frac{\tau^2 x^2}{\chi^2} + \dots \right] \quad (4.16)$$

Burada $O(\tau^4)$ mertebesinin terimleri ihmal edilir.

4.4. T=0' da Relativistik Model

Bu modelin relativistik açılımı düşünüldüğünde merkezdeki ıraksamadan sakınmak için çekirdeğin sonlu büyüklüğü hesaba alınabilir. Bu durumda $n_p(r)$ çekirdeğinin iç kısmındaki pozitif yük dağılımını temsil eden elektrostatik temel denklemine yeni bir terim eklenir ve aşağıdaki denklem elde edilir:

$$\Delta V(r) = 4\pi en_e(r) - 4\pi en_p(r) \quad (4.17)$$

Bu durumda $V(r)$ ve $n(r)$ nicelikleri

$$c\sqrt{p_F^2 + m^2c^2} - eV(r) = \text{sabit} \equiv E_F \quad (4.18)$$

ifadesi ile ilişkilendirilir.

Denklem (4.3) kullanılarak

$$p_F^2 = \frac{e^2}{b}\Phi^2 + 2me\Phi \quad (4.19)$$

ifadesine (4.18) denklemini koymak mümkündür. (4.4) denklemini kullanılarak Fermi momentumu aşağıdaki şekli alır:

$$p_F = 2mc \left(\frac{Z}{Z_{cr}}\right)^{2/3} \left(\frac{\chi}{x}\right)^{1/2} \left[1 + \left(\frac{Z}{Z_{cr}}\right)^{4/3} \frac{\chi}{x}\right]^{1/2} \quad (4.20)$$

Burada Z_{cr} ifadesi aşağıdaki şekilde tanımlanabilir.

$$Z_{cr} = \left(\frac{3\pi}{4}\right)^{1/2} \left(\frac{\hbar c}{e^2}\right)^{3/2} \approx 2462.4 \quad (4.21)$$

Fermiyon gazının yoğunluk sayısı ve Fermi momentumu arasındaki ilişki,

$$n_e = \frac{p_F^3}{3\pi^2 \hbar^3} \quad (4.22)$$

hatırlanılarak aşağıdaki ifade elde edilebilir:

$$n_e = \frac{Z}{4\pi b^3} \left(\frac{\chi}{x}\right)^{3/2} \left[1 + \left(\frac{Z}{Z_{cr}}\right)^{4/3} \frac{\chi}{x}\right]^{3/2} \quad (4.23)$$

Ayrıca (4.1) denkleminin sağ tarafındaki ikinci terimi boyutsal nicelikler açısından ifade edilebilir: Burada

$$r_{\text{çek}} = 1.2A^{1/3} fm \quad (4.24)$$

yaklaşık formülü ile verilen bir yarıçap ile homojen küresel çekirdeklerin olduğu varsayılır. Böylece protonların yoğunluk sayısı

$$n_p = \frac{3Z}{4\pi r_{\text{çek}}^3} \Theta(x_{\text{çek}} - x) \quad (4.25)$$

ifadesi ile verilir.

Sonuç olarak (4.17) denklemini aşağıdaki şekilde yazılabilir:

$$\frac{d^2\chi}{dx^2} = \frac{\chi^{3/2}}{x^{1/2}} \left[1 + \left(\frac{Z}{Z_{cr}}\right)^{4/3} \frac{\chi}{x}\right]^{3/2} - \frac{3x}{x_{\text{çek}}^3} \Theta(x_{\text{çek}} - x) \quad (4.26)$$

Burada $x_{\text{çek}}$ çekirdeğin boyutsal büyüklüğüdür.

Denklem (4.26) genelleştirilmiş boyutsal Thomas-Fermi denklemi olarak adlandırılabilir. İlk başlangıç durumu $\chi \propto r\theta$ ifadesi ile orantılı olduğundan $r \rightarrow 0$ 'a gittikçe $\chi \rightarrow 0$ 'a gittiği koşuldur:

$$\chi(0) = 0 \quad (4.27)$$

İkinci koşul, $r_0 = bx_0$ atom büyüklüğü ile

$$N = \int_0^{r_0} 4\pi n_e r^2 dr = Z \int_0^{x_0} \frac{\chi^{3/2}}{x^{1/2}} \left[1 + \left(\frac{Z}{Z_{cr}}\right)^{4/3} \frac{\chi}{x}\right]^{3/2} x dx \quad (4.28)$$

(4.28) denkleminde verilen normalizasyon koşulundan gelir. Bu formül geliştirilerek aşağıdaki ifade elde edilir:

$$N = Z \int_0^{x_{\text{çek}}} x\chi'' dx + \frac{3Z}{x_{\text{çek}}^3} \int_0^{x_{\text{çek}}} x^2 dx + Z \int_{x_{\text{çek}}}^{x_0} x\chi'' dx \quad (4.29)$$

Bu ifade

$$N = Z[x_0\chi'(x_0) - \chi(x_0) + 1] \quad (4.30)$$

ilişkisini verir.

Coulomb potansiyeli ve elektron yoğunluğu gibi fiziksel niceliklerin, χ fonksiyonuna ve ilk türetimine bağlı olarak ne çekirdeğin kenarında ne de merkezde herhangi bir tekillilik göstermeyeceği söylenebilir. Sadece homojen küresel çekirdeğin kabaca varsayımından kaynaklanan χ nin ikinci türetiminde süreksizlik ortaya çıkar.

Bu durumda klasik Thomas-Fermi denkleminin ölçeklendirilmiş özelliklerinin kaybolduğu kanıtlanmıştır. Burada sıkıştırılmış farklı durumlar için x_0 'ın farklı değerleri ve Z 'nin her bir değeri için ayrı ayrı boyutsal denklem integre edilmek zorundadır.

4.5. Sıcaklığa Bağlı Relativistik Model

T sıcaklığında pozitif yüklenmiş çekirdekle kuşatılmış relativistik ve dejenere elektron gazının yoğunluğu

$$n_e = \frac{1}{\pi^2(c\hbar)^3} \int_{mc^2}^{\infty} \frac{\sqrt{\varepsilon^2 - m^2c^4\varepsilon}}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{kT}} + 1} d\varepsilon = \frac{(KT)^3}{\pi^2(c\hbar)^3} I_2\left(\frac{\mu}{kT}\right) \quad (4.31)$$

eşitliği ile verilebilir. Bu verilen ifadede $I_2(x)$ aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$I_2(x) = \int_0^{\infty} \frac{y\sqrt{y^2 - a^2}}{e^{y-x} + 1} dy \quad (4.32)$$

a sabitleşmiş parametredir ve $a = mc^2/kT$ ifadesine eşittir.

Boyutsuz değişkenler ve τ sıcaklık parametresi eklenerek yoğunluk sayısı aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$n_e = \frac{1}{b^3} \frac{Z^3}{\pi^2} \left(\frac{e^2}{c\hbar}\right)^3 \tau^3 I_2\left(\frac{\chi}{\tau x}\right) \quad (4.33)$$

Önceden tanımlanan nicelik (Z_{cr}) eklenerek

$$n_e = \frac{3Z}{4\pi b^3} \left(\frac{Z}{Z_{cr}}\right)^2 \tau^3 I_2\left(\frac{\chi}{\tau x}\right) \quad (4.34)$$

ifadesi bulunur. Bunun sonucu olarak Thomas-Fermi denkleminin çok genel ve son ifadesi aşağıdaki şekilde bulunur:

$$\frac{d^2\chi}{dx^2} = 3\tau^3 x \left(\frac{Z}{Z_{cr}}\right)^2 I_2\left(\frac{\chi}{\tau x}\right) - \frac{3x}{x_{\text{çek}}^3} \theta(x_{\text{çek}} - x) \quad (4.35)$$

5. KUVVET-KANUN POTANSİYELİNDE TUZAKLANDIRILMIŞ ZAYIF ETKİLEŞEN FERMİ GAZININ DÜŞÜK SICAKLIKLARDA DAVRANIŞI

5.1. Giriş

Bu bölümde LDA altında tuzaklandırılmış etkileşen Fermi gazının düşük sıcaklıktaki davranışı hakkında bilgi verilecektir (Su ve ark., 2003). Bölüm 5.2’de genel bir kuvvet-kanun potansiyelinde tuzaklandırılmış zayıf etkileşen Fermi gazı için; kimyasal potansiyel, toplam enerji, entropi ve ısı sığası da dahil olmak üzere bazı önemli termodinamik niceliklerin analitik ifadeleri verilecektir. Atomlar arası etkileşimlerinden dolayı termodinamik niceliklerdeki düzeltmeler açık bir şekilde gösterilmiştir. Bölüm 5.3’te çeşitli dış potansiyeller için bu termodinamik niceliklerin sıcaklığa bağlılığı incelenmiştir. Sistemin davranışındaki atomlar arası etkileşimler ve dış potansiyelin etkileri katılarak tartışılmıştır.

5.2. Teoriksel Değerlendirme

Kuvvet-kanun potansiyelinde tuzaklandırılmış zayıf etkileşen bir Fermi gazı ele alalım;

$$V(r) = \sum_{k=1}^3 \varepsilon_k \left| \frac{x_k}{L_k} \right|^{t_k} \quad (5.1)$$

Burada x_k kth parçacığın koordinatıdır, t_k , ε_k ve L_k pozitif sabitlerdir. t_k , ε_k ve L_k farklı değerlere bağlı çeşitli parçacık potansiyelleri de dahil olmak üzere potansiyelin çok genel olduğu görülmektedir.

Parçacık sayısı büyük olan sistemler için gerçekte Thomas-Fermi metoduna uyarlanan LDA nın iyi bir yaklaşım olduğu kanıtlanmıştır. LDA da, dengedeki homojen olmayan sistemin kimyasal potansiyeli,

$$\mu = \bar{\mu}[n(r)] + V(r) \quad (5.2)$$

(5.2) eşitliği ile ifade edilmiştir. Sistemin enerji ve entropi yoğunlukları

$$u(r) = \bar{u}[n(r)] + n(r)V(r) \quad (5.3)$$

$$s(r) = \bar{s}[n(r)] \quad (5.4)$$

sırasıyla (5.3) ve (5.4) denklemleriyle verilmiştir.

Burada $n(r)$, r noktasında parçacığın yerel yoğunluğudur. $\bar{\mu}[n(r)]$, $\bar{u}[n(r)]$ ve $\bar{s}[n(r)]$ sırasıyla kimyasal potansiyel, enerji yoğunluğu ve $n(r)$ parçacık yoğunluğu ile homojen sisteme bağlı entropi yoğunluğudur.

Zayıf sert küresel yüzeyde etkileşen Fermi sistemi için p ve daha yüksek kısmi dalgaların etkileşimi s dalgalarıyla karşılaştırıldığında daha küçüktür. Bu nedenle sadece s-dalga etkileşimleri ele alınmıştır. s-dalga için iki cisimli sözde potansiyel kullanılarak zayıf etkileşen homojen Fermi sistemi için sabit hacimde kimyasal potansiyel, toplam enerji, entropi ve ısı sığasının ifadeleri türetilebilir. Böylece $\bar{\mu}[n(r)]$, $\bar{u}[n(r)]$ ve $\bar{s}[n(r)]$ sırasıyla;

$$\bar{\mu}[n(r)] = k_B T \{ \ln \bar{z}_0[n(r)] + a \lambda^2 n(r) \} \quad (5.5)$$

$$\bar{u}[n(r)] = k_B T \left\{ \frac{3}{\lambda^3} f_{5/2} \{ \bar{z}_0[n(r)] \} + \frac{1}{2} a \lambda^2 n^2(r) \right\} \quad (5.6)$$

$$\bar{s}[n(r)] = k_B \left\{ \frac{5}{\lambda^3} f_{5/2} \{ \bar{z}_0[n(r)] \} - n(r) \ln \{ \bar{z}_0[n(r)] \} \right\} \quad (5.7)$$

ifadeleri gibi elde edilebilir. Burada m tek parçacığın kütlesi, T sistemin sıcaklığı, a s-dalga saçılma uzunluğudur ve $|a|[n(r)]^{1/3} \ll 1$ ve $|a|/\lambda \ll 1$ ilişkisi sağlandığı farz edilebilir. $\bar{z}_0[n(r)]$,

$$n(r) = \frac{2}{\lambda^3} f_{3/2} \{ \bar{z}_0[n(r)] \} \quad (5.8)$$

eşitliğine bağlı olan etkileşmeyen sisteme bağlı fugasitedir.

Fermi integrali,

$$f_l(x) = \frac{1}{\Gamma(l)} \int_0^{\infty} \frac{t^{l-1} dt}{x^{-1} e^t + 1} \quad (5.9)$$

ve $\Gamma(l)$ gamma fonksiyonudur. $x \leq 1$ olduğu durumda $f_l(x)$ ifadesini,

$$f_l(x) = \sum_{i=1}^{\infty} (-1)^{i-1} \frac{x^i}{i^l} \quad (5.10)$$

şeklinde açabiliriz.

(5.2)-(5.8) denklemlerine göre parçacık yoğunluğu, enerji ve entropi homojen olmayan etkileşen Fermi sistemler için;

$$n(r) \approx \frac{2}{\lambda^3} f_{3/2}\{z \exp[-\beta V(r)]\} \left\{ 1 - \frac{2a}{\lambda} f_{1/2}\{z \exp[-\beta V(r)]\} \right\} \quad (5.11)$$

$$u(r) \approx \frac{k_B T}{\lambda^3} \left\{ 3f_{5/2}\{z \exp[-\beta V(r)]\} + 2\beta V(r) f_{3/2}\{z \exp[-\beta V(r)]\} \right. \\ \left. - \frac{a}{\lambda} [4f_{3/2}^2\{z \exp[-\beta V(r)]\}] \right. \\ \left. + 4\beta V(r) f_{3/2}\{z \exp[-\beta V(r)]\} f_{1/2}\{z \exp[-\beta V(r)]\} \right\} \quad (5.12)$$

$$s(r) \approx \frac{k_B}{\lambda^3} \left\{ 5f_{5/2}\{z \exp[-\beta V(r)]\} + 2[\beta V(r) - \ln z] f_{3/2}\{z \exp[-\beta V(r)]\} \right. \\ \left. - \frac{a}{\lambda} [6f_{3/2}^2\{z \exp[-\beta V(r)]\}] \right. \\ \left. + 4[\beta V(r) - \ln z] f_{3/2}\{z \exp[-\beta V(r)]\} f_{1/2}\{z \exp[-\beta V(r)]\} \right\} \quad (5.13)$$

ifadeleri türetilir. Yukarıdaki türetimde üstel fonksiyon ve a/λ küçük parametre ile ilgili Fermi integrali genişletildi ve sadece a/λ nın en düşük derecesi alındı.

