

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

BOSE-EİNSTEİN YOĞUNLAŞMASININ DİNAMİĞİ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Kevser ÇİÇEK

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK BÖLÜMÜ

Tez Danışmanı : Yrd. Doç. Dr.Yusuf ATALAY

Haziran 2010

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

BOSE-EİNSTEİN YOĞUNLAŞMASININ DİNAMIĞI

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Kevser ÇİÇEK

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK BÖLÜMÜ

Bu tez 18 / 06 /2010 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından Oybirliği ile kabul edilmiştir.


Doç. Dr. Mustafa YILMAZLAR

Jüri Başkanı


**Yrd. Doç. Dr. Yusuf
ATALAY**

Üye


Yrd. Doç. Dr. Ali ÇORUH

Üye

TEŐEKKÜR

Çalıřmam boyunca bana yardımcı olan deęerli danıřmanım Yrd. Doç. Dr. Yusuf ATALAY' a ve yine çalıřmam ile ilgili her türlü bilgi ve tecrübesini benimle paylaşan, her konuda bana destek olan Dr. Eder Santana ANNİBALE' e,ve Prof. Dr. Klaus ZIEGLER' e ve tüm Augsburg Üniversitesi Fizik bölümü çalışanlarına teşekkür ederim. Uzakta olsalarda yine her konuda bana yardımcı olan kıymetli hocam Prof. Dr. İbrahim Okur'a, Öğr. Gör. Dr. Ahmet BİNGÜL' e, Doç. Dr. Ekrem Aydın' e sonsuz teşekkürlerimi sunarım. Ayrıca hayatım boyunca maddi manevi her türlü destekte bulunan annem Besi 'ye ve aileme de teşekkürlerimi sunarım.

Kevser ÇİÇEK

Augsburg 2010

İÇİNDEKİLER

TEŞEKKÜR.....	ii
İÇİNDEKİLER	iii
SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ.....	v
ŞEKİLLER LİSTESİ	vi
ÖZET.....	viii
SUMMARY.....	xi
BÖLÜM 1.	
GİRİŞ.....	1
BÖLÜM 2.	
BOSE-EİNSTEİN YOĞUNLAŞMASI.....	3
2.1. Bose-Einstein Yoğunlaşmasının Kısa Tarihi	3
2.2. Bose-Einstein Yoğunlaşması Nedir?	5
2.3. Atomların Soğutulması ve Tuzaklanması.....	12
2.4. Sayısal Analiz.....	15
BÖLÜM 3.	
SOLİTONLAR VE GROSS-PİTAEVSKİİ DENKLEMİ.....	17
3.1. Giriş.....	17
3.2. Gross-Pitaevskii Denklemi.....	18
3.2.1 Schrödinger denklemi.....	19
3.3. Solitonlar.....	20
3.3.1 Bose-Einstein yoğunlaşmasında bright soliton.....	21
3.4. Çalışmayla İlgili Olaylar.....	22
3.4.1. Bloch osilatörü.....	22

3.4.2. Mott yalıtkanlar.....	22
3.4.3. Feschbach rezonansı.....	23
BÖLÜM 4.	
NÜMERİK METOTLAR	
4.1. Cranck Nicolson Denklemi.....	25
4.1.1. Split-Step metot.....	29
4.2. Tek Boyutta Örnekler.....	32
4.2.1. Gaussianın serbest genişlemesi.....	32
4.2.2. Harmonik osilatörün temel durumu.....	37
4.2.3. Bir solitonun yayılımı.....	39
4.2.3.1. Solitary dalgası.....	41
4.2.3.1.a. Solitary dalgası keşfi.....	42
4.2.3.1.b. Tsunami.....	45
4.3. Fortran Programı.....	46
4.3.1 Gross-Pitaevskii denkleminin nümerik çözümünü yapan fortran programı.....	47
BÖLÜM 5.	
SONUÇLAR	49
KAYNAKLAR.....	52
EKLER.....	56
ÖZGEÇMİŞ.....	73

SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ

a	: İki Parçacık Arası Saçılma Uzunluğu
BEY	: Bose-Einstein Yoğunlaşması
DFT	: Yoğunluk Fonksiyon Teorisi
GPE	: Gross-Pitaevskii Eşitliği
g	: Çiftlenim Sabiti
H	: Hamiltonyen
H_{oh}	: Harmonik Osilatör Operatörü
\hbar	: Planck Sabiti
KM	: Klasik Mekanik
MIT	: Massachusetts Teknoloji Enstitüsü
m	: Bozonun Kütlesi
N	: Durum Sayısı
N_0	: Yoğuşmadaki Parçacık Sayısı
P	: Momentum
SCH	: Schrödinger
T	: Sıcaklık
T	: Kinetik Enerji
V	: Potansiyel Enerji
V_{ext}	: Dış Potansiyel
V_{int}	: Etkileşim Potansiyeli
w_i	: Harmonik Osilatör frekansı
ψ	: Dalga Fonksiyonu
τ_B	: Geri Fark Metodu Hata Derecesi
τ_F	: İleri Fark Metodu Hata Derecesi
μ	: Kimyasal Potansiyel

ŞEKİLLER LİSTESİ

- Şekil 3.1. Cornell ve Wieman deney grubunun çalıştığı Rubidyum atomlarının hız dağılımını gösteren ünlü bir resimdir. Soldaki şekil: yoğuşmanın olduğu sıcaklığın üstündeki sıcaklığa denk gelir. Ortadaki şekil: yoğunlaşmadan hemen sonraki duruma karşılık gelir. Sağdaki şekil:kritik sıcaklıktan oldukça düşük bir sıcaklıkta neredeyse saf yoğunlaşmaya denk gelir..... 18
- Şekil 3.2. Feschbach Rezonans Mekanîği..... 23
- Şekil 4.1. Uzaydaki olasılık yoğunluk fonksiyonu. $\alpha = 1$ değerinde zaman içinde Gaussian serbest genişlemesinin nümerik çözümü Farklı eğriler farklı zamanları göstermektedir. $x_0 = 0$ başlangıç değeri olarak alınmıştır..... 35
- Şekil 4.2. Uzaydaki olasılık yoğunluk fonksiyonu. $\alpha = 1$ ile $x_0 = 1.5$ başlangıç değerinde zaman içinde Gaussian serbest genişlemesinin nümerik çözümünü vermektedir. Grafiktende anlaşıldığı gibi başlangıç noktasının farklı olması sadece grafiğin biraz daha sağdan başlamasına neden olmuştur..... 35
- Şekil 4.3. Uzayda olasılık yoğunluk fonksiyonu. $\alpha = 1$ ile $t = 6$ için analitik ve nümerik çözümleri arasındaki karşılaştırmayı gösterir. Maksimum hata değeri $9,61 \times 10^{-05}$ değerindedir.Boyutsuz değerdei sonuçlar..... 36
- Şekil 4.4. Uzaydaki olasılık yoğunluk fonksiyonu. $x_0 = 1.4$ değerinde harmonik osilatörün koherent durumunun yayılım simülasyon görülmektedir. Farklı eğriler farklı zamanı temsil eder. Düz çizgiler nümerik çözümü verir. Noktalı çizgi ile analitik çözümü temsil eder. Özellikle $t=8$ anında nümerik ve analitik çözümün karşılaştırılması daha detaylı olarak gösterilmektedir..... 38

Şekil 4.5.	Boyutsuz değerlerde zaman fonksiyonu gaussianın ortalama durumu.....	39
Şekil 4.6.	Uzayda olasılık yoğunluk fonksiyonu.Yukarıda Solitary dalgasının yayılım simülasyonu görülmektedir.Farklı zamanlardaki anlık durumlarda nümerik(kesikli çizgiler) ve analitik (noktalı çizgiler) çözümlerinin birbirleri ile olan uygunluğunu göstermektedir.....	41
Şekil 4.7.	iki solitonun çarpışma öncesini ,esnasını ve sonrasını göstermektedir.t=0 ve t=2 çarpışmadan önceki durumu yavaş yavaş dalgaların birbirine yaklaştığını; t=4 ise tam çarpışma esnasını t=7 ve t=10 çarpışmadan sonraki solitary dalgalarının gittikçe birbirinden nasıl ayrıldığını göstermektedir.....	43
Şekil 4.8.	Bir önceki şekilin üstten görünümüdür.Siyah renkteki yerlerde herhangi parçacık bulunmamaktadır.Yan tafaftaki ışık çubuğu aşağıdan yukarıya gidildikçe parçacık yoğunluğunun arttığını gösterir.....	44
Şekil 4.9.	Şekil 4.9 Denizde meydana gelen solitonların görünümü.....	44
Şekil 4.10.	iki solitonun etkileşimine oldukça yakın bir çözüm verir.Bu çözüm $u(x, 0)$, birbirinden farklı iki solitonun doğrusal olarak çakışmasıdır, başlangıç değerleri için Pseudo-Spektral metod kullanılarak eşitliğin nümerik integrasyonu ile çözüm bulunur....	45
Şekil 5.1.	Nümerik sabit β değerinin büyük olduğu durumlarda nümerik ve analitik çözüm arasındaki uyumsuzluğu gösteren bir grafiktir.....	51

ÖZET

Anahtar kelimeler: Bose-Einstein Yoğunlaşması, Gross-Pitaevskii Denklemi, Crank Nicolson Metodu, Soliton.