(5.11)-(5.13) denklemlerinde sırasıyla parçacık yoğunluğu, enerji ve entropinin uzaysal dağılımları tanımlanmıştır. (5.11)-(5.13) denklemlerinde $V(r)$ ifadesini yerine koyarak ve uzay koordinatı üzerinden $n(r)$, $u(r)$ ve $s(r)$ ifadelerini entegre ederek sistemin parçacık sayısını, toplam enerjisini ve entropisini aşağıdaki ifadeler gibi elde edilebilir:

$$N = \int n(r) dr = \frac{2\Omega^*}{\lambda^3} \left[f_{\eta+3/2}(z) - \frac{2a}{\lambda} F_{3/2,1/2,\eta}(z) \right] \quad (5.14)$$

$$U = \int u(r) dr = \frac{k_B T \Omega^*}{\lambda^3} \left[(2\eta + 3) f_{\eta+5/2}(z) - \frac{a}{\lambda} (4\eta + 8) F_{3/2,1/2,\eta+1}(z) \right] \quad (5.15)$$

$$S = \int s(r) dr = \frac{k_B \Omega^*}{\lambda^3} \left\{ (2\eta + 3) f_{\eta+5/2}(z) - 2 \ln z f_{\eta+3/2}(z) \right. \\ \left. - \frac{a}{\lambda} [(4\eta + 8) F_{3/2,1/2,\eta+1}(z) - 4 \ln z F_{3/2,1/2,\eta}(z)] \right\} \quad (5.16)$$

Burada

$$\eta = \sum_{k=1}^3 \frac{1}{t_k} \quad (5.17)$$

$$\Omega^* = \prod_{k=1}^3 (2L_k) \left(\frac{1}{t_k} + 1 \right) \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_k} \right)^{1/t_k} \quad (5.18)$$

ifadeleri sistemin sözde hacmi olarak alınabilir.

$$F_{l,m,n}(x) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^{\infty} f_l(xe^{-t}) f_m(xe^{-t}) t^{n-1} dt \quad (5.19)$$

ifadesi $x \leq 1$ olduğu durumda

$$F_{l,m,n}(x) = \sum_{i,j=1}^{\infty} \frac{(-1)^{1+j} x^{i+j}}{i! j^m (i+j)^n} \quad (5.20)$$

(5.20) denklemini gibi genişletilebilir.

Yukarıdaki türetilmelere aşağıdaki integraller katılmaktadır:

$$\int V^n(r) f_l \{ z \exp[-\beta V(r)] \} dr = \frac{\Gamma(\eta + n) \Omega^* (k_B T)^n}{\Gamma(\eta)} f_{l+\eta+n}(z) \quad (5.21)$$

$$\int V^n(r) f_l \{ z \exp[-\beta V(r)] \} f_m \{ z \exp[-\beta V(r)] \} dr \\ = \frac{\Gamma(\eta + n) \Omega^* (k_B T)^n}{\Gamma(\eta)} f_{l,m,\eta+n}(z) \quad (5.22)$$

Atomlar arası etkileşmelerden dolayı termodinamik niceliklerdeki düzeltmeleri açık bir şekilde ifade etmek için

$$N = \frac{2\Omega^*}{\lambda^3} f_{\eta+3/2}(z_0) \quad (5.23)$$

denkleminde konu edilen “etkileşmeyen fugasite” z_0 tanıdır. (5.14) ve (5.23) denklemlerinden

$$z \approx z_0 \left[1 + \frac{2a F_{3/2,1/2,\eta}(z_0)}{\lambda f_{\eta+1/2}(z_0)} \right] \quad (5.24)$$

ifadesi bulunabilir. (5.15), (5.16), (5.23) ve (5.24) denklemleri kullanılarak sistemin kimyasal potansiyeli, toplam enerjisi ve entropisi z_0 ‘ın bir fonksiyonu olarak ifade edilebilir. Sonuçlar sırasıyla

$$\mu = k_B T \left[\ln z_0 + \frac{2a F_{3/2,1/2,\eta}(z_0)}{\lambda f_{\eta+1/2}(z_0)} \right] \quad (5.25)$$

$$U = N k_B T \left\{ \left(\eta + \frac{3}{2} \right) \frac{f_{\eta+5/2}(z_0)}{f_{\eta+3/2}(z_0)} + \frac{a}{\lambda} \left[(2\eta + 3) \frac{F_{3/2,1/2,\eta}(z_0)}{f_{\eta+1/2}(z_0)} - (2\eta + 4) \frac{F_{3/2,1/2,\eta+1}(z_0)}{f_{\eta+3/2}(z_0)} \right] \right\} \quad (5.26)$$

$$S = N k_B \left\{ \left(\eta + \frac{5}{2} \right) \frac{f_{\eta+5/2}(z_0)}{f_{\eta+3/2}(z_0)} - \ln z_0 + \frac{a}{\lambda} \left[(2\eta + 3) \frac{F_{3/2,1/2,\eta}(z_0)}{f_{\eta+1/2}(z_0)} - (2\eta + 6) \frac{F_{3/2,1/2,\eta+1}(z_0)}{f_{\eta+3/2}(z_0)} \right] \right\} \quad (5.27)$$

ifadeleri ile verilmiştir. Verilen dış potansiyel ve parçacık sayısı için ısı sığası

$$C = \frac{dU}{dT} = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_{z_0} + \left(\frac{\partial U}{\partial z_0} \right)_T \frac{dz_0}{dT} \quad (5.28)$$

(5.28) denklemleri ile hesaplanabilir. (5.23), (5.24) ve (5.28) denklemlerinden,

$$C = N k_B \left\{ \left(\eta + \frac{3}{2} \right) \left(\eta + \frac{5}{2} \right) \frac{f_{\eta+5/2}(z_0)}{f_{\eta+3/2}(z_0)} - \left(\eta + \frac{3}{2} \right)^2 \frac{f_{\eta+3/2}(z_0)}{f_{\eta+1/2}(z_0)} + \frac{a}{\lambda} \left\{ 2 \left(\eta + \frac{3}{2} \right) \left(\eta + \frac{7}{2} \right) \frac{F_{3/2,1/2,\eta}(z_0)}{f_{\eta+1/2}(z_0)} - 2(\eta + 2)(\eta + 3) \frac{F_{3/2,1/2,\eta+1}(z_0)}{f_{\eta+3/2}(z_0)} - 2 \left(\eta + \frac{3}{2} \right)^2 \frac{f_{\eta-1/2}(z_0) f_{\eta+3/2}(z_0)}{f_{\eta+1/2}^2(z_0)} \left[\frac{F_{3/2,1/2,\eta-1}(z_0)}{f_{\eta+1/2}(z_0)} \right] \right\} \right\} \quad (5.29)$$

ifadesi bulunabilir. $t_k = 2$ ve $\varepsilon_k/L_k^{t_k} = m\omega_k^2/2$ seçilirse, ω_k frekansı ile harmonik potansiyelde tuzaklandırılmış etkileşen Fermi gazının özellikleri elde edilebilir. Eğer $t_k \rightarrow \infty$, yani $|x_k| > L_k$ ve $|x_k| < L_k$ bölgelerinde $V(r) \rightarrow \infty$ ve $V(r) \rightarrow 0$ giderse k th kenarlı $2L_k$ uzunluğunda sert bir kutu içinde sınırlandırılmış etkileşen Fermi gazının özellikleri türetilebilir. Gerçekte $t_k \rightarrow \infty$ olduğu durum için (5.17), (5.18) ve (5.20) denklemlerinden

$$\eta = 0, \quad \Omega^* = \prod_{k=1}^3 2L_k \equiv \Omega, \quad F_{3/2,1/2,\eta-1}(z_0) = f_{1/2}^2(z_0)f_{3/2}(z_0)f_{-1/2}(z_0),$$

$$F_{3/2,1/2,\eta}(z_0) = f_{3/2}(z_0)g_{1/2}(z_0), \quad F_{3/2,1/2,\eta+1}(z_0) = \frac{f_{3/2}^2(z_0)}{2}$$

yukarıdaki eşitlikler bulunabilir.

(5.25)-(5.27) ve (5.29) denklemleri ayrıca ideal (etkileşmeyen) Fermi sistemlerinin özelliklerini incelemek için de kullanılabilir. Örneğin, $a=0$ olduğunda (5.25)-(5.27) ve (5.29) denklemlerinden

$$\mu = k_B T \ln z_0 \quad (5.30)$$

$$U = N k_B T \frac{f_{\eta+5/2}(z_0)}{f_{\eta+3/2}(z_0)} \quad (5.31)$$

$$S = N k_B \left[\left(\eta + \frac{5}{2} \right) \frac{f_{\eta+5/2}(z_0)}{f_{\eta+3/2}(z_0)} - \ln z_0 \right] \quad (5.32)$$

$$C = N k_B \left[\left(\eta + \frac{3}{2} \right) \left(\eta + \frac{5}{2} \right) \frac{f_{\eta+5/2}(z_0)}{f_{\eta+3/2}(z_0)} - \left(\eta + \frac{3}{2} \right)^2 \frac{f_{\eta+3/2}(z_0)}{f_{\eta+1/2}(z_0)} \right] \quad (5.33)$$

ifadeleri elde edilir.

$t_k \rightarrow \infty$ seçilirse, sert bir kutu içindeki ideal Fermi gazının özellikleri yukarıdaki sonuçlardan doğrudan türetilebilir.

Aşırı düşük sıcaklıklarda $z_0 \gg 1$ dir. Bundan dolayı, $f_l(z_0)$, Sommerfeld teorisine göre

$$f_l(z_0) = \frac{(l n z_0)^l}{\Gamma(l+1)} \left[1 + l(l-1) \frac{\pi^2}{6} \frac{1}{(l n z_0)^2} + \dots \right] \quad (5.34)$$

(5.34) denklemini gibi genişletilebilir. Sonuçta $F_{l,m,n}(z_0)$ fonksiyonu,

$$\begin{aligned}
F_{l,m,n}(z_0) &\approx \frac{1}{\Gamma(l+1)\Gamma(m+1)\Gamma(n)} \\
&\times \int_0^{lnz_0} (lnz_0 - t)^{l+m} \left[1 + l(l-1) \frac{\pi^2}{6} \frac{1}{(lnz_0 - t)^2} + \dots \right] \\
&\times \left[1 + m(m-1) \frac{\pi^2}{6} \frac{1}{(lnz_0 - t)^2} + \dots \right] t^{n-1} dt \\
&= \frac{\Gamma(l+m+1)(lnz_0)^{l+m+n}}{\Gamma(l+1)\Gamma(m+1)\Gamma(l+m+n+1)} \\
&\times \left\{ 1 + \frac{[l(l-1) + m(m-1)](l+m+n)(l+m+n-1) \pi^2}{(l+m)(l+m-1)} \frac{1}{6} \frac{1}{(lnz_0)^2} \right. \\
&\left. + \dots \right\} \tag{6.35}
\end{aligned}$$

(5.35) denklemini gibi ifade edilir.

(5.23), (5.25)-(5.27) ve (5.29) denklemlerine (5.34) ve (5.35) denklemlerini yerine konulursa, sıcaklığın bir fonksiyonu olarak μ, U, S ve C ifade edilir. Sonuçlar sırasıyla,

$$\begin{aligned}
\mu &= k_B T_{F0} \left\{ 1 - \left(\eta + \frac{3}{2} \right) \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{T}{T_{F0}} \right)^2 \right. \\
&\quad \left. + \frac{32}{3\pi} \frac{\Gamma(\eta + 3/2)}{\Gamma(\eta + 3)} \frac{a}{\lambda_{F0}} \left[1 - \eta(\eta + 1) \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{T}{T_{F0}} \right)^2 \right] \right\} \tag{5.36}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
U &= N k_B T_{F0} \left\{ \frac{\eta + 3/2}{\eta + 5/2} + \left(\eta + \frac{3}{2} \right) \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{T}{T_{F0}} \right)^2 \right. \\
&\quad \left. + \frac{32}{3\pi} \frac{\Gamma(\eta + 5/2)}{\Gamma(\eta + 4)} \frac{a}{\lambda_{F0}} \left[1 + \eta(\eta + 3) \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{T}{T_{F0}} \right)^2 \right] \right\} \tag{5.37}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S &= N k_B \left[\left(\eta + \frac{3}{2} \right) \frac{\pi^2}{6} \frac{T}{T_{F0}} \right. \\
&\quad \left. + \frac{8\pi}{3} \frac{\eta(\eta + 3)\Gamma(\eta + 5/2)}{\Gamma(\eta + 4)} \frac{a}{\lambda_{F0}} \frac{T}{T_{F0}} \right] \tag{5.38}
\end{aligned}$$

$$C = Nk_B \left[\left(\eta + \frac{3}{2} \right) \frac{\pi^2 T}{3 T_{F0}} + \frac{8\pi \eta (\eta + 3) \Gamma(\eta + 5/2)}{3 \Gamma(\eta + 4)} \frac{a}{\lambda_{F0}} \frac{T}{T_{F0}} \right] \quad (5.39)$$

denklemleri ile verilmiştir.