Bu çalışmada harmonik potansiyelde tuzaklanmış ultra-soğuk bozon bulutunun özellikleri nümerik olarak incelenmiştir. Bozonların zayıf etkileşimli olduğunu varsayarak bulutun harmonik tuzak dışında yayılması (genişlemesi) çalışılmıştır. Burada dinamikler ve ilgili zaman skalası ve uyumlu kuantum durumu etkileşimi incelenmiştir. Bu amaçla Gross Pitaevskii eşitliği ve Schrödinger denklemi kullanılmıştır.

Ayrıca Gross-Pitaevskii eşitliği için Crank-Nicolson metodu ve Split-Step metodu kullanılarak nümerik yöntemlerle çözümü yapılmıştır. Problemleri çözmek için ikinci dereceden Schrödinger denklemi kullanılmıştır. Çözümü veren algoritma kullanılarak Fortran programlama dilinde GP denkleminin çözümünü veren bir program yazılmış ve bu nümerik sonuçların analitik çözümlerle karşılaştırılması yapılmıştır.

DYNAMICS OF BOSE-EINSTEIN CONDENSATION

SUMMARY

Key Words: Bose-Einstein Condensate, Gross-Pitaevskii Equation, Crank-Nicolson Method, Soliton

In this study were investigated numerical of a cloud of ultracold bosons, trapped in a harmonic potential. Under the assumption of weakly interacting bosons the expansion of the cloud is studied after its release from the trapping potential. In this context the dynamics the relevant time scales and the interference of the coherent quantum state should be determined. And Gross-Pitaevskii equation and Schrödinger equation for this purpose is used.

In this study Crank Nicolson and Split-Step using was performed numerical solution methods for Gross-Pitaevskii equation. To solve problems are used Schrödinger equation in second degree. Using the algorithm and provide solution in Fortran programming language, a program which gives the solution of GP equation, written and analytical solutions of the numerical results compared.

BÖLÜM 1. GİRİŞ

Bozon tamsayı spine sahip parçacıklara verilen addır. Bozonlar parçacık fiziğinde Bose-Einstein istatistiklerine uyan parçacıklardır. Farklı bozonlar aynı kuantum durumunu işgal ederler ve Pauli Dışarlama ilkesine uymazlar. Günlük hayatta bozonlara örnek olarak su dalgalarını verebiliriz. Örnek olarak bir havuzu düşünelim ve havuzun her tarafından oluşturulan dalgaların bir noktada birleştiğini düşünün. Dalgalar o noktaya gelir ve bileşke dalga oluşturur. Dalgalar öyle ayarlanabilir ki tam buluşma noktasında bileşke dalganın genliği sıfır olabilir. Sanki hiç hareket yokmuş gibi algılanabilir. Dalgalar birbirinin içinden geçebilir.

Çalışmamın ikinci kısmında Bose-Einstein yoğunlaşması (BEY) hakkında ve tarihi gelişimi ile ilgili bilgi verilmiştir. BEY' de kullanılan yöntemlerden biri olan atomların soğutulması ve tuzaklanması ile ilgili kısa bir bilgi verilmiştir. BEY' nın kısaca gelişim sırasına bakılırsa; 1900 yılında Planck'ın ısıtılan cisimlerden yayılan radyasyonun spektral dağılımının, yalnızca yayılan radyasyonun enerjisinin kesikli enerji durumuyla açıklanabileceği keşfi ile ateşlenmiş ama ilk temeller Bose ve Einstein' in ortak çalışması ile ortaya atılmıştır. 1924 yılında Bose fotonun istatistiksel tanımını yapmıştır. Bunun üzerine, Einstein etkileşmeyen parçacıklardan oluşan bozon gazının tek bir kuantum durumuna yoğunlaşabileceğini göstermiştir. İkisinin teorisi birleşerek bozonlardan oluşan maddelerin mutlak sıfır sıcaklığına çok yakın değerlere kadar soğutulması ile ortaya çıkan maddenin bir hali olan Bose-Einstein yoğunlaşmasını ortaya atmıştır. 1938 yılında London süper akışkanlığın helyum atomunun bozonik karakterinden kaynaklandığını ileri sürmüştür. 1941 yılında Süper akışkanların sanki hiçbir direnç göstermeden akan bir sıvı gibi davranışını açıklamıştır. 1950 yılında Penrose ve Onsager Bose-Einstein yoğunlaşmasını tek parçacık yoğunluk matrisinin özdeğerleri ve özvektörleri (doğal orbitaller) cinsinden formüle etmişlerdir. 1955 yılında deneysel çalışmalar atomik

seyreltik gazlarla başladı. Deneysel olarak Cormell ve Wiemann arkadaşları tarafından alkali atomların seyreltilmiş buharları ile yapılan seri deney sonucu BEY gözlenmiştir. 1957 yılında Bardeen, Cooper ve Schrieffer şimdilerde BCS teorisi olarak bilinen iletkenlik teorisini geliştirdiler. Süperiletkenlik de bir BEY örneğidir.

BÖLÜM 2. BOSE-EINSTEIN YOĞUNLAŞMASI

İlk olarak 1924’ de Bose ve Einstein tarafından öne sürülen Bose-Einstein Yoğunlaşması (BEY) parçacık fiziğinde çalışılan önemli konulardan biridir. Bose’ un fotonlar için kullandığı yöntemleri ayırt edilemez parçacıklar için genelleştiren Einstein, yaptığı çalışmalarda etkileşmeyen bozon gazının tek bir kuantum durumuna yoğunlaşabileceğini göstermiştir. Ancak bundan yaklaşık on yıl sonra London(1938) ⁴He sıvısının düşük sıcaklıktaki süper akışkan davranışının bir BEY davranışı olabileceğini önermesi bu konudaki çalışmalarda önemli rol oynamıştır [1].

Bose Einstein yoğunlaşmasının ne olduğuna başlamadan önce kuantum bilgilerine bakmalı ve madde dalgaları hakkında bilgi sahibi olunmalı. Spin kavramları ile BEY’ in içerisinde yatan bozonları da ele alarak küçük bir karıştırmadan sonra edinilen bilgiler ışığında BEY hakkında yorum yapılabilir [2].

2.1. Bose-Einstein Yoğunlaşmasının Kısa Tarihi

19. yüzyılın sonlarına doğru Lord Kelvin, ışık tayfı ve başka birkaç konunun da açıklanması ile klasik mekaniğin(KM) son bulacağını öne sürmüştür. Ve öylede olmuştur çünkü birçok gözlem KM ile uyuşmuyordu. Örnek verecek olunursa Ernest Rutherford’ un yaptığı deneylerden atomun güneş sistemi benzeri bir tasarısı olduğunu anlaşıldı. Ama bu yöntem KM’ ye göre dengede olamazdı, çünkü negatif yükleri çekirdekdeki artı yükler çekerek, atomun çökmesine neden olacaktı. Diğer bir çalışma kara cisim ışıması olayıdır. Deneylere göre kara cisim ışıması belli bir sıcaklık değerinde ve belli bir frekansda en yüksek enerji değerine ulaşır. Ancak Rayleigh ve Jeans’ in çalışmalarına göre ışıma; sıcaklık ve frekans arttıkça sonsuza doğru gidiyordu, yani bütün enerji durmaksızın artan frekans ile alana yöneliyordu. Bu mor-ötesi felaket olarak bilinir. 1900’ lü yıllarda kuantum doğası en çok ilgi çeken konulardandı. Ünlü Alman fizikçi Max Planck, bu olaya sunmuş olduğu çözüm ile

kuantum mekaniğinin temelini atmıştır. Buna göre enerji KM' deki gibi sürekli değil de, paketçikler (kuantalar) halinde salınır yani ısıtılan cisimlerden yayılan radyasyonun spektral dağılımının, yalnızca yayılan radyasyonun enerjisinin kesikli enerji durumu ile açıklanabileceği şeklindeki keşfiyle kuantum doğasını ateşlemiştir. Sonra Einstein fotoelektrik olayını açıkladığı makalede ışığın foton denen yüksüz ve kütsüz enerji paketçiklerinden meydana geldiğini öne sürdü. Planck'ın sonuçlarını tekrar üreterek frekans değişimini ve üzerine ışık düşürülen metal yüzeylerden elektron yayınımlı konularını tartışmıştır ve fotoelektrik olarak bilinen bu olay Einstein'a 1921 yılı Nobel Ödülü getirmiştir. Satyendra Nath Bose, Planck'ın sunduğu ışımaya formülü ile Einstein'ın foton kavramını birleştirerek yüksüz ve kütsüz parçacıklar için bir takım istatistikler geliştirdi. Ama bunu yayınlamakta çekinen Bose makaleyi dönemin saygın fizikçisi olan Albert Einstein'a yollamıştır. Bose'un fotonlar için kullandığı yöntemleri ayırt edilemez parçacıklar için genelleştiren Einstein, yaptığı çalışmalarda etkileşmeyen bozonik parçacıkların toplam sayısının korunumu şartıyla düşük sıcaklıklarda faz geçiş göstermesi gerektiğini vurgulamıştır. Böylece Bose-Einstein yoğunlaşması doğmuş oldu ve Bose-Einstein yoğunlaşması olarak adlandırıldı. Ancak çok uzun bir süre boyunca hiçbir fiziksel olayın böyle bir davranış ortaya koyacağı bilinmiyordu [3].