Burada

$$T_{F0} = \frac{1}{k_B} \left[\left(\frac{2\pi \hbar^2}{m} \right)^{3/2} \frac{N \Gamma(\eta + 5/2)}{2 \prod_{k=1}^3 (2L_k) \Gamma(1/t_k + 1) / \varepsilon_k^{1/t_k}} \right]^{1/(\eta+3/2)} \quad (5.40)$$

(5.40) denklemi etkileşmeyen Fermi sistemine bağlı Fermi sıcaklığıdır. Yukarıdaki türetimlerde, T/T_{F0} ın ikinci kuvveti kadar terimler sabit tutulmuştur. Fermi enerjisi ve taban durum enerjisi (5.36) ve (5.37) denklemlerinden sırasıyla,

$$E_F = k_B T_{F0} \left[1 + \frac{32 \Gamma(\eta + 3/2)}{3\pi} \frac{a}{\Gamma(\eta + 3) \lambda_{F0}} \right] \quad (5.41)$$

$$U_0 = Nk_B T_{F0} \left[\frac{\eta + 3/2}{\eta + 5/2} + \frac{32 \Gamma(\eta + 5/2)}{3\pi} \frac{a}{\Gamma(\eta + 4) \lambda_{F0}} \right] \quad (5.42)$$

(5.41) ve (5.42) denklemleri türetilir. $t_k \rightarrow \infty$ ve $t_k = 2$ durumları için (5.41) ve (5.42) denklemleri sırasıyla,

$$E_F = k_B T_{F0} \left[1 + \frac{8}{3\pi^{1/2}} \frac{a}{\lambda_{F0}} \right] \quad (5.43)$$

$$U_0 = Nk_B T_{F0} \left[\frac{3}{5} + \frac{4}{3\pi^{1/2}} \frac{a}{\lambda_{F0}} \right] \quad (5.44)$$

ve

$$E_F = k_B T_{F0} \left[1 + \frac{1024}{315\pi^{3/2}} \frac{a}{\lambda_{F0}} \right] \quad (5.45)$$

$$U_0 = Nk_B T_{F0} \left[\frac{3}{4} + \frac{2048}{945\pi^{3/2}} \frac{a}{\lambda_{F0}} \right] \quad (5.46)$$

yukarıdaki eşitliklere indirgenir.

Sıcaklığa karşı bu termodinamik niceliklerin eğrileri sadece dış potansiyelden değil ayrıca atomlar arası kuvvetlerden de etkilenmiştir. Sert bir kutu içinde sınırlandırılmış etkileşen Fermi gazı için, itici etkileşimler kimyasal potansiyeli ve toplam enerjiyi artırır çekici etkileşimler ise azaltır fakat sistemin entropisi ve ısı sığasını değiştirmezler. Etkileşimlerden dolayı μ ve U deki değişiklikler sıcaklıktan bağımsızdır. Sonuçlar beklenildiği gibidir. Çünkü etkileşimlerin etkileri sadece parçacık yoğunluğu (n) ve s-dalga saçılma uzunluğu (a) ile ilgilidir. Sert kutuda sınırlandırılmış sert kürede etkileşen fermiyonların sistemde verilen sayıları değişmeden kalmıştır.

Harmonik potansiyelde tuzaklandırılmış etkileşen Fermi sistemi için, etkileşimler μ ve U kadar S ve C nin değerlerini de etkiler. Bu nicelikler üzerinde etkileşim etkilerine yüksek sıcaklıklardan daha çok, düşük sıcaklıklar önemlidir. Sonuç fiziksel olarak da açıklanabilir. Düşük sıcaklıklarda parçacıklar potansiyelin merkezi etrafına daha yoğun toplanmıştır. Bundan dolayı parçacık yoğunluğuna orantılı olan atomlar arası kuvvetlerden dolayı etkileri daha kuvvetli olacaktır. Ancak yüksek sıcaklıklarda parçacıkların ısı hareketi yoğunlaşan parçacıklar içinde harmonik potansiyeli zayıflatır ve sonuç olarak etkileşimin etkileri küçük olacaktır.

6. BİR DIŞ POTANSİYELDE TUZAKLANDIRILMIŞ ZAYIF ETKİLEŞEN FERMİ GAZININ UZAY VE MOMENTUM DAĞILIMI

6.1. Giriş

Fermiyon gazlarının yoğunluk profilleri geniş olarak açıklanmıştır (Cai ve ark., 2008). Örneğin iyi tanımlanmış bir elektron yoğunluğu, parabolik potansiyel ile sınırlandırılmış iki boyutlu elektron gazı için eşik yoğunluğu ile bulunmuştur (Nelissen ve ark., 2006).

6.2. T=0K Durumunda Fermi Gazın Uzay ve Momentum Dağılımı

Küresel simetrik potansiyelde tuzaklandırılmış zayıf etkileşen Fermi gazı düşünülün (Cai ve ark., 2008):

$$V(r) = \varepsilon_0 \left(\frac{r}{r_0} \right)^t \quad (6.1)$$

Bu ifade de r parçacığın koordinatıdır. ε_0 , r_0 ve t pozitif sabitlerdir. ε_0 , r_0 ve t 'nin farklı değerleri seçilirse çeşitli parçacık potansiyelleri de dahil olmak üzere potansiyel ifadesinin çok genel olduğu görülmektedir.

Ortalama alan yaklaşımında tek parçacık Hamiltonian ifadesi aşağıdaki gibi ifade edilir:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V_{eff}(r) = \frac{p^2}{2m} + V(r) + V_{int}(r) \quad (6.2)$$

p ve m sırasıyla momentum ve tek parçacık kütlesidir. $V_{eff}(r) = V(r) + V_{int}(r)$ etkin potansiyel ve $V_{int}(r)$ atomlar arası etkileşim katkısıdır. Zayıf sert kürede etkileşen Fermi sistem için s-dalgası için iki cisimli sözde potansiyel kullanılarak $V_{int}(r)$,

$$V_{int}(r) = a\lambda^2 k_B T n_r \quad (6.3)$$

denklem (6.3) gibi türetilir.

Burada n_r , r de parçacığın yerel yoğunluğu, a iki atom arasındaki etkileşim uzunluğunu tanımlayan s-dalga saçılma uzunluğudur ve burada zayıf etkileşim düşünüldüğü için $|a|n_r^{1/3} \ll 1$ ve $|a|/\lambda \ll 1$ sağladığı farz edilir.

Sistemin parçacık sayısı büyük olduğunda ve enerji seviye arası parçacığın kinetik enerjisinden çok küçük olduğunda yarı klasik yaklaşım geçerlidir. Bu durumda parçacık enerjisi (6.2) denklemi ile verilen Hamiltonian ile ifade edilebilir ve toplam üzerinden durum denklemi faz uzayı üzerinden integral ile yerine konulabilir. Bundan dolayı hacim başına parçacık sayısı r ve p 'de sırasıyla aşağıdaki gibi ifade edilebilir:

$$n_r = \frac{2}{h^3} \int \theta(\varepsilon_F - H) d^3p \quad (6.4)$$

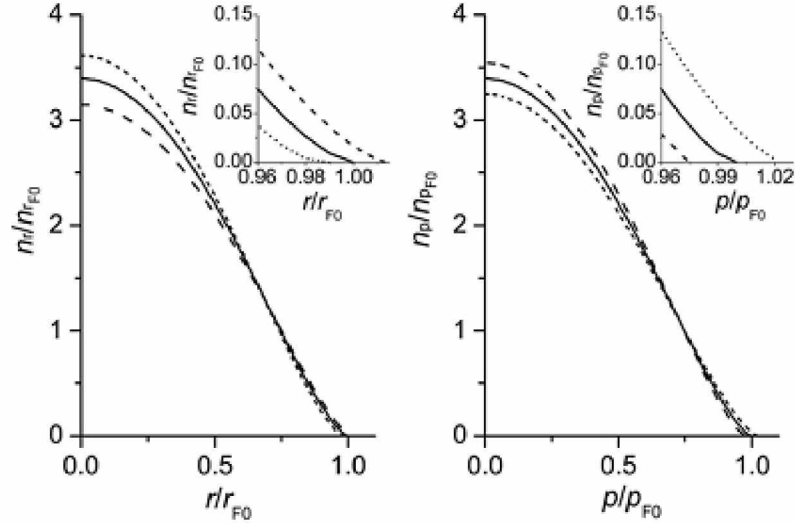
$$n_p = \frac{2}{h^3} \int \theta(\varepsilon_F - H) d^3r \quad (6.5)$$

Burada ε_F sistemin Fermi enerjisidir. (6.4) ve (6.5) denklemleri içine (6.1)-(6.3) denklemleri yerine konulduğunda

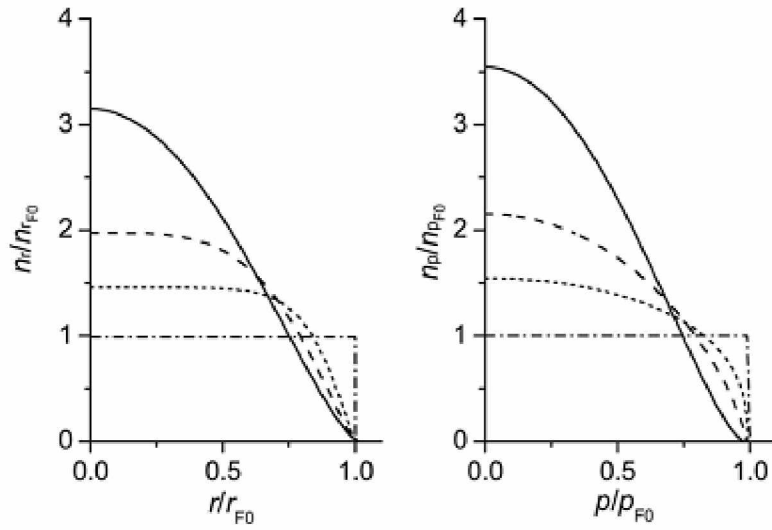
$$n_r = \begin{cases} \frac{8\pi}{3h^3} \left\{ 2m \left[\varepsilon_F - \varepsilon_0 \left(\frac{r}{r_0} \right)^t \right] \right\}^{3/2} \left[1 - a \frac{8}{3h} \left\{ 2m \left[\varepsilon_F - \varepsilon_0 \left(\frac{r}{r_0} \right)^t \right] \right\}^{1/2} \right]^{3/2} & (r < r_F) \\ 0 & (r > r_F) \end{cases} \quad (6.6)$$

$$n_p = \begin{cases} \frac{8\pi r_0^3}{3h^3 \varepsilon_0^{3/t}} \left[\varepsilon_F - \frac{p^2}{2m} - a \frac{4p^3}{3mh} \right]^{3/t} & (p < p_F) \\ 0 & (p > p_F) \end{cases} \quad (6.7)$$

ifadeleri bulunur. Burada $r_F = r_0(\varepsilon_F/\varepsilon_0)^{1/t}$ ve $p_F = (2m\varepsilon_F)^{1/2}$ ifadeleri ile tanımlanabilir.



Şekil 6.1. $a/\lambda_{F0} = 0.05$ (uzun çizgi), $a/\lambda_{F0} = -0.05$ (kısa çizgi) ve $a/\lambda_{F0} = 0$ (düz çizgi) için $T = 0K$ ve $t = 2$ durumunda uzaysal ve momentum dağılım eğrileri. Ekli küçük resimler şekillerin bölgesel büyütülmüş kısımlarıdır (Nelissen ve ark., 2006).



Şekil 6.2. $t = 2$ (düz çizgi), $t = 4$ (uzun çizgi), $t = 8$ (kısa çizgi) ve $t \rightarrow \infty$ (noktalı çizgi) için $T = 0K$ ve $a/\lambda_{F0} = 0.05$ durumunda uzaysal ve momentum dağılım eğrileri (Nelissen ve ark., 2006).

Denklem (6.6) veya (6.7) kullanılarak, etkileşim nedeniyle sadece birinci dereceden düzeltme düşünülürse parçacığın toplam sayısı aşağıdaki gibi elde edilebilir:

$$\begin{aligned}
 N &= \int n_r(r) d^3r = \int n_p(r) d^3p \\
 &= \frac{2\Omega_F^*}{\lambda_F^3} \left[\frac{1}{\Gamma(5/2 + 3/t)} - \frac{32}{3\pi} \frac{1}{\Gamma(3 + 3/t)} \frac{a}{\lambda_F} \right] \quad (6.8)
 \end{aligned}$$

Burada $\Gamma(x) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{x-1} dt$ Gamma fonksiyonudur ve

$$\Omega_F^* = \frac{4\pi r_0^3}{3} \left(\frac{kT_F}{\varepsilon_0} \right)^{3/t} \Gamma(1 + 3/t) \quad (6.9)$$

ifadesi sistemin sözde hacmi olarak verilebilir.

(6.8) denkleminde sistemin Fermi enerjisi aşağıdaki gibi elde edilebilir:

$$\varepsilon_F = \varepsilon_{F0} \left[1 + \frac{32}{3\pi} \frac{1}{\Gamma(3 + 3/t)} \frac{a}{\lambda_F} \right] \quad (6.10)$$

Burada

$$\varepsilon_{F0} = \left[\frac{N \varepsilon_0^{3/t} \Gamma(5/2 + 3/t)}{(8\pi/3) r_0^3 \Gamma(1 + 3/t)} \left(\frac{2\pi \hbar^2}{m} \right)^{3/2} \frac{a}{\lambda_{F0}} \right]^{1/(3/2 + 3/t)} \quad (6.11)$$

ifadesi etkileşmeyen Fermi sisteme bağlı Fermi enerjisidir ve $\lambda_{F0} = \sqrt{2\pi \hbar^2 / m k_B T_{F0}}$ ifadesi ile tanımlanır.

(6.6) ve (6.7) denklemleri kullanılarak, 6.1 ve 6.2 şekillerinden görüldüğü gibi $T=0K$ de farklı dış potansiyel şekilleri ve farklı etkileşim kuvvetleri için $n_r \sim r$ uzaysal dağılım ve $n_p \sim p$ momentum dağılımları ifade edilebilir. Burada $n_{r_{F0}} = N/V_{r_{F0}}$, $n_{p_{F0}} = N/V_{p_{F0}}$, $V_{r_{F0}} = (4/3)\pi r_{F0}^3$, $V_{p_{F0}} = (4/3)\pi p_{F0}^3$, $r_{F0} = (\varepsilon_{F0}/\varepsilon_0)^{1/t}$ ve $p_{F0} = (2m\varepsilon_{F0})^{1/2}$.

6.1 ve 6.2 şekillerinden aşağıdaki gibi bazı önemli sonuçlar elde edilir (Cai ve ark., 2008):

(1) Sırasıyla r_F ve p_F de hem uzaysal hem de momentum dağılımların keskin eşikler gösterdiği şekil 6.1'den görülmektedir. Momentum uzayındaki eşik yoğunluğu iki boyutlu parabolik potansiyelde sınırlandırılmış yüklü parçacıklar için bulunmuştur. Bu $T=0K$ ' de sırasıyla her bir uzayda Fermi küresi olarak isimlendirilen koordinat uzayındaki r_F yarıçaplı küre veya momentum uzayındaki p_F yarıçaplı küre içinde tüm parçacık dağılımını işaret eder. Fermi küresi ve Fermi yüzeyi; katı hal fiziksel elektronikte, elektronların araştırılmasında ki kullanışlılığında ve yoğun katı maddenin optik özelliklerinde önemli kavramlar olduğu bilinmektedir (Gaitanos ve ark., 2004; Shein ve ark., 2006; Hussain ve ark., 2005; Mizutani ve ark., 2004). Ancak referansların

birçoğu Fermi küre kavramını temel olarak momentum uzayıyla sınırlandırmıştır. Burada hem momentum uzayında hem de koordinat uzayını içeren Fermi küre kavramı verilecektir.

(6.6) ve (6.7) denklemlerinden r ve p uzayında Fermi kürelerinin yarıçapı aşağıdaki gibi elde edilebilir:

$$r_F = r_{F0} \left[1 + \frac{32}{3\pi t} \frac{\Gamma(3/2 + 3/t)}{\Gamma(3 + 3/t)} \frac{a}{\lambda_{F0}} \right] \quad (6.12)$$

$$p_F = p_{F0} \left[1 - \frac{4}{3\pi^{1/2}} \left[1 - \frac{4}{\pi^{1/2}} \frac{\Gamma(3/2 + 3/t)}{\Gamma(3 + 3/t)} \right] \frac{a}{\lambda_{F0}} \right] \quad (6.13)$$

Koordinat uzayında itici etkileşimler Fermi küresini büyütürken çekici etkileşimler Fermi küresini küçülttüğünü, fakat momentum uzayında Fermi küresinin büyüklüğünü, itici etkileşimlerin küçülttüğü çekici etkileşimlerin büyüttüğü görülmektedir. Bu da şekil 6.1'in bölgesel kısmından görülmektedir. Sonuçlar fiziksel olarak aşağıdaki gibi açıklanabilir: Fermi momentumu, koordinat uzayında Fermi küresi içindeki düşürülen parçacık yoğunluğundan dolayı küçülmüştür. Sonuç olarak Fermi küresinin büyüklüğü koordinat uzayında genişlemiş ve momentum uzayında itici etkileşimlerin varlığından dolayı küçülmüştür. Çekici etkileşim ters sonuç verecektir.

(2) Sert bir kutu içerisindeki ideal Fermi gazı benzemeyen, r ve p uzaylarında Fermi küresi içindeki parçacık yoğunluğunun sabit olmadığı şekil 6.1'de görülmektedir. Bu birçok ders kitaplarında tartışılmıştır (Pathria, 1977; Huang, 1987). r ve p ile değişen n_r ve n_p değerleri dış potansiyele ve atomlar arası etkileşimlere bağlıdır.

(3) İtici etkileşimler r 'nin küçük değerinde n_r 'nin değerini azalttığı çekiçi etkileşimlerin arttırdığı fakat p 'nin küçük değerinde itici etkileşimler n_p 'nin değerini artırır, çekici etkileşimler azalttığı şekil 6.1'de görülmektedir. Özellikle denklem (6.6), (6.7) ve (6.10)'a göre Fermi küresinin merkezindeki parçacık yoğunluğunu aşağıdaki ifadeler gibi bulunabilir:

$$n_r(r=0) = \frac{8\pi}{3\pi^{3/2} \lambda_{F0}^3} \left\{ 1 - \left[\frac{4}{\pi^{1/2}} - \frac{16}{\pi} \frac{\Gamma(3/2 + 3/t)}{\Gamma(3 + 3/t)} \right] \frac{a}{\lambda_{F0}} \right\} \quad (6.14)$$

$$n_p(p=0) = \frac{8\pi r_0^3}{3h^3} \left(\frac{\varepsilon_{F0}}{\varepsilon_0} \right)^{3/t} \left[1 + \frac{32}{\pi t} \frac{\Gamma(3/2 + 3/t)}{\Gamma(3 + 3/t)} \frac{a}{\lambda_{F0}} \right] \quad (6.15)$$

(4) $T=0K$ 'de uzay ve momentum dağılımı üzerindeki dış potansiyelin etkisinin aynı olduğu şekil 6.2'den gözlenmiştir. Fermi küresinin kenarına yakın yoğunluk t değerinin artması ile artarken her bir Fermi küresinin merkez yakınındaki yoğunluk t parametresinin artması ile azalır. Özellikle $t \rightarrow \infty$ durumunda parçacık yoğunluğu iki Fermi küresinde sabittir. Sonuçlar beklenildiği gibidir. Çünkü $t \rightarrow \infty$ durumunda $r < r_0$ ve $r > r_0$ bölgelerinde sırasıyla $V(r) \rightarrow 0$ ve ∞ gider.

6.3. $T \neq 0K$ Durumunda Fermi gazın Uzay ve Momentum Dağılımı

$T \neq 0K$ olduğu durumda r ve p uzayında birim hacim başına parçacık sayısı sırasıyla aşağıdaki gibi ifade edilmiştir:

$$n_r = \frac{2}{h^3} \int_0^\infty \frac{1}{\exp[\beta(H - \mu)] + 1} d^3p \quad (6.16)$$

$$n_p = \frac{2}{h^3} \int_0^\infty \frac{1}{\exp[\beta(H - \mu)] + 1} d^3r \quad (6.17)$$

Denklem (6.16) ve (6.17) de (6.1)-(6.3) denklemlerini yerine koyarak,

$$n_r \approx \frac{2}{\lambda^3} f_{3/2} \left\{ z \exp \left[-\beta \varepsilon_0 \left(\frac{r}{r_0} \right)^t \right] \right\} \left\{ 1 - \frac{2a}{\lambda} f_{1/2} \left\{ z \exp \left[-\beta \varepsilon_0 \left(\frac{r}{r_0} \right)^t \right] \right\} \right\} \quad (6.18)$$

$$n_p \approx \frac{8\pi r_0^3}{h^3 t} \left(\frac{1}{\beta \varepsilon_0} \right)^{3/t} \left\{ \Gamma \left(\frac{3}{t} \right) f_{3/t} \left[z \exp \left(-\frac{\beta p^2}{2m} \right) \right] - \frac{2a}{\lambda} \int_0^\infty f_0^2 \left[z^{-1} \exp \left(\frac{\beta p^2}{2m} + y \right) \right] f_{3/2} [z \exp(-y)] z \exp \left[-\left(\frac{\beta p^2}{2m} + y \right) \right] y^{\frac{3}{t}-1} dy \right\} \quad (6.19)$$

ifadeleri bulunur.

Fermi integrali aşağıdaki gibi tanımlanır:

$$f_l(x) = \frac{1}{\Gamma(l)} \int_0^\infty \frac{t^{l-1} dt}{x^{-1} e^t + 1} \quad (6.20)$$

$x \leq 1$ olduğu durumda $f_l(x)$,

$$f_l(x) = \sum_{i=1}^{\infty} (-1)^{i-1} \frac{x^i}{i^l} \quad (6.21)$$

şeklinde açılabilir.

n_r koordinat uzayı üzerinden integre edilerek toplam parçacık sayısı,

$$N = \int n_r(r) d^3r = \frac{2\Omega^*}{\lambda^3} \left\{ f_{3/2} + f_{3/t}(z) - \frac{2a}{\lambda} F_{3/2,1/2,3/t}(z) \right\} \quad (6.22)$$

elde edilir.

Burada

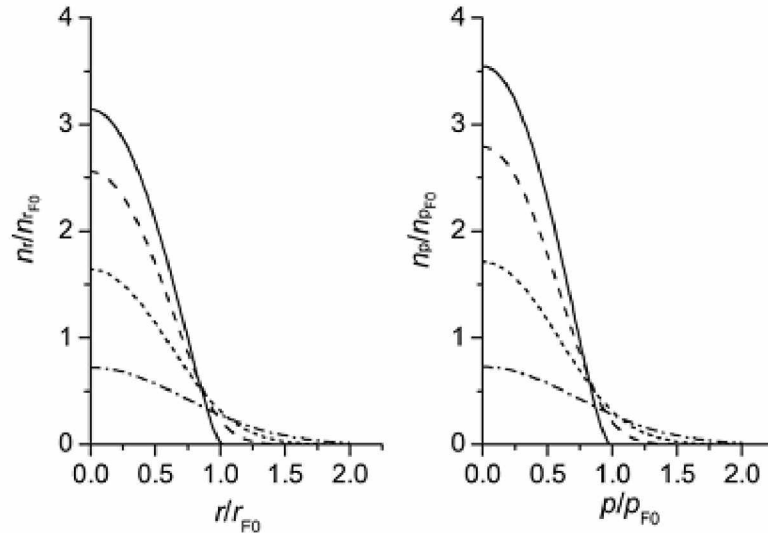
$$F_{l,m,n}(x) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^\infty f_l(xe^{-t}) f_m(xe^{-t}) t^{n-1} dt \quad (6.23)$$

şeklinde ifade edilir.

$x \leq 1$ olduğu durumda ise

$$F_{l,m,n}(x) = \sum_{i,j=1}^{\infty} \frac{(-1)^{i+j} x^{i+j}}{i^l j^m (i+j)^n} \quad (6.24)$$

şeklinde ifade edilebilir.



Şekil 6.3. $T/T_{F0} = 0$ K (düz çizgi), $T/T_{F0} = 0.25$ K (uzun çizgi), $T/T_{F0} = 0.5$ K (kısa çizgi), $T/T_{F0} = 1.0$ K (noktalı çizgi) için $t = 2$ ve $a/\lambda_{F0} = 0.05$ durumunda uzaysal ve momentum dağılım eğrileri (Nelissen ve ark., 2006).

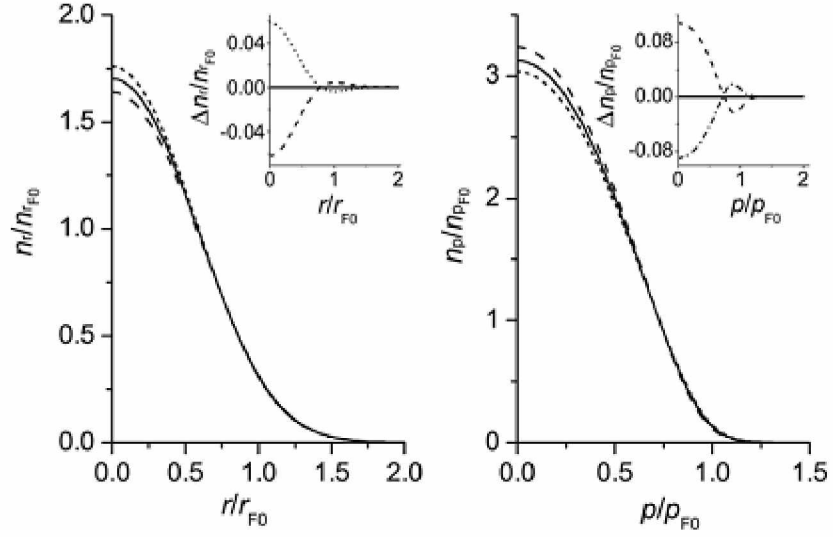
$T \neq 0K$ olduğu durumda etkileşen Fermi gazının uzaysal ve momentum dağılımları (6.18) ve (6.19) denklemleri ile verilmiştir. Burada z (6.22) denklemi ile belirlenmiştir. Daha açık bir şekilde yukarıdaki sonuçları göstermek için, 6.3-6.5 şekillerinde gösterildiği gibi farklı sıcaklıklar, farklı etkileşim kuvvetleri ve dış potansiyelin farklı şekilleri için $n_r \sim r$ ve $n_p \sim p$ nin eğrileri çizilir.

Şekil 6.3'ten görüldüğü gibi $T \neq 0$ olduğu durumda $n_r \sim r$ ve $n_p \sim p$ eğrilerinde ki eşik bulunmaz ve yoğunluk dağılımları r ve p uzayı boyunca düzdür. Daha yüksek sıcaklıklarda fermiyonlar Fermi küresinden daha uzakta bulunurlar. Ayrıca n_r ve n_p üzerinde sıcaklığın etkisi harmonik potansiyel ($t=2$) durumunda aynı olduğu keşfedilmiştir.