Ancak helyum izotopunun (^4He)[4] sıvı fazının süper akışkan olduğu Onnes tarafından 1911 yılında bulunmuştur. Ancak bundan yaklaşık on yıl sonra London(1938) ^4He sıvısının düşük sıcaklıktaki süper akışkan davranışının bir BEY davranışı olabileceğini önermesi bu konudaki çalışmalarda önemli rol oynamıştır. London bu süper akışkanlığın helyum atomundaki bozonik karakterinden kaynaklanması gerektiğini ileri sürdü. Süper akışkanların sanki hiçbir kuvvet ile karşılaşmadan akan bir sıvı gibi davranmasını açıklayan bir teori 1941 yılında Landau tarafından oluşturuldu. Landau'nun teorisi, girilebilir enerji durumları yeterince azaltıldığında ancak uzun dalga boyuna sahip fotonların uyarılacağı ve böylece süper akışkan bir durum oluşacağı fikrine dayanıyordu. Ancak bu teoride karşılığını bulamadı ve çok geçmeden Onsager ve Penrose [3], karşılıklı etkileşimi büyük olan bozonik sistemler kullanmış ve Bose Einstein yoğunlaşmasını tek parçacık yoğunluk matrisinin öz değeri ve öz vektörleri cinsinden formüle etmişlerdir.

Bose sisteminin en önemli özelliklerinden biriside bunların homojen olmayan ve sonlu boyutlu sistemler olmasıdır. Bu sistemin homojen olmaması iki cisim etkileşmesinde önemli rol oynar. Etkileşimli bir Bose sisteminde bozonlar arası çok cisim korelasyon etkileri, yoğunlaşmanın dışında bulunan uyarılmış atomların miktarını artırır. Etkileşimli bozon gazının davranışı ile ilgili öncü teorik çalışmalar 1947 yılında Bogoliubov tarafından [5] tarafından başlatılmıştır. Bogoliubov düşük yoğunluklu, zayıf etkileşimli ve uyarılmış durumdaki atomların sayısının ihmal edilebilir bir durum için bir pertürbasyon açılımı geliştirmiştir.

BEY deneysel olarak 1955'de alkali atomların seyreltilmiş buharları ile yapılan bir seri deney sonucunda gözlenmiştir. Bu yoğunlaşması ilk olarak JILA(Joint Institute For Laboratory Astrophysics)'da manyetik tuzaklarda hapsedilen ve mikrok Kelvin mertebesine kadar soğutulan ^{87}Rb 'de gözlenmiştir [6]. Aynı yıl içinde ^{85}Rb [7] ve ^{23}Na [8] ve ^7Li [9] alkali atomlarının zayıf etkileşimli seyrek gazları ile yapılan deneylerde termal olarak dağılmış olan bulutun makroskopik olarak tek kuantum durumuna geçtiği açık bir şekilde gözlenmiştir. Sonraki yıllarda ^1H [10] ve ^{14}K [11] atomik boyutta, Li_2 [12] gazlarında moleküler boyutta BEY elde edilmiştir.

1957 yılında Bardeen, Cooper ve Schrieffer şimdilerde süper iletkenliğin BCS teorisi olarak bilinen süper iletkenlik teorisini geliştirmiştir. Bu mikroskopik teori, metallerin elektronları arasındaki etkileşimlerin fononlar aracılığı ile gerçekleştirildiğini varsayıyordu.

1995 yılında alkali atomlar üzerine yapılan deneyler Bose-Einstein yoğunlaşması tarihinde kilometre taşı olarak düşünülür. 1995 yılında deneysel olarak açık bir şekilde gözlenmesi Bose-Einstein yoğunlaşmasına ve Bose sistemlerindeki çok cisim özelliklerine olan ilgiyi artmasına yol açmıştır [13].

2.2. Bose-Einstein Yoğunlaşması Nedir?

Bose-Einstein yoğunlaşmasının fiziğini anlamak için klasik ve kuantum gazlarının fiziksel davranışlarına yakından bakmak gereklidir. Bilindiği gibi gaz, basit anlamda, uzayda serbestçe hareket edebilen molekül veya atomik partiküllerden oluşur. Gazlar klasik (ideal) ve kuantum gazları olarak iki sınıfta incelenebilir.

Bir klasik gazı oluşturan moleküller birbirlerinden ayrı ve yalnızca zayıf etkileşecek şekilde dağılırlar. Herhangi bir anda bu molekül topluluğunun yalnızca çok küçük bir parçası çarpışmalar yoluyla birbirleriyle güçlü etkileşimlere girerler. Moleküller arasında ortalama uzaklık moleküllerin çapı mertebesinde yani yaklaşık olarak $(22,400/N_0)^{1/3}$ ile orantılı olacak şekilde $30 A^0$ ile $3 A^0$ arasındadır [14].

Moleküller arası kuvvetler zayıf Van der Waals kuvvetleridir. Herhangi bir anda bu moleküller birbirlerinden molekül çaplarından daha büyük mesafelere uzaklaştırıldığı anda bu etkileşimin büyüklüğü, moleküllerin aralarındaki uzaklığın altıncı kuvvetiyle hızlı bir şekilde düşer. Yeterince düşük yoğunluklarda ise gaz molekülleri birbirleriyle oldukça zayıf etkileşirler [15].

İdeal bir gaz; moleküller arası etkileşimden doğan potansiyel enerjinin moleküllerin kinetik enerjisi yanında ihmal edilebildiği durumla temsil edilir. Böyle bir gazı temsil eden bölüşüm fonksiyonu ve dolayısıyla gazın serbest enerjisi, Maxwell-Boltzman istatistiği kullanarak elde edilebilir [16].

İçerisinde N tane molekül olan V hacimli bir kutunun bir ısı banyosuyla değme durumunda olduğu durumu düşünelim. Böyle bir gaz içerisinde yer alan bir parçacığı herhangi bir durumda bulma olasılığı ile tanımlanan mümkün olan durumların sayısını, moleküllerin sayısı ile verilebilir. Buna göre, birinci durumda bulunan molekül n_1 , ikinci durumda bulunan molekül n_2 , ve r . n_r durumda bulunan molekül ise r 'ncinci durumu işgal eder. Bu durumda gazı oluşturan moleküllerin enerjileri girilebilir durumlarının sayısı ile ilişkilendirilebilir. Böylece, moleküllerin enerjileri;

$$\varepsilon_1 \leq \varepsilon_2 \leq \varepsilon_3 \dots \leq \varepsilon_r \dots \quad (2.1)$$

şeklinde sıralanabilirler. Diğer yandan molekül sayısı da girilebilir durumların sayısı cinsinden

$$N = \sum_r n_r \quad (2.2)$$

bağıntısı ile verilir.

Klasik gazlarda kuantum etkileşimlerinin olmadığı kabul edilir. Ancak klasik gaz belli limitlerde gerçekleşir. İstatistiksel olarak hesaplanabilen bu limitin dışına çıktığında kuantum etkiler baskın olmaya başlar. Bu limit

$$\frac{N}{V} \left(\frac{h^2}{2\pi m k T} \right)^{3/2} \ll 1 \quad (2.3)$$

denklemden oran ile belirlenir. Burada N molekül sayısı, V hacim, T sıcaklık, h Planck sabiti, k Boltzman sabiti ve m parçacığın kütlesidir. Gazı oluşturan moleküller (2.3) bağıntısını sağlıyorsa kuantum etkilerin başladığını düşünebiliriz [17].

Klasik limitin geçerli olabilmesi için kuantum mekaniğine göre momentumu p olan bir parçacığa eşlik eden de Broglie dalga boyu λ_{DB} moleküller arası ortalama serbest yolla karşılaştırıldığında mutlaka küçük olmalıdır. Eğer moleküller arası mesafe çok büyük ise parçacıkların de Broglie dalgaları yeterli ölçüde girişim yapamazlar. Bu tip parçacıklar Newton mekaniğine uyarlar. Fakat parçacıkların de Broglie dalga boyları moleküller arası ortalama serbest yola yakın veya eşit büyüklükteyse bu dalgalar arasında girişim ortaya çıkar. Bu klasik limit olarak ve bu limit aşıldığında kuantum etkiler önem kazanır [18].

Gazı oluşturan parçacıklar arasında, örneğin bir metalin serbest elektronları veya sıvı Helyum atomlarının birbirleriyle etkileşmelerinde olduğu gibi, kuantum etkileri baskın hale geliyorsa bu tür gazlar kuantum gazları olarak bilinir.

Kuantum etkilerinin baskın olduğu bir gazın fiziksel davranışını anlayabilmek için kuantum istatistiği bakış açısından girilebilir durumların sayısını ve özelliklerini bilmek gereklidir. Klasik mekaniğe göre girilebilir durumların sayısı sistemde bulunan parçacık sayısı kadarken, kuantum mekaniğine göre girilebilir durumların sayısı n_1, n_2, n_3, \dots setinin bütün keyfi değerlerini alamaz. Yani bazı kısıtlamalar vardır. Bu kısıtlamalara geçmeden önce kuantumlu parçacıkların çok önemli bir özelliğini hatırlatmakta yarar var. Kuantumlu parçacıkların kendilerine has açısal momentumları vardır. Klasik açıdan bakıldığında bu açısal momentum herhangi bir referans sisteminde ölçülen ya da gözlenen parçacık hareketiyle ilgili değildir. Parçacığın kütle merkezi hareketsiz iken bile bu açısal momentum vardır. Parçacığın bu tip açısal momentumu spin olarak adlandırılır. Spin tamamen kuantum

mekaniksel bir kavramdır o nedenle spini anlamak için kuantum mekaniği kavramlarıyla düşünmek gereklidir. Spin \hbar ve $\hbar/2$ nin katları şeklinde kesirli değerler alır. Bir başka söyleyişle, spinler

$$0, \frac{1}{2}\hbar, \hbar, \frac{3}{2}\hbar, \dots, \quad (2.4)$$

şeklinde kuantumlu değerler alır [19].

Spin değerlerine bakarak bu parçacıkları iki sınıfa ayırabiliriz. Bunu yapmak istememizin en önemli nedeni parçacıkların spin değerlerine bağlı olarak çok farklı fiziksel özelliğe sahip olmalarıdır.

Birinci sınıf, işgal numarası n_r 'lerin tamsayı değerler aldığı parçacıklardan oluşur. Yani,

$$n_r = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (\text{tüm } r \text{ değerleri}) \quad (2.5)$$

kümesidir. Bu sınıftaki parçacıklar Bose-Einstein (BE) istatistiğine uyarlar. Örneğin π ve K mezonu ve fonon bu sınıfa dahildir.

İkinci sınıftaki parçacıklar ise işgal numaraları 0 ile 1 değerleri arasında kısıtlanan parçacıklardan oluşur. Yani,

$$n_r = 0, 1 \quad (\text{arasında kesirli } r \text{ değeri var}) \quad (2.6)$$

değerleri alabilir. Bu sınıftaki parçacıklar ise 1926 yılında Fermi ve ondan bağımsız olarak Dirac tarafından geliştirilen Fermi-Dirac (FD) istatistiğine uyarlar. Elektron, pozitron, proton ve nötron bu sınıftaki bazı parçacıklardır. Fermiyonlar Pauli (1925) dışarlama ilkesine göre aynı kuantum düzeylerinde bulunamazlar. Fermiyonların bu çok önemli kuantum mekaniksel davranışını ilkesel olarak açıklayan Pauli'ye 1945 yılı Nobel Fizik ödülü verildi.

Şimdi yoğunlaşma olayının nasıl meydana geldiğini göstermek için kütlesi sıfırdan farklı bir bozon gazının fiziksel davranışını ele alacağız. Yukarıda bozon gazlarının, toplam spini bir tam sayıya eşit olan atomlardan oluştuğundan söz etmiştik. Bose gazları, fermiyonların tersine Pauli dışarlama ilkesine uymazlar. Bu çok çarpıcı bir durumdur ve önemli fiziksel sonuçlara yol açmaktadır. Bu durumu anlamak için

bozonik gazın düşük sıcaklıklardaki davranışına yakından bakmak gereklidir. Bir bozon gazının dağılım fonksiyonu,

$$\bar{n}_i = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} - 1} \quad (2.7)$$

bağıntısı ile verilir. Sistemdeki tüm parçacıkların sayısı ise

$$N = \sum \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} - 1} \quad (2.8)$$

şeklinde dir. Durumların enerji yoğunluğu ise

$$f(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{V2\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \varepsilon^{1/2} d\varepsilon \quad (2.9)$$

olur. (2.8) bağıntısının integral formunun dikkate alarak (2.9) bağıntısını yeniden yazarsak toplam parçacık sayısını,

$$N = \frac{V2\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2}}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} - 1} \quad (2.10)$$

yoğunluğunun sabit kalacağını ifade eder. Fakat sıcaklık düşürüldüğünde (2.10) bağıntısının sağ tarafında sabit kalabilmesi için kimyasal potansiyelin işaretinin negatif olması gerekir. Sıcaklık düştüğünde μ 'de küçülür fakat $|\mu|$ daima büyür. (2.10) bağıntısındaki integral $\mu = 0$ iken $T = T_c$ de minimum kritik sıcaklığı tanımlar. Bu kritik sıcaklık düşük sıcaklıklarda bir bozon gazının hal değiştireceğine (faz geçişi) açıkça işaret eder [2].

Ancak (2.10) bağıntısı taban durumunda bulunan parçacıkların sayısını yansıtmaz. Gerçekte taban enerji durumundaki, yani, enerjisi ve momentumu sıfır olan parçacıkların sayısı,

$$N_1 \equiv \frac{1}{e^{-\beta\mu} - 1} \quad (2.11)$$

kadarken diğer enerji seviyelerinde bulunan parçacıkların sayısı ise

$$N_{\varepsilon>0} \equiv V \frac{2\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^{1/2} d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} \quad (2.12)$$

şeklindedir.

Sonuç olarak, toplam parçacık sayısı (2.11) ve (2.12) nin toplamı ile

$$N = \frac{1}{e^{-\beta\mu} - 1} + \frac{V2\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^{1/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} \quad (2.13)$$

şeklinde verilir.

Bozonik gazlar için T kritik sıcaklığın üstünde, taban durumdaki parçacıklar tamamen ihmal edilebilirler ve kimyasal potansiyel (2.10) bağıntısında verildiği gibidir. Fakat kritik T_c sıcaklığının altında kimyasal potansiyel sıfıra gider. Kritik sıcaklığın altında enerjisi sıfırdan farklı parçacıkların sayısı (2.12) bağıntısı $\mu = 0$ seçerek integre edilirse,

$$N_{\varepsilon>0} = N \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \quad (2.14)$$

elde edilir. Sonuç olarak $N_{\varepsilon>0}/N$ oranı toplam parçacık sayısı içinde enerjisi $\varepsilon > 0$ olanların oranını verirken, kalan parçacıkların

$$\frac{N_1}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \quad (2.15)$$

şeklindeki oranı da enerjisi ve momentumu sıfır olan parçacıkların oranını verir [3].

Kritik sıcaklığın üstünde, taban durumundaki parçacıkların sayısı ihmal edilirken sıcaklık geçiş sıcaklığının altına düşürüldüğünde parçacık sayısı çok hızla büyür. Taban enerjisine ulaşan parçacıkların enerjileri ve momentumları sıfır olur. Böylece faz geçişi gerçekleşmiş olur. Bu şekilde parçacıkların taban enerji durumunda yoğunlaşmasına Bose-Einstein yoğunlaşması adı verilir. Bozonik gazın

yoğunlaşması klasik bir buharın yoğunlaşmasından oldukça farklıdır. Ancak buhar ile Bose gazının yoğunlaşması arasında bazı benzerlikler de vardır. Örneğin $T < T_c$ durumunda Bose-Einstein gazının basıncı doymuş buhar basıncında olduğu gibi hacmine değil sıcaklığına bağlıdır. Yoğunlaşmanın en önemli fiziksel sonucu, sistemde bulunan tüm bozonik parçacıkların aynı taban enerji durumuna ulaşarak tek bir parçacık gibi davranması şeklinde özetlenebilir. Oysa hatırlayacağınız gibi fermiyonların aynı kuantum durumunda bulunmaları Pauli dışarlama ilkesine göre imkansızdı. Fermiyonlar bu özelliklerini düşük sıcaklıklarda da korumaktadırlar. Dolayısıyla, fermiyonlar, bozonlarda olduğu gibi düşük sıcaklıklarda hal değişimi (faz geçişi) göstermezler. Ancak, fermiyonlar düşük sıcaklıklarda başka bir mekanizma yoluyla hal değişimi göstererek süper iletken veya süper akışkan olabilirler [3].

Kısaca fermiyon ve bozonun ne olduğuna değinirsek ;

Spin ve istatistik kavramında kuantum fiziğinde parçacıklar iki istatistik fiziği tarafından betimlenir. Bunlar Fermi-Dirac ve Bose-Einstein İstatistikleridir. Fermi-Dirac istatistiğine uyanlar fermiyon, Bose-Einstein istatistiğine uyanlara Bozon adı veilir. Fermiyonlar kesirli bozonlar tam sayı spine sahiptir. Fermiyonların kesirli spine sahip olması fermiyonların aynı kuantum seviyesinde aynı anda bulunmak istemezler(Pauli Dışarlama İlkesi) Bozonlar ise sınırsız sayıda bozon aynı anda aynı konumda bulunabilirler.

Fermiyonlar katı maddeleri oluşturan tüm parçacıkları içerir, elektron, proton, nötron gibi parçacıklar bunlara örnek verilir.

Bozonlar ise kuvvetlerden sorumludur. Kütle çekim, elektromanyetik kuvvet zayıf ve güçlü çekirdek kuvvetleri bozonlar sayesinde var olur. Sınırsız sayıda bozonun birarada bulunabilmesi özelliği sayesinde büyük ölçekli kuvvetler var olabilmektedir ve bu kuvvetler maddeleri bir arada tutabilmektedirler. Ayrıca bu özellik süper sıvılar, süper iletkenler ve lazerin karakteristik özelliği olan Bose-Einstein yoğunlaşmasını mümkün kılar. Bozonlara örnek olarak fotonlar, W ve Z bozonları (zayıf çekirdek taşıyıcısı), gluon, Higgs bozonu, fononlar, Helium 4, Hidrojen 2, Sodyum 23 vb. sayılabilir [20].