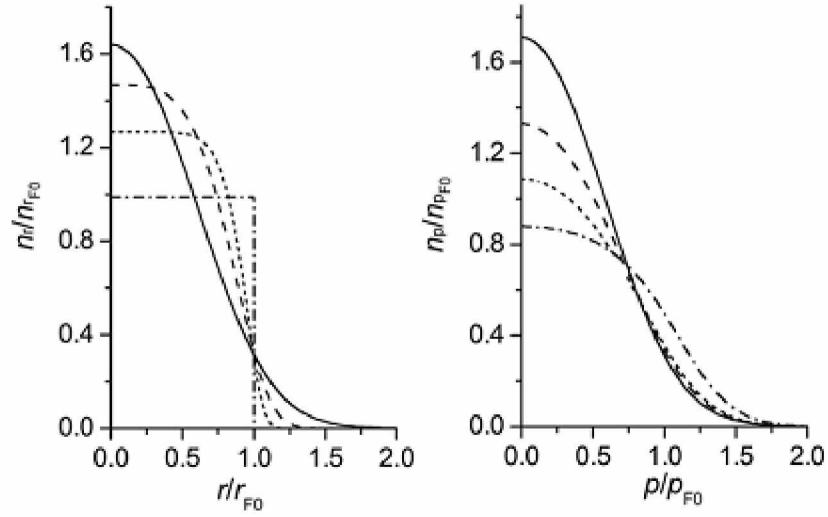
Dağılım üzerindeki atomlar arası etkileşimlerin etkisi yüksek yoğunluklarda oldukça önemli olduğu şekil 6.4'te gösterilmiştir. Fakat düşük yoğunluklarda çok küçüktür. Sonuç fiziksel olarak açıktır. Yüksek yoğunluklarda parçacık yoğunluğuna oranı olan atomlar arası kuvvetlerden dolayı etkiler daha kuvvetli olacaktır. Ancak düşük yoğunluklarda, etkileşim etkileri küçük olacaktır.

Şekil 6.5'te $T \neq 0K$ durumunda uzaysal ve momentum dağılımı üzerine dış potansiyelin etkileri gösterilir. Uzaysal dağılım t 'nin artan değeri ile potansiyelin merkezine yakın tek tip olması bulunmuştur ve $t \rightarrow \infty$ durumda $r < r_{F0}$ bölgesinde

tamamen tek tip olur. Bu $T \neq 0K$ sıcaklığındaki durum ile aynıdır. Ancak sonuç momentum dağılımına uygulanmayabilir.



Şekil 6.4. $a/\lambda_{F0} = 0.05$ (uzun çizgi), $a/\lambda_{F0} = -0.05$ (kısa çizgi) ve $a/\lambda_{F0} = 0$ (düz çizgi) için $T/T_{F0} = 0.5 K$ ve $t = 2$ durumunda uzaysal ve momentum dağılım eğrileri (Nelissen ve ark., 2006).



Şekil 6.5. $t = 2$ (düz çizgi), $t = 4$ (uzun çizgi), $t = 8$ (kısa çizgi) ve $t \rightarrow \infty$ (noktalı çizgi) için $T/T_{F0} = 0.5 K$ ve $a/\lambda_{F0} = 0.05$ durumunda uzaysal ve momentum dağılım eğrileri (Nelissen ve ark., 2006).

7. V(r) POTANSİYELİNDE SINIRLANDIRILMIŞ ELEKTRON GAZININ TABAN DURUM ÖZELLİKLERİ

7.1. Giriş

$v(r) = ar^l$ potansiyelinde sınırlandırılmış sistemin elektron yoğunluğu, kimyasal potansiyel, enerji gibi fiziksel taban durum özellikleri etkileşen ve etkileşmeyen sistemler için karşılaştırılmıştır.

7.2. Teori

Sonlu sıcaklıkta $v(r)$ potansiyeliyle sınırlandırılmış N tane etkileşen elektron içeren iki boyutta sınırlandırılmış sistemin elektron yoğunluğu Fermi integralleri cinsinden aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$n_e(r) = \frac{m^* kT}{\hbar^2 \pi} F_0(\eta) \quad (7.1)$$

Burada m^* elektronların etkin kütlesi, k Boltzman sabiti, $F_0(\eta)$ sıfırıncı mertebeden Fermi integralidir ve logaritmik fonksiyon cinsinden

$$F_0(\eta) = \ln(1 + e^\eta) \quad (7.2)$$

(7.2) eşitliği gibi ifade edilebilir.

Burada $\eta = \frac{\mu - v(r) - V_e(r)}{kT}$ ifadesine eşittir. $V_e(r)$ elektrostatik potansiyel, μ kimyasal potansiyeldir. Toplam parçacık sayısı elektron yoğunluğu cinsinden

$$N = \int_0^{r_0} 2\pi r n_e(r) dr = \frac{2m^* kT}{\hbar^2 \pi} \int_0^{r_0} r \ln(1 + e^\eta) dr \quad (7.3)$$

eşitliği ile ifade edilebilir. İfadede r_0 , yoğunluğun sıfır değerini aldığı noktadır. Bu noktada elektrostatik potansiyel sıfır olarak kabul edilir. Elektron yoğunluğu Poisson denklemi yardımıyla $V_e(r)$ ile ilişkilendirilirse iki boyutlu Thomas-Fermi denklemi

$$\nabla^2 V_e = -\frac{2\pi m^* kT}{\varepsilon \hbar^2 \pi} \ln(1 + e^\eta) \quad (7.4)$$

şeklinde elde edilir.

(7.4) denklemi $T \approx 0 K$ sıcaklığı için aşağıdaki denkleme indirgenir:

$$\nabla^2 V_e = -\frac{2\pi m^* kT}{\varepsilon \hbar^2 \pi} \eta \quad (7.5)$$

Sonsuz sınırlandırma için:

$$v(r) = \begin{cases} 0 & r \leq r_0 \\ \infty & r > r_0 \end{cases} \quad (7.6)$$

(7.5) eşitliği yoğunluk fonksiyonu $n(r)$ cinsinden aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$\frac{\partial^2 n(p)}{\partial p^2} + \frac{1}{p} \frac{\partial n(p)}{\partial p} - \lambda^2 n(p) = 0 \quad (7.7)$$

Burada $p = r/r_0$ ve $\lambda = \sqrt{2m^* r_0^2 / \varepsilon}$ ifadelerine eşittir. (7.7) denkleminin çözümü sıfıncı mertebeden Bessel fonksiyonu cinsinden,

$$n(p) = A I_0(\lambda p) \quad (7.8)$$

eşitliği gibi verilebilir ve A sabiti toplam parçacık sayısından aşağıdaki gibi belirlenebilir:

$$A = \frac{1}{\pi} \frac{1}{\lambda} \frac{Nm^*}{\varepsilon I_1(\lambda)} \quad (7.9)$$

Burada $I_1(\lambda)$ birinci mertebeden Bessel fonksiyonudur. Son olarak sistemin toplam enerjisi,

$$E = \int d^2 r \tau(r) + \int v(r) n(r) d^2 r - \frac{1}{2\varepsilon} \int n(r) n(r') \ln \frac{|r - r'|}{r_0} d^2 r d^2 r' \quad (7.10)$$

(7.10) eşitliğinden hesaplanabilir. Burada TF yaklaşımı içerisinde kinetik enerji yoğunluğu $\tau(r) = \frac{\pi}{2m^*} n(r)^2$ olarak verilir.

Pino, harmonik potansiyelde sınırlandırılmış iki boyutlu kuantum nokta sistemler için Thomas-Fermi denkleminin çözümünü $T=0K$ 'de analitik olarak ifade etmiştir. Fakat (7.5) denkleminin, sınırlandırma potansiyelinin harmonik olmadığı durumda bilinen bir analitik çözümü yoktur. Bu durumda problem sayısal olarak ele alınması gerekir. Bu problemi çözmek için kullanılan sayısal yöntem şu şekilde özetlenebilir;

Burada literatürde benzer durumlar için analitik ifadelerden faydalanılarak $l = 3$ için kimyasal potansiyelin ilk tahmini ile başlanır. Bu zaman kaybını azaltır. Tahmini μ değeri (7.5) denkleminde kullanılarak V_e değeri belirlenir. Toplam parçacık sayısı kullanılarak yeni μ değeri belirlenir. Bu işlem bir önceki kimyasal potansiyel ve yeni bulunan değer arasındaki fark önceden belirlenen tolerans değerinden küçük olana kadar devam eder. $l = 4,5,6 \dots$ değerleri için adımlar tekrarlanır.

Şekil 7.1' de $T/T_F = 0.01$ sıcaklığında etkileşmeyen (a) ve etkileşen (b) sistemler için yoğunluğun radyal uzaklıkla değişimi görülmektedir. Genel olarak etkileşmeyen sistem etkileşen sisteme göre daha yüksek elektron yoğunluğuna sahiptir. Parçacıklar l değeri arttıkça uzayda eşit şekilde dağılmaya başlamıştır. Her iki sistem için de $l=4$ potansiyelinde sınırlandırılmış Fermi gazı en büyük elektron yoğunluğu değerine sahiptir. Etkileşmeyen sistemde r_0 değeri arttıkça $l=2$ ve $l=4$ değerlerinde elektron yoğunluğu sürekli azalırken, $l=10$ ve $l=100$ değerlerinde yaklaşık olarak belli bir değere kadar sabitken belirli bir değerden sonra hızlı bir şekilde azalma gösterir. Etkileşen sistem için $l=4$, $l=10$ ve $l=100$ değerleri için elektron yoğunluğu, r_0 değeri arttıkça belirli bir değere kadar yavaş yavaş artar. Belirli bir değerden sonra azalır.

Şekil 7.2' de etkileşen ve etkileşmeyen sistemler için kimyasal potansiyelin l katsayısına bağlı değişimi gösterilmektedir. Şekilde de görüldüğü gibi l katsayısı arttıkça kimyasal potansiyel değeri azalmaktadır. Sabit bir l değeri için etkileşen sistemin enerjisi etkileşmeyen sisteme göre daha büyük olduğu söylenebilir. Enerji değerleri her iki sistem için l katsayısına bağlı olarak paralel davranış gösterir.

Şekil 7.3'de sınırlandırmadan kaynaklanan enerjinin l katsayısına bağlı değişimi etkileşen ve etkileşmeyen sistemler için gösterilmektedir. l 'nin artan değeri ile birlikte

her iki sistemin enerjisi azalmaktadır. Etkileşen sistemin enerjisi etkileşmeyen sisteme göre daha büyüktür.

Kinetik enerjinin l katsayısına bağlı değişimi etkileşen ve etkileşmeyen sistemler için şekil 7.4'de gösterilmiştir. Başlangıçta l 'nin artan değeri ile birlikte her iki sistem için de enerji değerinde çok az bir artış görülmektedir. Fakat belli bir değerden sonra kinetik enerji değeri l katsayısının artmasıyla birlikte azalma göstermektedir. Etkileşmeyen sistemin enerjisi etkileşen sisteme göre daha büyük değere sahiptir. Her iki sistemin de enerji değeri yaklaşık birbirleriyle paralel olarak değişme göstermektedir.

Şekil 7.5'te etkileşimden kaynaklanan enerjinin l katsayısına bağlı değişimi gösterilmektedir. Belli bir değere kadar l değeri arttıkça azalma parabolik bir biçimde değişirken belirli bir l değerinden sonra enerji değerindeki değişim çok az değişir.

Şekil 7.6'da toplam enerjinin l katsayısına bağlı değişimi gösterilmektedir. etkileşen sistemin toplam enerjisi etkileşmeyen sisteme göre daha büyüktür. Genel olarak l değeri arttıkça enerji değeri azalmaktadır. Fakat belirli bir l değerine kadar artış hızlı iken belirli bir l değerinden sonra azalma çok az değişmektedir. Her iki sistem de birbirine paralel değişim göstermektedir.

Kimyasal potansiyelin sıcaklığa bağlı değişimi etkileşen ve etkileşmeyen sistemler için şekil 7.7'de analiz edilmiştir. Beklenildiği gibi Fermi sisteminin temel özellikleri sınırlandırmanın şekline bağlı değildir. Özellikle sistemin kimyasal potansiyeli sıcaklıkla azalır. Sınırlandırma şeklinden bağımsızdır. Tüm sıcaklıklarda etkileşen ve etkileşmeyen durum için $l=4$ potansiyelinde sınırlandırılmış sistemin kimyasal potansiyeli diğer tüm potansiyeller için en büyük değere sahiptir. $l=2$ potansiyelinde sınırlandırılmış sistemin kimyasal potansiyeli her iki sistem için de düşük ve orta sıcaklıklarda yüksek değere sahipken yüksek sıcaklıklarda daha düşük değere sahiptir. $l=10$ ve $l=100$ potansiyellerinde sınırlandırılmış sistemlerin ise etkileşen ve etkileşmeyen durum için paralel davranış gösterdiği şekilde görülmektedir. Etkileşen sistemin kimyasal potansiyeli etkileşmeyen sisteme göre tüm potansiyelerde daha büyük değere sahiptir.

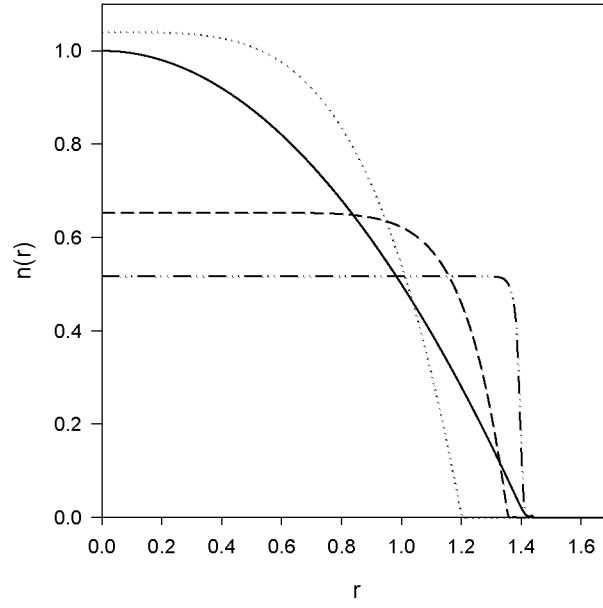
Şekil 7.8'de dört farklı l değeri için ($l=2,4,10,100$) etkileşen ve etkileşmeyen sistemler için r_0 değeri ile elektron yoğunluğunun değişimi incelenmiştir. Şekilde

etkileşmeyen sistem için l değeri büyüdükçe elektron yoğunluğunun düzleştiği görülmektedir. Fakat belirli bir değere ulaştıktan sonra elektron yoğunluğu hızlı bir şekilde azalma göstermektedir. Sıcaklık arttıkça merkezdeki yoğunluk tüm l değeri için de azalmaktadır. En hızlı yoğunluk azalması $l=2$ (düz çizgi) potansiyelinde sınırlandırılmış sistemde görülmektedir. Ayrıca sıcaklığın artmasıyla birlikte r_0 değeri yayılarak artmaktadır.