Kuantum fiziğinde, dalgaların belli bir anda nerde olduğunu söyleyemeyiz ancak bunun yerine dalganın bulunabileceği yerlerin olasılığını bilebiliriz. Mesela kuantum mekanik denklemlerini belli kuvvetler altında çözersek bir dalga fonksiyonu elde ederiz bu dalga fonksiyonun karesi bize konum ve momentum gibi bazı değerlerin olasılık dağılımlarını verir. Ayrıca bu olasılık dağılımına göre bir elektron aynı anda birkaç yerde bulunabilir. Elektron örneği ile devam edersek, bir elektronun konumu hakkında bilimiz ne kadar fazla ise momentumu hakkında da o kadar fazladır tersi bir ifadeye doğrudur.(Bu Heisenberg belirsizlik ilkesi olarak adlandırılır.)Maddenin dalga özelliği BEY' i anlamak için önemlidir.

Atomları çok düşük sıcaklıklara kadar soğuttuğumuzda atomların dalga fonksiyonları büyür. Eğer bu büyüme atomların arasındaki mesafeler kadar büyümüşse atomları temsil eden dalgalar üst üste binebilir ve atomların büyük bir kısmı yerleşebilecekleri en düşük enerji düzeyine geçerler. Bu durumda atom dalgaları tamamen üst üste biner. Bu olguya Bose ve Einstein' a ithafen Bose-Einstein yoğunlaşması denir ve sadece bozon özelliği taşıyan parçacıklar ve parçacıklar kümesinde görülür. Bose Einstein yoğunlaşması tek bir dalga fonksiyonuna uyan tek bir cisim gibi davranır. Bose Einstein yoğunlaşması birçok olguda karşımıza çıkar. Bunlardan en bilindik olan Lazerler , Mazerler, bunun yanı sıra süperakışkanlık ve süperiletkenlik gibi olgular birer BEY örneğidir.

2.3. Atomların Soğutulması ve Tuzaklanması

Tüm fiziksel parçacıklar geleneksel teoriye uygun olarak kinetik enerjilerini kaybettiklerinde, bunun doğal bir sonucu olarak, hızlarını da kaybederek yavaşlarlar. Benzer şekilde atomlar veya atomik karışımlarda kinetik enerjilerini kaybettiklerinde yavaşlarlar. Parçacıkların yavaşlatılmasının en basit yollardan birisi parçacığın momentumunu azaltmaktır. Eğer hareketli bir parçacığın momentumunun bir şekilde serbest bırakılması sağlanırsa doğrudan enerjisini de kaybederek yavaşlayacaktır. Soğutma sıcaklığın düşürülmesiyle gerçekleştirilen bir süreçtir. Tek bir parçacık için sıcaklığın fiziksel bir karşılığı yoktur. Bir enerji biçimi olan sıcaklık, bir parçacık sistemi için fiziksel bir anlama sahiptir ve böyle bir sistemin kinetik enerjisi sıcaklığın parametrik bir ölçüsüdür. Dolayısıyla, sistemdeki parçacıkların kinetik

enerjilerini azaltmak fiziksel olarak sistemin sıcaklığını düşürmeye yani soğutmaya karşı gelir. Diğer yandan tuzaklama ise atomun tüm serbestlik dereceleri doğrultusunda hareketlerini kısıtlama olarak bilinir. Bu alanda yapılan çalışmaların amacı atomik gazların bir katıya ya da bir sıvıya dönüşmesini önleyerek sıcaklıklarını mikrok Kelvinler mertebesine kadar ya da daha altına kadar soğutmak olmuştur. [21]

Atomları soğutmak ve tuzaklamak için yapılan çalışmaların tarihi oldukça geriye gider. Soğutma ve tuzaklama işlemi için geliştirilen yöntemler arasında lazer, optik alanlar ve manyetik alanların kullanımı sayılabilir. Şimdi bu yöntemleri kısaca inceleyelim.

Bose yoğunlaşması çalışmalarının temeli 1980'li yıllarda hidrojen atomu ile başlamıştır. Burada hidrojen atomları önce bir soğutucu ile soğutulmuş, sonra manyetik bir alanla tuzaklanmış ve sonra buharlaşma ile soğutulmuştur. Bu çalışma BEY'yi gözlemlemeye yaklaşıp ancak ayırık atomların moleküllere dönüşmesi ve güçlü etkileşimlerin ortaya çıkması ile sınırlı kalmıştır. Bundan sonra lazer tabanlı soğutma teknikleri manyeto-optiksel tuzaklama gradyan-polarizasyon geliştirilmiştir.

Lazer normal ışıkla karşılaştırıldığında bir çok farklılık gösterir. Normal ışık bir elektromanyetik dalga olarak farklı frekans aralıklarını içine alır ve küresel yayılım gösterirken buna karşı lazer ışığı kohorent ve monokromatiktir. Lazerin yüksek yoğunluğu ve kontrollü olarak istenilen doğrultuda yönlendirilebilmesi sayesinde, fiziksel sistemlerin bazı özelliklerini incelemek için 1960'lardan bu yana kullanıldığı bilinmektedir.

İlk kez Letokhov 1968 yılında elektromanyetik dalgalar ile atomik tuzaklamanın gerçekleştirilebileceğini öne sürdü. Bu takiben 1970 yılında Ashkin bir ışık demetiyle rezonans halinde bulunan bir atomda ışık basıncının ne olacağını hesapladı. Bu konuda farklı çalışmalar sürdürüldüğü yıllarda ilk defa Hansch ve Schawlow (1975) lazer ışığının serbest atomları soğutmada kullanılabileceğini gösterdiler. Atomların yavaşlamasının fiziksel nedeni atomların dışarıdan foton soğurması şeklinde açıklanabilir. Çünkü foton soğurumu atomun momentumunu da

değiřtirmektedir. Őartların saęlanması durumunda bu yöntemi kullanarak atomların hareketini yavařlatmak olanaklıdır. Ardıřık kendilięinden yayınım, atom momentumu tekrar kazanamayacaęı bir Őekilde keyfi bir yönde ortalama hızını düřürür. Böylece soęutma gerçekteřmiř olur. Doppler kayması olarak bilinen, atomun enerjisini azaltma yöntemi sayesinde, atom sürekli olarak hareket yönü doęrultusunda momentum soęurur. Eęer üç boyutlu bir lazer düzeneęi saęlanırsa atomlar tüm serbestlik dereceleri doęrultusunda soęutulabilir. Bu sayede, yüksek enerji limiti kendilięinden yayınımın geliřigüzel süreciyle tesis edilmiř olur. Alkali atomlar lazer-tabanlı yöntemlere oldukça uygundur çünkü bunların optiksel geçiřleri mevcut lazerlerle uyarılabilir ve düşük sıcaklıklara soęutmak için uygun bir iç enerji seviye yapısına sahiptirler.

Ancak bu lazer soęutma teknikleriyle elde edilebilen düşük sıcaklık tek bir fotonun enerjisiyle sınırlıdır. Sonuç olarak λ_{dB}^3 hacmindeki atomların sayısı BEY için gerekli olan deęerden oldukça küçüktür.

Lazer soęutma yöntemiyle gerçekteřtirilen ilk bařarılı deney 1980 yılında Moskova'da Balykin ve Letokhov ve aynı yıl içinde Gaithersburg'da Phillips ve çalıřma arkadařları tarafından gerçekteřtirildi. Bunun hemen ardından Phillips, Chu ve Cohen-Tannoudji önceki teorilerin öngördüęü limitler altında soęutma yöntemi geliřtirdiler.

Aynı yıllarda ışık tuzakları da kullanılmaya bařlanmıřtı. Chu ve onun Bell laboratuvarındaki çalıřma arkadařları tamamıyla optik alanın ponderomotive potansiyelini kullanarak yavař atomları tuzaklamayı bařarmıřlardı. Lazer ışıęı ile soęutulan atomlar optik alanla tuzaklanıyordu. Optik tuzaklar çok zayıf ve küçük olduęu için fiziksel açıdan yeterince ilgi çekici sayıda atomun toplamak için kullanılan iyi bir tuzaklama gerekiyordu. Phillips' in grubu tuzaklama için manyetik alanlar kullandı. Fakat atomik soęurmanın Zeeman tuning ile manyetik alan gradyentinin bir kombinasyonu olan bu yöntem gelecek çalıřmalarda kullanılacak olan standart bir tuzaklama önerisiydi. Daha orijinal bir manyetik-optik-tuzaklama (MOT) yöntemi 1986 yılında Dalibard tarafından önerildi. Fakat o sıralarda bu teknik, Pritchard'ın grubundakiler ile Chu tarafından geliřtirildi. Bu tuzaklama yöntemi Őimdiye kadar geliřtirilen en iyi yöntemdi. Böylece atomların hem soęutulması hem de tuzaklanması oldukça güvenli bir Őekilde saęlanmaktaydı.

2.4. Sayısal Analiz

Çalışma boyunca bolca karşılaşacağınız bu kelimeyi biraz açmak iyi olacak. Nümerik Analiz (Sayısal Çözümleme); analitik yöntemlerle çözülemeyen problemleri çözmek için kullanılan yöntemler bütünüdür. Diğer bir tanımla nümerik analiz istenen matematiksel işlemlerin ayrıık olarak nasıl hesaplanabileceğinin incelenmesidir.

Sayısal analizin amacı çözümünün elle yapılmasının pratik olmadığı karmaşık, analitik olarak çözümü zor veya olanaksız olan problemlerin çözümlenebilmesi için uygun ve en iyi yaklaşım veren yöntemleri bulmak, ayrıca bunlardan anlamlı ve faydalı sonuçlar çıkarmaktır.

Problemler Cebir ve analiz başta olmak üzere değişik matematik konularından kaynaklanır. Ve problemin çözümü için birçok aşamadan geçilir. Fiziksel bir olayın matematiksel modelinin formüle ederken, problemini bilgisayar ile çözümleyebileceğimizi göz önüne alabiliriz ki bizde burada en güncel kullanılan fortran90 programı kullanılarak sonuçlar elde edildi. Formülasyon yapıldıktan sonra problemin çözümü için hata analizi ile birlikte nümerik yöntem en iyi yaklaşımla sonuç elde edilecek şekilde seçilmelidir.

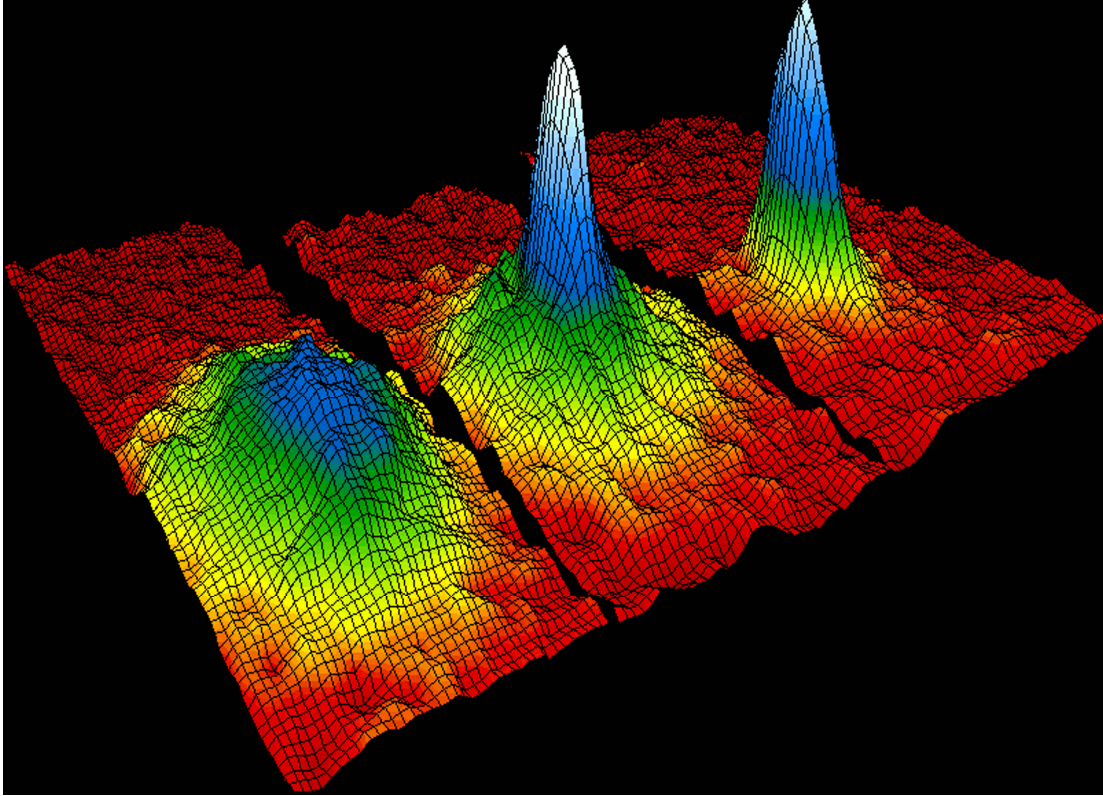
Sayısal çözüm yöntemi, belirtilen ya da istenilen hassaslıktaki yaklaşımla ve belli sayıda ardışık tekrar işlemlerinden sonra matematiksel probleme çözüm getirmelidir. Sayısal analiz sadece çözüm olarak sayılar üretmez, cebirsel ve analitik teorilere önemli katkılarda da bulunur. Sayısal çözüm yöntemleri genellikle önceden saptanmış aritmetik ve mantıksal işlemlerden oluşur. Bu işlemlerin tümüne çözüm algoritması denir. Algoritma belli sayıda işlemlerden sonra probleme çözüm getirir. Problemin bilgisayar ile çözümünde üçüncü aşama, algoritmanın bilgisayarda çözümünü sağlayacak programlama aşamasıdır. Programlama; C, Pascal, Basic, Cobol, Fortran gibi bilgisayar dillerinden birisi ile yapılır.

Sayısal analiz mühendislik ve uygulamalı matematikte önemlidir ve birçok mühendislik bölümünde gösterilen bir derstir. Lineer programlama alanında da sıkça kullanılır. Sayısal Analiz olmazsa olmazlardan birisidir. Özellikle bilgisayarların ortaya çıkması ve yaygın kullanılması bu tekniklerin önemini daha da artırmıştır.

Çağımızda kapsamlı realizasyon işlemleri bilgisayar aracılığı ile yapıldığı için, kullanılan sayısal metodun etkinliği, genelde bu metodun kesinliğine bağlı olduğu kadar, kullanılan bilgisayarın teknolojik donanımının verdiği kolaylığa ve bilgisayar programının kalitesine de bağlıdır [22].

BÖLÜM 3. SOLİTONLAR VE GROSS-PİTAEVSKİİ DENKLEMİ

1924 yılında Hintli fizikçi Bose, klasik elektrodinamik sonuçlara başvurmadan tamamıyla istatistik hesaplamaları kullanarak fotonlar için Planck dağılım yasasını türetebileceğini açıklamıştır. Bunun üzerine Bose'un [23] fotonun kütsesiz parçacık olması nedeniyle fark edemediği bir fiziksel durumu fark eden Einstein, birbiriyle etkileşmeyen bozonik parçacıkların toplam sayısının korunumu şartıyla düşük sıcaklıklarda faz geçiş göstermesi gerektiğini söylemiştir. Böylece Bose-Einstein İstatistiği doğmuş ve faz geçişi de Bose-Einstein yoğunlaşma olarak adlandırıldı [24]. Kuantum Mekaniği ve İstatistik Mekaniği kitaplarından yararlanabiliriz. Bose-Einstein yoğunlaşması, Einstein tarafından öngörüldüğünden (1924) 70 yıl sonra 1995 yılında alkali atomların zayıf etkileşimli seyreltilmiş buharlarıyla yapılan bir seri deney sonucunda gözlenmiştir [25]. Bu yoğunlaşma ilk kez manyetik tuzaklarda hapsedilen ve lazer ışınları kullanılarak mikrok Kelvin mertebesine kadar soğutulan ^{87}Rb [26] de gözlenmiştir. Aynı yıllarda ^{85}Rb [27], ^{23}Na ve ^7Li [28] alkali atomlarının zayıf etkileşimli seyrek gazları ile yapılan deneylerde, termal olarak dağılmış olan bulutun makroskopik olarak tek bir kuantum durumuna geçtiği açık bir şekilde gözlenmiştir. Bu yoğunlaşma öncelikle Colorado Üniversitesi'nde bir araştırma grubu tarafından Rubidyum atomları ile yapılmıştır (şekil 2.1' de Bose-Einstein yoğunlaşmasının ilk resmi görülmektedir), Rice Üniversitesinde Lityum atomlarının yoğunlaşması gözlenmiştir, Cambridge Üniversitesinde MIT tarafından sodyum atomlarıyla elde edilmiştir. 2001 yılında Nobel fizik ödülü, Nobel fizik komitesi tarafından Colorado üniversitesi'nden Eric Cornell ve Carl Wieman'a, 2000 rubidyum atomunu mutlak sıfırın ($-273,15\text{ }^\circ\text{C}$) sadece bir derecenin milyarda bir kaçına kadar soğutarak bir Bose-Einstein Yoğunlaşması (BEY) elde ettiği için ve benzer şekilde Massachusetts Teknoloji Enstitüsü'nden (MIT) Wolfgang Ketterle'e sodyum atomları kullanarak daha büyük bir BEY elde ettiği için verilmiştir [29].



Şekil 3.1. Cornell ve Wieman [26] deney grubunun çalıştığı Rubidyum atomlarının hız dağılımını gösteren ünlü bir resimdir. Soldaki şekil: yoğuşmanın olduğu sıcaklığın üstündeki sıcaklığa denk gelir. Ortadaki şekil: yoğuşmadan hemen sonraki duruma karşılık gelir. Sağdaki şekil: kritik sıcaklıktan oldukça düşük bir sıcaklıkta neredeyse saf yoğuşmaya denk gelir.

3.2. Gross-Pitaevskii Eşitliği

Oldukça düşük sıcaklıklarda zayıf etkileşimli bozonlardan oluşan sistemlerde gözlenen Bose-Einstein Yoğuşması, Gross Pitaevskii denklemi olarak bilinen lineer olmayan Schrödinger eşitliğinden başka birşey değildir [30].

Gross-Pitaevskii eşitliği N bozonlu sistemin yoğunluk formunu içeren ortalama alan(Mean-Field) denklemdir. Bu eşitlik ilk defa 1961 yılında Gross ve Pitaevskii tarafından ayrı ayrı bulunmuştur. [31,32] $\psi(\vec{r}, t)$ yoğunlaşmış sistemin dalga fonksiyonu olmak üzere Gross-Pitaevskii eşitliği aşağıdaki denklem tarafından verilir.