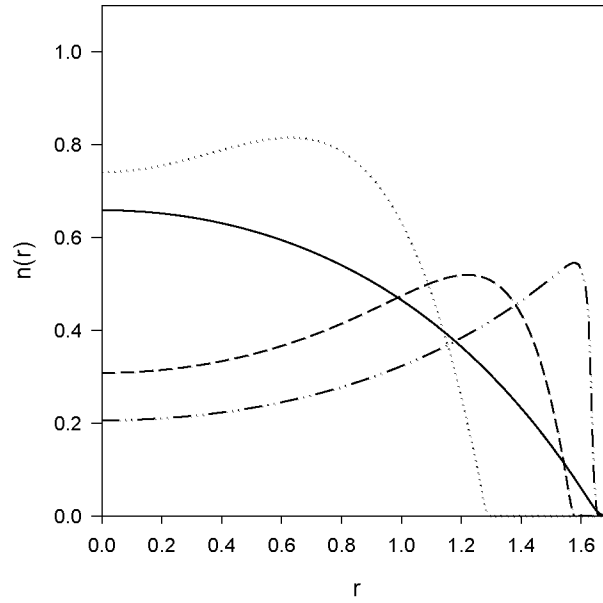
Etkileşen sistem için r_0 ile yoğunluk incelendiğinde $l=2$ potansiyelinde sınırlandırılmış sistem hariç diğer potansiyellerde merkezdeki elektron yoğunluğu yavaş yavaş artarken daha sonra hızlı bir şekilde azalma gösterir. Bu davranış l 'nin artan değerleri için daha net olur.

Etkileşmeyen sistem ile etkileşen sistem karşılaştırılacak olursa etkileşmeyen sistemin merkez yoğunluğu etkileşen sisteme göre daha büyüktür. Her iki sistemde de sıcaklık artışı ile birlikte merkez yoğunluğunda azalma görülür. Bu azalma etkileşmeyen sistemde daha belirgindir.

$$T/T_F=0.01$$

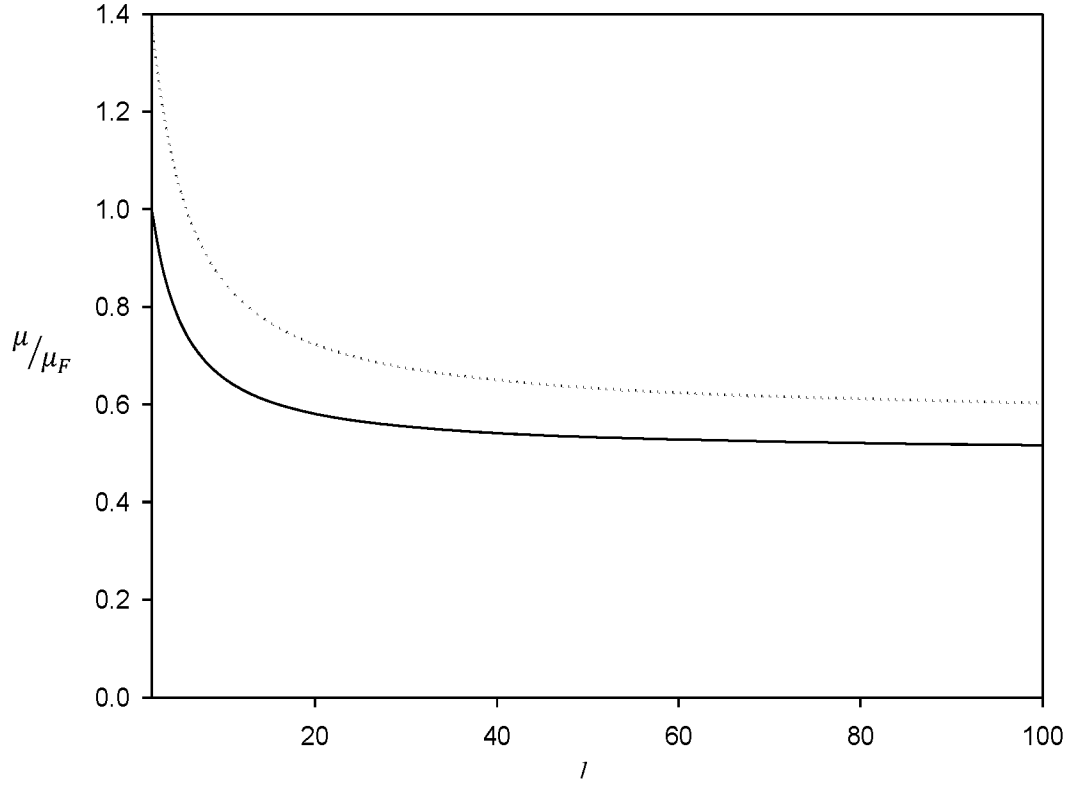


(a)

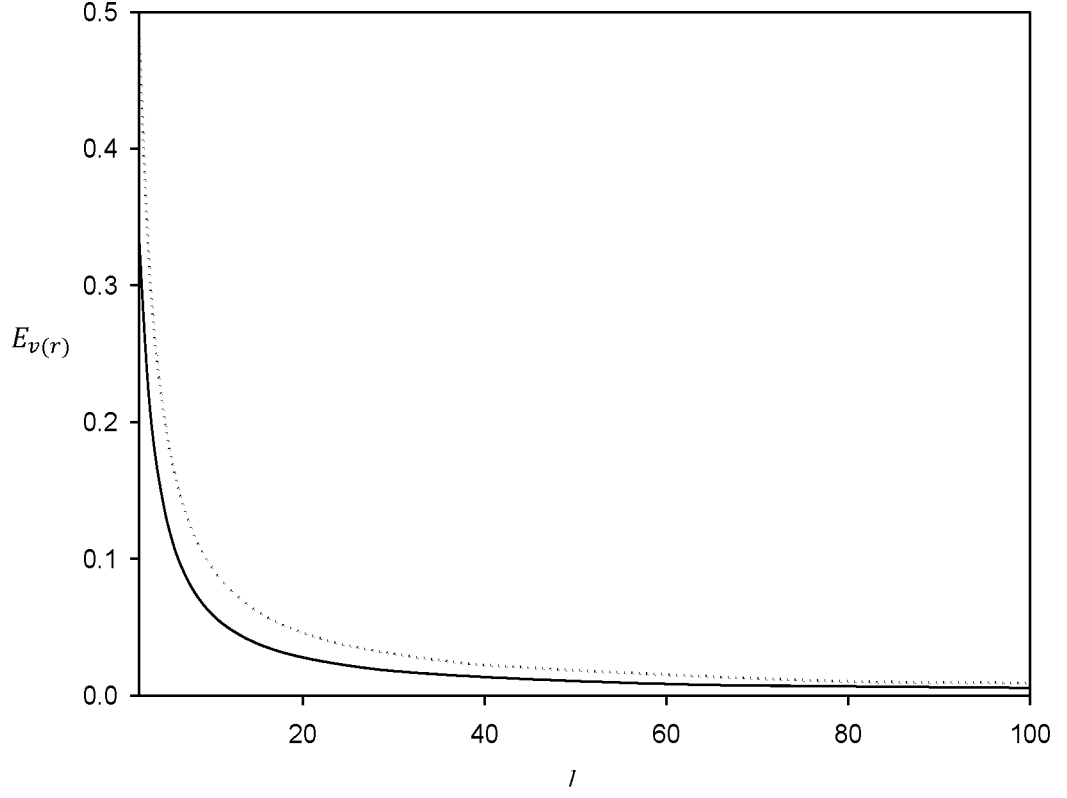


(b)

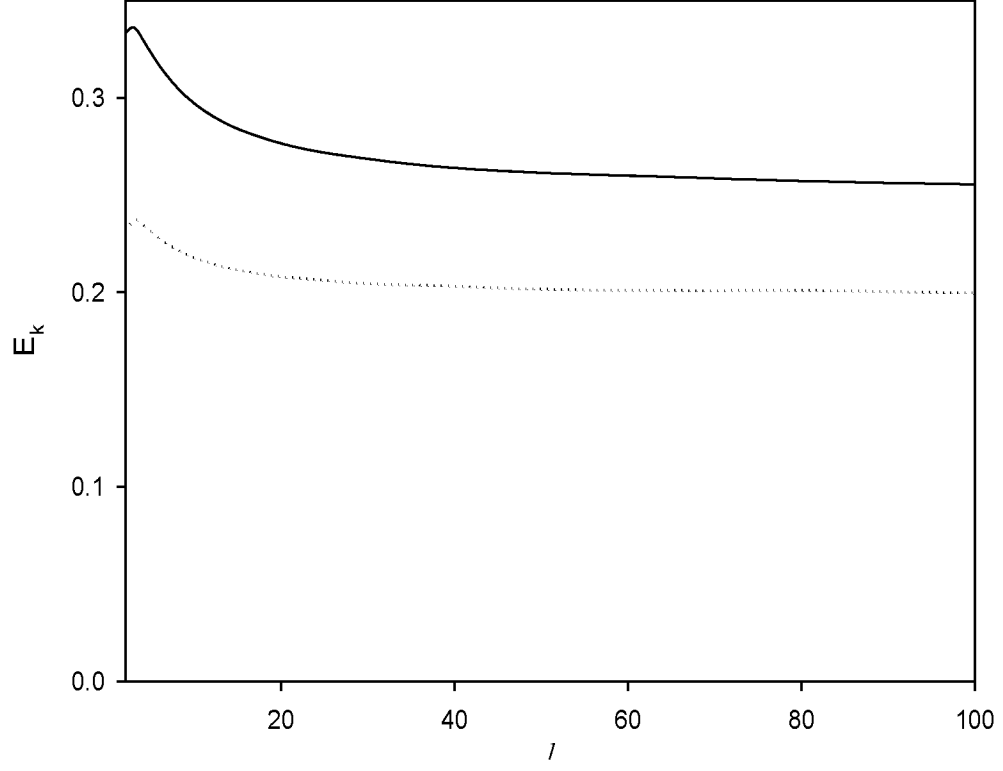
Şekil 7.1. $T/T_F = 0.01$ sıcaklığında $V(r) = \alpha r^l$ potansiyelinde sınırlandırılmış Fermi gazı için yoğunluğunun radyal uzaklıkla değişimi. [$\alpha = \frac{1}{2}$, ($l=2$, düz çizgi; $l=4$, nokta; $l=10$, kısa çizgi; $l=100$, noktalı çizgi)] (a) etkileşmeyen sistem, (b) etkileşen sistem



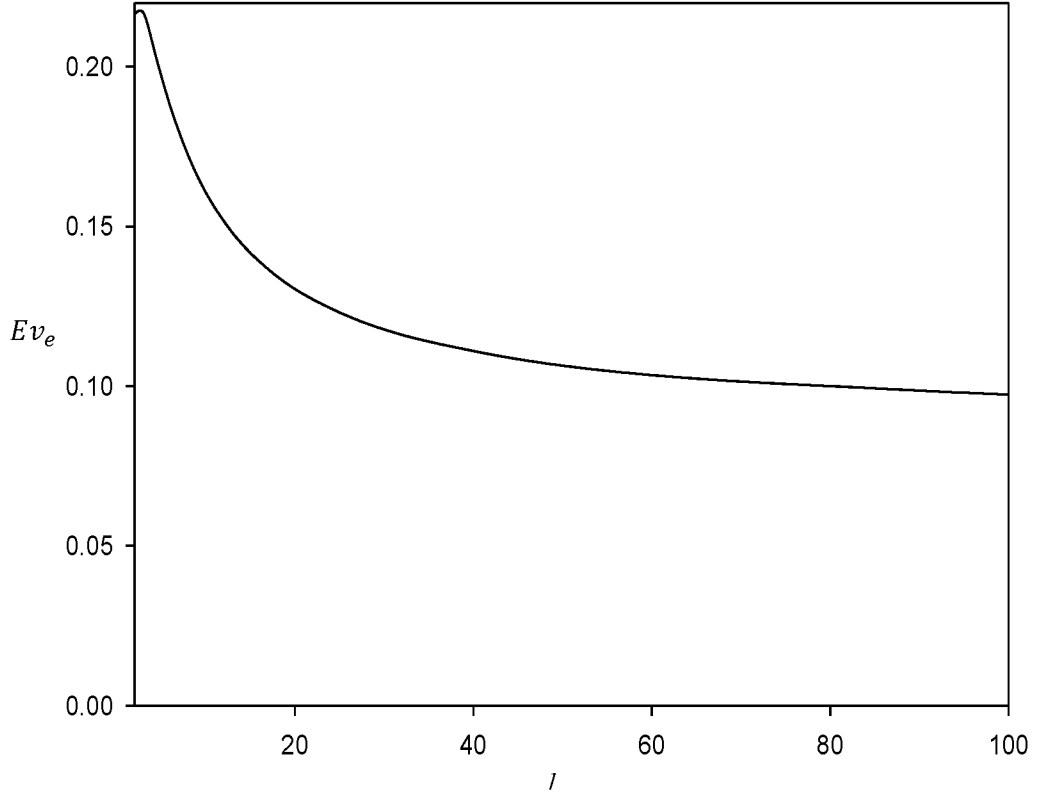
Şekil 7.2. Etkileşen (nokta) ve etkileşmeyen (düz çizgi) sistemlerde kimyasal potansiyelin l katsayısına bağlı değişimi