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left[H_{oh} + \frac{4\pi N \hbar^2 a}{m} |\psi(\vec{r}, t)|^2 \right] \psi(\vec{r}, t) \quad (3.1)$$

$$H_{oh} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{m}{2}\sum_{i=1}^3 \omega_i^2 x_i^2 \quad (3.2)$$

Burada H_{oh} harmonik osilatör operatörü, m her bir parçacığın kütlesini, $\psi(\vec{r}, t)$ Bose-Einstein Yoğunlaşma dalga fonksiyonunu gösterir ve ω_i ise x_i ($r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}$) yönündeki harmonik osilatör frekansıdır, a sabiti iki cisim arasındaki saçılma uzunluğudur. Gerçekte GP teorisi zayıf etkileşimli bozonlardaki girdap durumlarını açıklamak için geliştirilmiştir. Bu denklemin geçerlilik şartı saçılma uzunluğu, atomlar arasındaki mesafeden küçük olmalıdır. Göreceğimiz gibi Feshbach Rezonansı olarak bilinen teknikleri kullanarak kondens içinde hem zaman hemde konum değiştirebilir.

3.2.1. Schrödinger denklemi

Fizikte özellikle kuantum mekaniğinde, Schrödinger eşitliği bir fiziksel sistemin kuantum durumunun zamanla nasıl değişeceğini tanımlayan araç dalga fonksiyonudur. Newton kuralları nasıl klasik mekaniğin temelinde ise kuantum mekaniği temelinde Schrödinger eşitliği bulunur. Kuantum mekaniğinin standart tanımı kuantum durumu fiziksel sistemin tanımını verebilen dalga vektörü ya da durum vektörü cinsinden tanımlanır. Dalga fonksiyonunun zamana ve konuma bağlı değişimini gösteren denklemi ilk bulan Erwin Schrödinger'dir. Bu yüzden denkleme onun adıyla anılır [33].

Schrödinger Denkleminin Genel Formu:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi \quad (3.3)$$

burada ψ , parçacığa eşlik eden dalga fonksiyonu H hamiltonyeni, $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$, enerji operatörüdür.

Zamana bağlı Schrödinger eşitliği;

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \hat{H} \psi(x, t) \quad (3.4)$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + V(x) \psi(x, t) \quad (3.5)$$

Zamandan bağımsız Schrödinger eşitliği;

$$ih \frac{\partial}{\partial t} \psi(x) = \hat{H} \psi(x) \quad (3.6)$$

Lineer olmayan Schrödinger eşitliği bir kısmi diferansiyel denklemdir.(boyutsuz formda);

$$i \partial_t \psi = -\frac{1}{2} \partial_x^2 \psi + \kappa |\psi|^2 \psi \quad (3.7)$$

gibidir.

3.3. Solitonlar

Solitonlar solitary (kararlı) dalgalar olarak da bilinir ve lineer olmayan dalgalardır. Bir soliton, lineer olmayan kısmi diferansiyel denklemin solitary, hareketli dalga çözümü olarak düşünülebilir. Solitary dalgalar patiküller gibi davranırlar. Solitary dalgaların herbiri sabit hıza ve şekle sahip hareketli dalgalardır. Ve bu solitonlar, dalgalar bir sabit ile temsil edilerek harmonik tuzak ($\omega_i = 0$) olmaksızın Gross-Pitaevskii'nin lineer olmayan tipi diferansiyel denklem çözümleridir [34]. Solitonlar diğer solitonlarla güçlü etkileşim içindedirler. İki tane solitar dalga birbirine yaklaştıkça yavaşça deforme olur ve tek bir dalga paketinde birleşirler. Bu dalga paketi, bir süre sonra çarpışmadan önceki aynı şekil ve hıza sahip iki solitary dalga olarak ayrılır. Belki faz değişikliği dışında çarpışmalar dışında aynı durumda kalırlar. Çarpışma dalgaların dalga özelliğine zarar vermez. Çarpışma anında dalga genliği iki dalganın toplam genliğinden küçük olur bu da lineer olmayan bir davranıştır [35]. Lineer olmama özelliği önemlidir. Birçok oluşum denklemleri için solitary dalgalar elastik olmadan dağılır ve radyasyona bağlı olarak enerji kaybeder. Solitonlar için bu böyle değildir. Lineer olmayan etkileşimden sonra solitar dalgalar aynı hız ve şekilde özelliklerini koruyarak dağılırlar. Kararlılık soliton fiziğinde önemli bir rol oynar. Lineer olmama bir solitar dalganın daha uzakta toplanmasına neden olur. Dağılma ise bir yerde toplanmış dalganın yayılma olayıdır. Bu iki zıt durumdan biri kaybedilirse solitonlar kararsız hale gelir ve sonuçta yok olurlar.

Bir Solitary dalga dağıtıcı bir ortamda ve doğrusal olmayan bir dengeden kaynaklanır. 1834 yılında Edinburg kanalındaki botun hareketi göz önüne alınarak

John Scott tarafından Solitary dalgası tanımlanmıştır. Solitonlara diğer bir örnek ise Brezilya Amazonlarında meydana gelen Tidal Bore olayı ya da Tsunami olayıdır. Yapılan çalışmalarda Solitonların lineer olmayan(non-lineer) Schrödinger denkleminin özel bir çözümü olduğu ortaya çıkmıştır.

$$i\hbar \frac{d\psi}{dt} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + g[\psi]^2 \right] \psi. \quad (3.8)$$

Solitonlar açık (bright) olabilir: Yüksek yayılan dalga paketleri ya da koyu (dark) olabilir: Maddenin gerisinde hareket eden holler, bu solitonlar g ' nin işaretine bağlı olarak atomlar arası etkileşimleri tipi(karakteri) itici ya da çekici olarak farklılaşır.

3.3.1. Bose-Einstein yoğunlaşmasında bright soliton

BEY'de Bright Solitonlar oluşturulmuş ve ilk zamanlardan beri gözlenmiştir. Atomun hareketi gibi dalgalarında yeni çok özel gösterimini kanıtlar ve BEY 'in tanımı ve nihai uygulamaları için önemli bir araç görevi üstlenir.

İlk olarak 1834 yılında bir kanalın yüzeyinde bu soliton zıt dalgaları tek bir dalga formunda birleştirip, orijinal şeklini kaybetmeden ya da ayrılmadan uzun mesafeler boyunca hareket eder.

Soliton dalgalar her türlü oluşabilir. Özellikle ses ve ışık dalgalarında çalışılmıştır. Son zamanlarda soliton ışık dalgaları, özellikle telekomünikasyon alanında kullanılır. Solitonlar BEY' de de var olabilirler. Çünkü bir BEY aynı kuantum durumunda bulunan tüm ultra soğuk atomlardan meydana gelir ve böylece bu dalgaya benzer bir hareket sergiler ve böylece tek atomun dalgası olarak göz önüne alınabilir. Bir tuzaktan muaf BEY' den sonra BEY atom dalgaları genellikle kısımlara ayrılır ya da kısaca yayılırlar.

Bununla birlikte önceki BEY deneylerinde araştırmacılar bir yeri işgal etmeyen atomları temsil eden dark (koyu) solitonları incelemiştir. Bunlar tek bir yoğunlukta şekil değiştirmeden yayılırlar.

Şimdi RİCE üniversitesi araştırma grubu Li atomu için temel BEY' den ayrılmış herbir gerçek atomların yoğunluğunu temsil eden Bright Solitonlar üretmişlerdir. Sonuç olarak bright solitonlar temel BEY atom dalgalarından ayrılmış tek tek atom dalgalarıdır. Kullanılan dar bir lazer ışığı BEY atomlarına yol gösterir. Rice grubu çekici olan Li atomları arasındaki etkileşimi uygun hale getirdiler ve herbiri birbirini mükemmel bir şekilde dengeler [36].

3.4 Çalışmayla İlgili Olaylar

3.4.1. Bloch Osilatörü

Bloch Osilatörü 1928 [37] yılında Bloch tarafından tahmin edilmiş katıhal fiziği alanında yapılan iyi bir çalışma olarak tanımlanmıştır. Bloch, kristaldeki ve kendisine etki eden statik elektrik alandaki parçacığın (elektron) uzaydaki dağılımını (osilasyon) tanımlamıştır. Bu olay kristallerde asla gözlenmemiştir. Gevşeme (relaksasyon) işlemlerinden(ağdaki yayılım bozuklukları, fononlar, vb) dolayı elektronlar bir bloch döngüsünü tamamlamadan önce sistemin yoğunluğu ortadan kalkar. Böylece bu, bağ uzunluğu relaksasyon zamanından daha küçük ve kuvvet sabitinin büyüklüğü ile orantılı olmasının aksine Bloch peiyodundaki diğer sistemleri araştırmak için büyük bir ilgi alanı olmuştur [38]. Periyodik ağda madde dalgaları fonksiyonu salınımına benzer Bloch yayılımının ortaya çıktığı Bose-Einstein yoğunlaşması bu sistemlerden biridir, bu bize ulaşılmayan diğer sistemlere ulaşma imkanı verir, periyodik potansiyel parametreleri ve onun yoğunlaşması hakkında deneysel kontrol olasılığı sağlar [39].