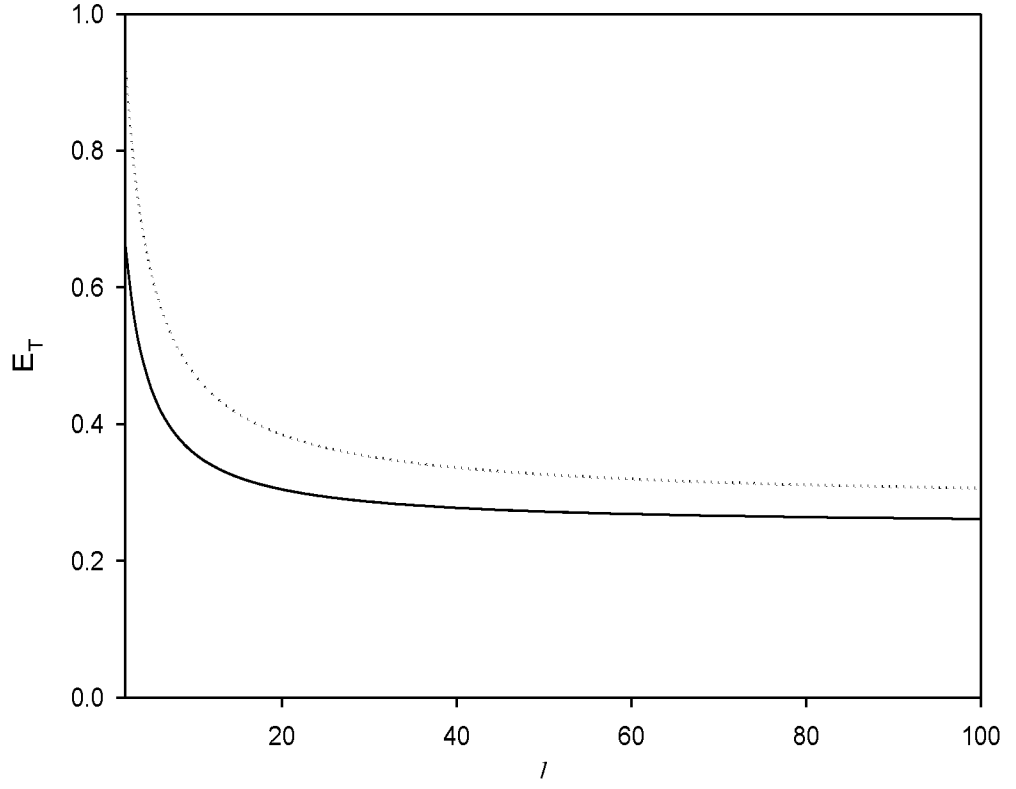
Şekil 7.3. Sınırlandırmadan kaynaklanan enerjinin l katsayısına bağlı değişimi
(etkileşmeyen, düz çizgi; etkileşen, nokta)



Şekil 7.4. Kinetik enerjinin l katsayısına bağlı değişimi
(etkileşmeyen, düz çizgi; etkileşen, nokta)

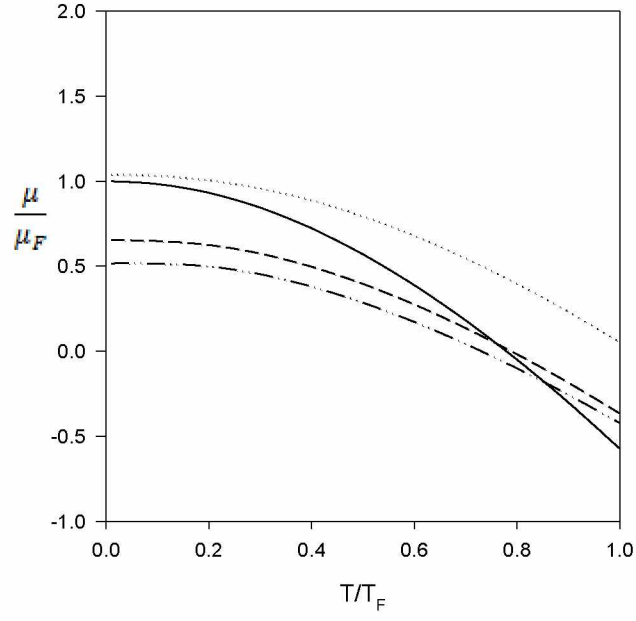


Şekil 7.5. Etkileşimden kaynaklanan enerjinin l katsayısına bağlı değişimi

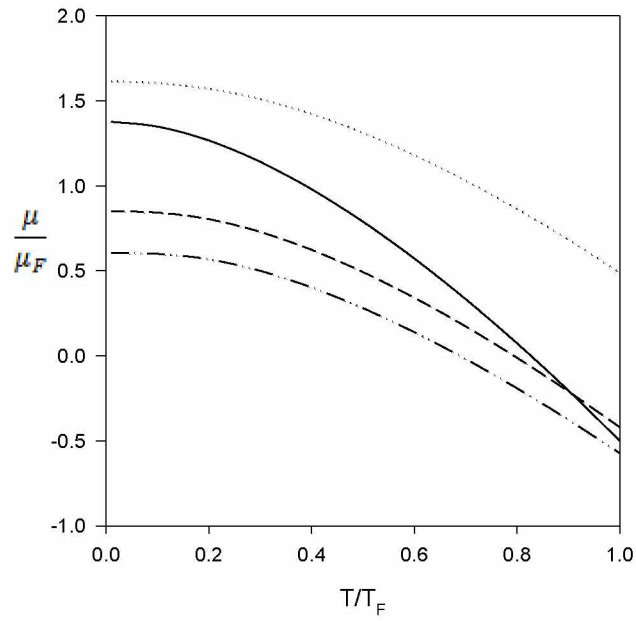


Şekil 7.6. Toplam enerjinin l katsayısına bağlı değişimi

(etkileşmeyen, düz çizgi; etkileşen, nokta)

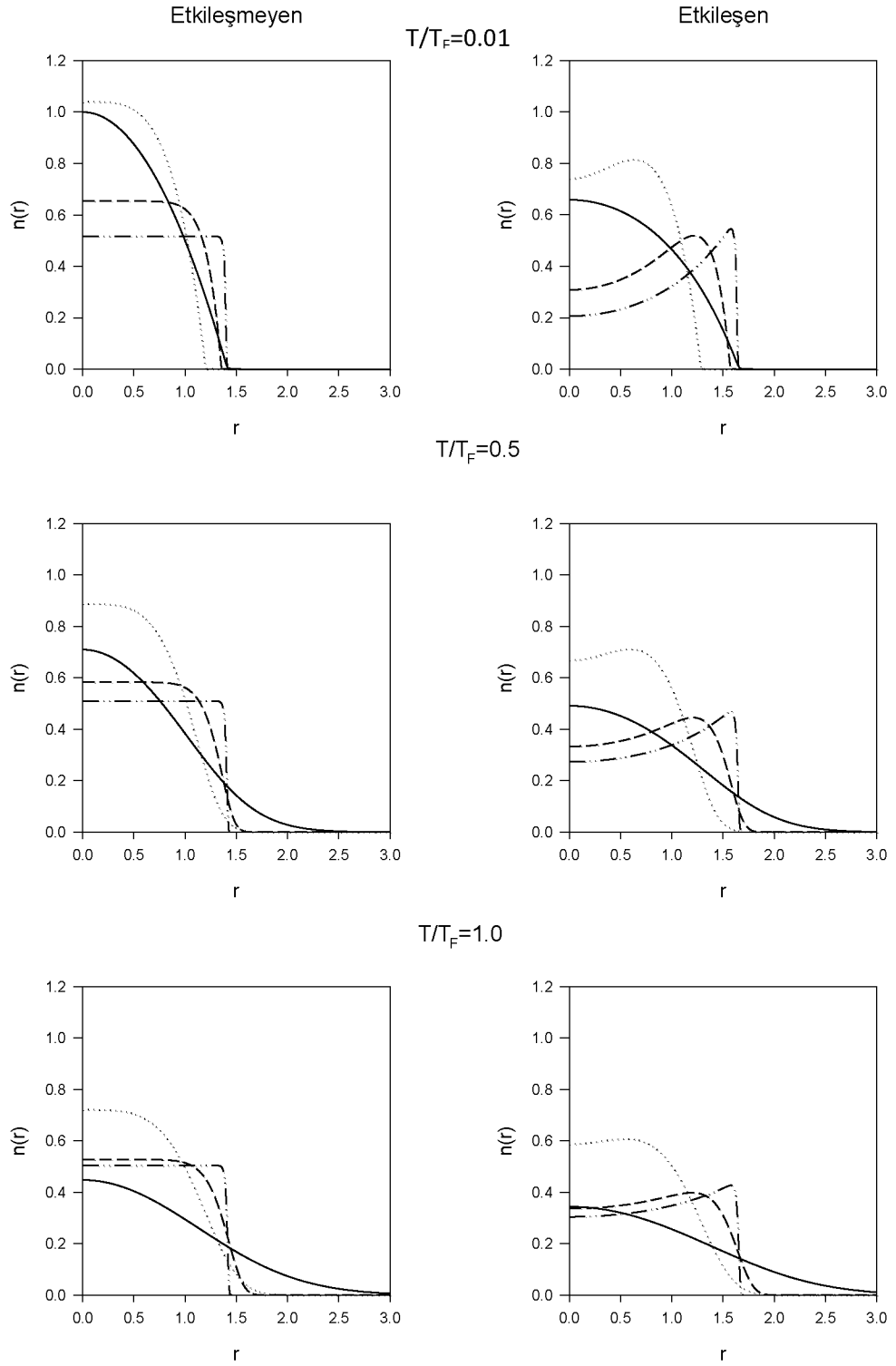


(a)



(b)

Şekil 7.7. Kimyasal potansiyelin sıcaklıkla değişimi. ($l=2$, düz çizgi; $l=4$, nokta; $l=10$, kısa çizgi; $l=100$, noktalı çizgi) (a) etkileşmeyen sistem, (b) etkileşen sistem



Şekil 7.8. $V(r) = ar^l$ potansiyelinde sınırlandırılmış Fermi gazının etkileşen ve etkileşmeyen sistemler için $T/T_F = 0.01$, $T/T_F = 0.5$, $T/T_F = 1.0$ sıcaklıkları için yoğunluğun radyal değişimi [($l=2$, düz çizgi; $l=4$, nokta; $l=10$, kısa çizgi; $l=100$, noktalı çizgi)]

SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu tez çalışmasında, Fermi gazının termodinamik özellikleri, sınırlandırma şekli ve sıcaklık ile değişimi incelenmiştir. Öncelikle Fermi gazının davranışı yüksek sıcaklık ve düşük yoğunluk gibi bazı özel durumlar için ısı sığası, basıncı gibi temel özellikleri incelenmiştir. Daha sonra n boyutta tuzaklandırılmış Fermi gazının fiziksel özellikleri açıklanmıştır. Relativistik Thomas-Fermi modelinin şekli gösterilmiştir. Kuvvet kanun potansiyelinde tuzaklandırılmış Fermi gazının düşük sıcaklıklarda özellikleri incelenmiştir. Sistemin fiziksel özelliklerinde sıcaklık değişimi, sınırlandırma şekli, Coulomb etkileşimlerinin etkileri de ele alınmıştır. Thomas-Fermi yaklaşımının etkinliği literatürde bilinen sonuçlar ile karşılaştırılarak kontrol edilmiştir.

Sınırlandırılan uzay içerisindeki parçacık sayısı artırıldığında geleneksel yöntemlerle hesaplama yapmak oldukça zor hale gelir. Bu nedenle çok sayıda parçacık içeren nokta yapıların elektronik özelliklerini araştırmak için istatistiksel yöntemlerden biri olan T-F yöntemi seçilmiştir.

T-F modeli elektrik potansiyelini elektrik yoğunluğu ile ilişkilendirerek Fermi gazının fiziksel özelliklerinin araştırılmasını sağlar. Bu amaçla $v(r) = ar^l$ potansiyelinde sınırlandırılmış Fermi gazının farklı l değerleri için $T=0K$ sıcaklığında etkileşen ve etkileşmeyen sistemler için elektron yoğunluğu, kimyasal potansiyel, enerji gibi fiziksel özelliklerin değişimi gösterilmiştir. Ayrıca farklı sıcaklıklar için elektron yoğunluğunun radyal yarıçap ile değişimi dört farklı l değeri için incelenmiştir. Kimyasal potansiyelin sıcaklıkla değişimine etkileşen ve etkileşmeyen sistemler karşılaştırılarak bakılmıştır. Etkileşen ve etkileşmeyen sistemler için parçacık sayısı ve sıcaklığın sistemin fiziksel özelliklerinin belirlenmesindeki etkisi araştırılmıştır. Hesaplamalar farklı parçacık sayıları ve farklı sınırlandırma şiddetleri için tekrarlanmıştır.

Çok iyi biliniyor ki, T-F yaklaşımı yarı klasik bir yaklaşımdır ve hesaplamalardaki etkinliği parçacık sayısının artması ile artar. Bununla birlikte pek çok çalışma T-F yaklaşımının çok küçük sayıda elektrondan oluşan sistemlerde de iyi sonuç verdiğini göstermektedir (Bhaduri vd. 1996; Bruun ve Brunett 1998; Vignolo vd. 2000; Yoshimoto 2003).

Sonuç olarak, iki boyutlu sistemin fiziksel özellikleri çeşitli analitik, nümerik ve istatistiksel yöntemler kullanılarak araştırılmıştır. Bu tez çalışmasındaki elde edilen sonuçlar, çok sayıda parçacık içeren sistemlere uygulanabilir. Bununla birlikte manyetik alan, elektrik alan gibi etkilerin, iki boyutta sınırlandırılmış sistemin fiziksel özelliklerinin belirlenmesindeki rolü T-F yaklaşımı ile belirlenebilir.

Sınırlandırılmış Fermi sistemleri astronomi, atom fiziği , yarıiletken fiziği gibi pek çok alanda teorik ve deneysel olarak incelenmektedir. Günümüzde lazer diotlar, hafızalama sistemleri, kuantum bilgisayarları gibi pek çok sistem sınırlandırılmış Fermi sistemi gibi kabul edilmekte bu istemlerin fiziksel özellikleri istatistiksel yöntemler aracılığı ile araştırılmaktadır. Burada teorik olarak elde edilen sonuçlar, daha sonra deneysel olarak oluşturulacak yapıların fiziksel özelliklerini incelemede ışık tutacaktır.

KAYNAKLAR

- Abraham, E.R.I., McAlexander, W.I., Gerton, J.M., Hulet, R.G., Cote, R., Dalgarno, A., 1997, Triplet s-wave resonance in ${}^6\text{Li}$ collisions and scattering lengths of ${}^6\text{Li}$ and ${}^7\text{Li}$, *Phys. Rev. A* 55, R3299-3302.
- Anderson, M.H., Matthews, J.R., Cornell, C.E., 1995, *Science* 269, 198-201.
- Anderson, M.H., Ensher J.R., Matthews, M.R., Wieman, C.E. and Cornell, E.A., 1995 *Science*, 269, 198.
- Bagnato, V., Pritchard, D.E. and Kleppner, D., 1987, Bose-Einstein condensation in an external potential, *Phys. Rev. A* 35, 4354.
- Bangura, A.F., Fletcher, J.D., Carrington, A., Levallois, J., Nardone, M., Vignolle, B., Heard, P.J., Doiron-Leyraud, N., LeBoeuf, D., Taillefer, L., Adachi, S., Proust, C., Hussey, N.E., 2008, *Phys. Rev. Lett.* 100, 047004.
- Bender, C.M., Boettcher, S. and Lipatov, L., 1992, *Phys. Rev. D* 46, 5557.
- Bender, C.M. and Boettcher, S., 1994, *Phys. Rev. D* 51, 1875.
- Bender, C.M., Boettcher, S. And Mead L.R., 1994, *J. Math. Phys.* 35, 368.
- Bender, C.M. and Milton, K.A., 1994, *Phys. Rev. D* 50, 6547.
- Bender, C.M., 1995, *Am. J. Phys.* 63, 1011.
- Bertone, G., and Ruffini, R., 2000, Proceeding of the 3rd Iera Network Workshop, Cherubini, C. and Ruffini, R. Eds., *SIF*.
- Bethe, H.A. and Marshak, R.E., 1940, *Astrophys. J*, 91, 239.
- Bhaduri, R.K., Das Gupta, S., Lee, S.J., 1990, *Am. J. Phys.* 58, 983.
- Bradley, C.C., Sackett, C.A., Tollett, J.J., Hulet, R.G., 1995, *Phys. Rev. Lett.* 75, 1687-1690.
- Bruun, G.M., Burnett, 1998, *Phys. Rev. A.*, Interacting Fermi gas in a harmonic trap, 58, 2427.
- Busch, T., et al., 1998, *Europhys. Lett.*, 44, 1.
- Chen, L., Yan, Z., Li, M. and Chen, C., 1998, *J. Phys. A: Math. Gen.* 31 8289.
- Chen, Y.J., Ma, H.R., 2001, *Chin. Phys. Lett.* 18, 33.
- Chou, T.T., Yang, C.N., Yu, L.H., 1996, *Phys. Rev. A* 53, 4257-4259.
- Davis, K.B., Mewes, M.O., Andrew, M.R., van Druten, N.J., Durfee, D.S., Kurn, D.M., Ketterle, W., 1995, *Phys. Rev. Lett.*, 75, 3969.
- DeMarco, B., Jin, D.S., 1998, *Phys. Rev. A*, Exploring a quantum degenerate gas of fermionic atoms, 58, R4267.
- DeMarco, B., Jin, D.S., 1999, *Science*, 285, 1703.

- Elfimov, I.S., Sawatzky, G.A., Damascelli, A., 2008, *Phys. Rev. B* 77, 064509.
- Ensher, J.R., Jin, D.S., Matthews, M.R., Wiemann, C.E. and Cornell, E.A., 1996, *Phys. Rev. Lett.*, 77, 4984.
- Fermi, E., 1928, *Rend. Acc. Lincei*, 6, 602.
- Ferririnho, J., Ruffini, R. and Stella, L., 1980, *Phys. Lett.* 91B, 314.
- Gaitanos, T., Fuchs, C., Wolter, H.H., 2004, *Nucl. Phys. A* 741, 287-304.
- Giorgini, S., Pitaevskii, L.P., Stringari, S., 1996, *Phys. Rev. A*, Condensate fraction and critical temperature of a trapped interacting Bose gas, 54, R4633.
- Giorgini, S., Pitaevskii, L.P., Stringari, S., 1997, *Phys. Rev. Lett.*, 78, 3987.
- Giorgini, S., Pitaevskii, L.P. and Stringari, S., 2008, *Rev. Mod. Phys.* 80, 1215.
- Griffiths, D.J., 1995, *Introduction to Quantum Mechanics*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey.
- Grosche, C. and Steiner, F., 1995, *J. Math. Phys.* 36, 2354.
- Gülveren, B., Atav, Ü., Tomak, M., 2005, Electronic properties of a large quantum dot at a finite temperature, *Physica E*, 28, 482.
- Gülveren, B., Atav, Ü., Tomak, M., 2005, *Physica E*, 30, 143.
- Gülveren, B., Atav, Ü., Tomak, M., 2009, *JOAM-Symposia*, 1, 483.
- Gülveren, B., Atav, Ü., Tomak, M., 2010, *Int. J. of Mod. Phys. B*.
- Huang, K., 1987, *Statistical Mechanics*, Wiley, New York.
- Huang, K., 1987, *Statistical Mechanics 2nd edn.*, Wiley, New York.
- Hussain Reshak, Ali, Auluck, S., 2005, *Physica B* 358, 158-165.
- Holland, M.J., DeMarco, B., Jin, D.S., 2000, Evaporative cooling of a two-component degenerate Fermi gas, *Phys. Rev. A*, 61, 053610.
- Hore, S.R., Frankel, N.E., 1975, Thermodynamic functions of an ideal Fermi gas in the intermediate quantum region, *Phys. Rev. A*. 12, 1617.
- Howe, K., Lima, A.R., Pelster, A., 2009, *A. EPJD*, 54, 667.
- Imamoğlu, A., You, L., 1994, *Phys. Rev. A*, 50, 2642.
- Javanainen, J., Ruostekoski, J., 1995, *Phys. Rev. A*, 52, 3303.
- Karabulut, E.Ö., Koyuncu, M., Tomak, M., 2010, *Physica A*, 389, 1371.
- Koelman, J.M.K.V.A., et al., 1987, *Phys. Rev. Lett.*, 59, 676.
- Köhl, M., 2006, *Phys. Rev. A*. 73, 031601(R).
- Kuang, L.M., Wang, F.B. and Zhou, Y.G., 1993, *Phys. Lett. A*. 183,1.

- Kuang, L.M. and Chen, X., 1994, *Phys. Rev. A*. 50, 4228.
- Kuang, L.M. and Chen, X., 1994, *Phys. Lett. A*. 186, 8.
- Li, M., Yan, Z., Chen, J., Chen, C., 1998, Thermodynamic properties of an ideal Fermi gas in an external potential with $U=br^l$ in any dimensional space, *Phys. Rev. A* 58, 1445-1449.
- Li, M., Fu, H., Luo, Y., Wang, Y., 2002, *Phys. Lett. A*. 301, 340.
- Lieb, E.H., 1981, *Rev. Mod. Phys.* 63, 151.
- Lin, D.H., 1997, *J. Math. Gen.* 30, 3201.
- Lundqvist, S. and March, N., 1983, *Theory of the Inhomogeneous Electron Gas*, New York, Plenum.
- Men, F., Lu, H., Zhu, H., 2009, *Prog. Nat. Sci.*, 19, 121.
- Menon, V.J. and Agrawal, D.C., 1998, *J. Phys. A: Math. Gen.* 31, 1109.
- Mewes, M.O., Ferrari, G., Schreck, F., Sinatra, A., Salomon, C., 1999, *Phys. Rev. A*, 61, 011403.
- Miao, S., 1987, *Coll. Phys.*, in Chinese, 7 (5) 19.
- Miranowicz, A., Piatek, K. and Tanas, R., 1994, *Phys. Rev. A*. 50, 3423.
- Mizutani, U., Takeuchi, T., Sato, H., 2004, *Prog. Mat. Sci.* 49, 227-261.
- Nelissen, K., Matulis, A., Partoens, B., Kong, M., Peeters, F.M., 2006, *Phys. Rev. E* 73, 016607.
- Noronha, J.M.B., Toms, D.J., 2000, *Phys. Lett. A* 267, 276-280.
- Oliva, J., 1989, *Phys. Rev. B*, 39, 4204.
- Pathria, R.K., 1977, *Statistical Mechanics*, Pergamon, New York.
- Patton, K.R., Geller, M.R., Blencowe, M.P., 2005, *Physica A*, 357, 427.
- Pino, R., 1998, *PRB*, 58, 4644.
- Puglia, S.J., Bhattacharyya, A., Furnstahl, R.J., 2003, *Nuc. Phys. A*. 723, 145.
- Puente, A., Casas, M., Serra, L., 2000, *Physica E*, 387.
- Roy, B. and Roy, P., 1998, *J. Phys. A: Math. Gen.* 31,1109.
- Roth, R., Feldmeier, H., 2001, Effective s - and p -wave contact interactions in trapped degenerate Fermi gases, *Phys. Rev. A*, 64, 043603.
- Roth, R., Feldmeier, H., 2001, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 34, 4629.
- Ruffini, R. and Stella, L., 1981, *Phys. Lett. B*102, 6.
- Salasnich, L., 2000, *J. of Mat. Phys.*, 41, 8016.

- Sami, M. Al-Jaber, 1998, Fermi gas in D-Dimensional space, *International Journal of Theoretical Physics*, 38, 3.
- Schneider, J., Wallis, H., 1998, Mesoscopic Fermi gas in a harmonic trap, *Phys. Rev. A*, 57, 1253.
- Shein, I.R., Medvedeva, N.I., Ivanovskii, A.L., 2006, *Comput. Matter. Sci.* 36, 203-206.
- Shi, H. and Zheng, W., 1997, Critical temperature of a trapped interacting Bose-Einstein gas in the local-density approximation, *Phys. Rev.*, A 56 1046.
- Shi, H., Zheng, W., 1998, *Physica A*, 258, 303.
- Sinha, S., 2000, *Physica E*, 8, 24.
- Spruch, L., 1991, Pedagogic notes on Thomas-Fermi theory (and on some improvements): atoms, stars, and the stability of bulk matter, *Mod. Phys.* 63, 151.
- Srivastava, M.K., Bhaduri, R.K., Law, J., Murthy, M.V.N., 2000, *Can. J. Phys.* 78, 9-19.
- Stoof, H.T.C., Houbiers, M., Sackett, C.A., Hulet, R.G., 1996, *Phys. Rev. Lett.*, 76, 10.
- Su, G., Chen, J., Chen, L., 2003, Low-temperature behavior of a weakly interacting Fermi gas trapped in a power-law potential, *Physcs Letters A*, 315, 109-119.
- Su, G., Chen, J., Chen, L., 2004, *Phys. Lett. A* 326, 252-258.
- Terashima, T., Uji, S., Nagao, Y., Yamaura, J., Hiroi, Z., 2008, Fermi surface in the superconducting β -pyrochlore oxide CsOs_2O_6 , *Phys. Rev. B* 77, 064509.
- Thomas, L.H., 1927, Proc. Cambr. Phil. Soc., 33, 542.
- Toms, D.J., 2005, *Ann.of Phys.* 320, 487.
- Vichi, L., Amoruso, M., Minguzzi, A., Stringari, S., Tosi, M.P., 2000, *Eur. Phys. J. D.*, 11, 335.
- Vidal, J., Mouhanna, D., Giamarchi, T., 2002, *Phys. Rev. B*, 65, 014201.
- Xiong, H., Liu, S., Huang, G., 2003, *Phys. Lett. A*. 318, 281.
- Yan, Z., Li, M., Chen, L., Chen, C. and Chen, J., 1999, Density of states and thermodynamic properties of an ideal system trapped in any dimension, *J. Phys. A: Math. Gen.*, 32, 4069-4078.
- Yan, Z., 2000, *Phys. Rev. A* 61, 063607.
- Yan, Z., 2001, *Physica A*, 298, 455.
- Yi, X.X., 1999, *Phys. Scr.*, 60, 117.
- Yi, X.X., 2006, *WPJD*, 39, 465.

Zaremba, E., Tso, H.C., 1994, Thomas–Fermi–Dirac–von Weizsäcker hydrodynamics in parabolic wells, *Phys. Rev. B* 49, 8147-8162.

Zaremba, E., 1996, *Phys. Rev. B* 53, R10512-R10512.

Zeng, G.J., Su, K.L. and Li, M., 1994, *Phys. Rev. A.* 50, 4373.

Zeng, G.J., Zhou, S.L., Ao, S.M. and Jiang, F.S., 1997, *J. Phys. A: Math. Gen.*, 30,1775.

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı : Melek YAĞCILAR
Uyruğu : T.C
Doğum Yeri ve Tarihi : Çumra/ 01.01.1987
Telefon : 05554808988
Faks :
e-mail : melekyagcilar@hotmail.com

EĞİTİM

Derece	Adı, İlçe, İl	Bitirme Yılı
Lise	: Selçuklu Atatürk Lisesi, Selçuklu, Konya	2003
Üniversite	: Selçuk Üniversitesi, Selçuklu, Konya	2008
Yüksek Lisans	: Selçuk Üniversitesi, Selçuklu, Konya	-
Doktora	:	

İŞ DENEYİMLERİ

Yıl	Kurum	Görevi
2010-2011	MEB	Öğretmen

UZMANLIK ALANI

YABANCI DİLLER: İngilizce

BELİRTMEK İSTEĞİNİZ DİĞER ÖZELLİKLER

YAYINLAR