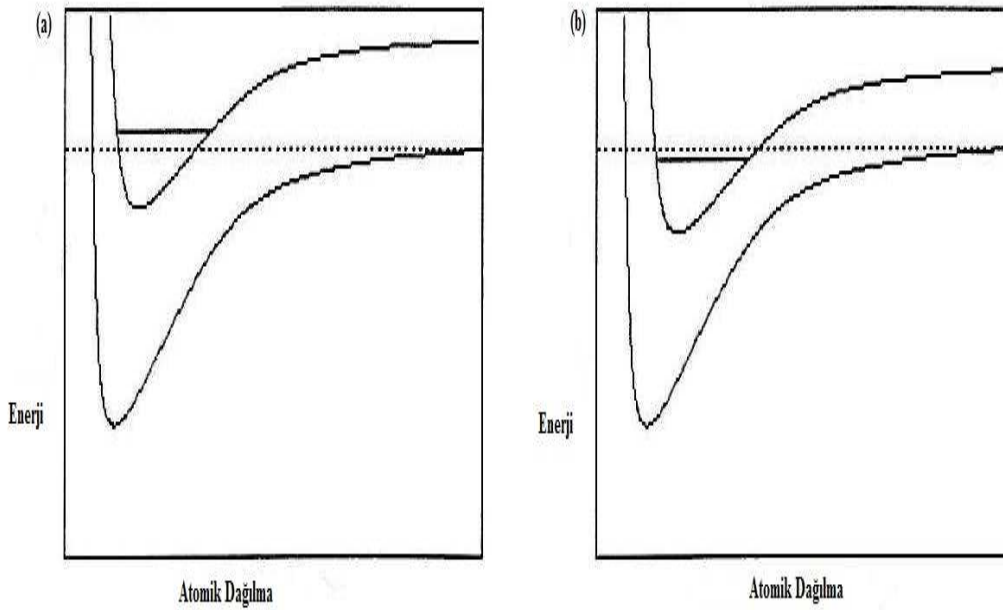
3.4.2. Mott yalıtkanlar

Maddenin özel bir halinden yapılmış Mott yalıtkanlar geleneksel(bilinen) band teorisi tarafından iletken madde olarak göz önüne alınır. Fakat gerçekte yalıtkan karakteristik özellik gösterir. Bu etki geleneksel band teorisinde göz önüne alınan elektron-elektron etkileşimlerinin sonucudur. Atomik yoğunluklar durumunda süperakışkan izolant-mott yalıtkan geçişinin teorik işlemleri Bose-Hubbard modeli tarafından elde edilir. Bu model ağdaki sadece bozon (ve fermiyonlar değil, geleneksel model elektronlarına benzer) parçacıklarını katıhal fiziğindedeki kullanılır [25,39].

3.4.3. Feshbach rezonansı

Atomlar arası potansiyel enerji, bir çift atomun çarpışmasının kinetik enerjisine eşit olduğu durumda Feshbach rezonansı ortaya çıkar. Feshbach rezonansı manyetik olarak indüklenir, uygulanan manyetik alanın değiştirilmesi, Zeeman etkisi vasıtasıyla temel durum enerjisi rezonansın yerine geçer [40].

Şekil 2.2.'de Feshbach Rezonansı mekanizması gösterilmiştir. Şekile baktığımızda aşağıdaki eğri iki atom arasındaki saçılma potansiyeli olarak tanımlanır(açık kanal). Yukarıdaki eğri de moleküller arası etkileşim potansiyelini açıklar(kapalı kanal). Çizgi kanallar arası bağlantının meydana geldiği yerde yukarıda aşağıda a olan rezonansın eşik seviyesinin belli bir zamanda (birden)değişmesine bağlı olduğu kabul edilir. Bu bağlantı iki kanla arasındaki geçişi izin verir. Feshbach Rezonansı açık kanaldaki parçacıkların saçılmasının artışından meydana gelir [41].



Şekil 3.2. Feshbach Rezonans Mekanizması

Ancak durum enerjisini kontrol etmek için optikal ađlardan birini kullanmak optiksel indüklenen Feshbach Rezonansı denilen ile bağlantılıdır. Bu optiksel rezonanslar hızlı ayarlanabilen kendi optical avantajları vardır. Ayrıca kompleks uzaysal yoğunluk dağılımı kolayca türetebilirler, bütün örneklerdeki saçılma uzunluğu yerini tutan sonuçlar. Manyetik rezonans olmasa bile Feshbach feshbach olsa da optical geçişler daima mevcuttur[42].

BÖLÜM 4. NÜMERİK METOTLAR

Bu bölümde ikinci dereceden kısmi diferansiyel denklemleri çözmek için kullanılan ana nümerik metotları açıklayacağız. Öncelikle bir boyutlu lineer sistemler için örneğin bir Gauss ve kuantum harmonik osilatörünün serbest genişlemesini açıklarız. Daha sonra lineer olmayan bir boyutlu sistemlerdeki genişlemeyi(soliton ve yayılması gibi) açıklarız.

Bu çalışmada tüm bu yöntemleri Gross-Pitaevskii eşitliğini (lineer olmayan Schrödinger Eşitliği) ve genişlemeyi, yayılmanın olup olmayışını bulmak için kullanırız. Son olarak sistemde bahsedilen adi diferansiyel denkleminin sistemini çözmek için bir metot açıklanmıştır.

4.1. Crank-Nicolson Metodu

Crank-Nicolson eşitliği aracılığı ile kısmi diferansiyel denklemi çözmek istiyoruz. Parabolik kısmi diferansiyel denklemler konusundaki araştırmalar özellikle standart olmayan başlangıç koşulları üzerinde yoğunlaşmıştır. Bu yöntem bilinmeyen parametrelerin bulunması gibi fiziksel problemlerin modellenmesinde kullanılmaktadır. Bu çalışmada bu yöntemi kullanarak standart olmayan başlangıç koşulu ile verilen zaman adımlı parabolik kısmi denklemlerin çözümü için parametreye bağlı sonlu fark yöntemleri geliştirilecek ve gösterilecektir [30]. Böylece [43] ,

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \alpha^2 \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} \quad 0 < x < l, \quad t > 0 \quad (4.1)$$

Aşağıdaki sınır koşulları gözönünde bulundurularak;

$$u(0, t) = u(l, t) = 0 \quad , t > 0 \quad (4.2)$$

Ve

$$u(x, 0) = f(x), \quad 0 \leq x \leq l \quad (4.3)$$

Oldukça önemli olan bu metod, t anında j noktasında ileri fark yöntem metodu ortalamasından bulunur.

$$\frac{\omega_{i,j+1} - \omega_{i,j}}{k} - \alpha^2 \frac{\omega_{i+1,j} - 2\omega_{i,j} + \omega_{i-1,j}}{h^2} = 0 \quad (4.4)$$

Ve yerel hata derecesi aşağıdaki gibi olan Sonlu diferansiyel Metodu ile bulunur ve yaklaşım hatası ihmal edilirse,

$$\tau_F = k \frac{\partial^2 u(x_i, \mu_j)}{\partial t^2} + O(h^2) \quad (4.5)$$

ve t anında j noktasında geri fark metodu uygulanırsa;

$$\frac{\omega_{i,j+1} - \omega_{i,j}}{k} - \alpha^2 \frac{\omega_{i+1,j+1} - 2\omega_{i,j+1} + \omega_{i-1,j+1}}{h^2} = 0 \quad (4.6)$$

Bu eşitlik de

$$\tau_B = -\frac{k}{2} \frac{\partial^2 u(x_i, \hat{\mu}_j)}{\partial t^2} + O(h^2) \quad (4.7)$$

Hata derecesine sahiptir.

Eğer ,

$$\frac{\partial^2 u(x_i, \hat{\mu}_j)}{\partial t^2} \approx \frac{\partial^2 u(x_i, \mu_j)}{\partial t^2} \quad (4.8)$$

olduğunu kabul edersek daha sonra ortalama fark metodunu ,

$$\frac{\omega_{i,j+1} - \omega_{i,j}}{k} - \frac{\alpha^2}{2} \left[\frac{\omega_{i+1,j+1} - 2\omega_{i,j+1} + \omega_{i-1,j+1}}{h^2} + \frac{\omega_{i+1,j} - 2\omega_{i,j} + \omega_{i-1,j}}{h^2} \right] = 0 \quad (4.9)$$

olarak yazarız. Bu denkleminin yerel hatası $O(k^2 + h^2)$ mertebesindedir. Elbette genel diferansiyellenebilirlik şartına uymak koşulu ile. Bu Crank–Nicolson Metodu olarak bilinir ve matris formda da temsil edilir. Herbir $j = 0,1,2,3 \dots$ değeri için

$$Aw^{(j+1)} = Bw^{(j)} \quad (4.10)$$

burada

$$\lambda = \alpha^2 \frac{k}{h^2} \quad w^{(j)} = (w_{1,j}, w_{2,j}, \dots, w_{m-1,j})^t,$$

Ve A ve B matrisleri aşağıdaki gibi verilir;

$$A = \begin{bmatrix} (1 + \lambda) & -\frac{\lambda}{2} & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ -\frac{\lambda}{2} & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & -\frac{\lambda}{2} & \dots & (1 + \lambda) \end{bmatrix}$$

Ve

$$B = \begin{bmatrix} (1 - \lambda) & \frac{\lambda}{2} & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \frac{\lambda}{2} & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & \frac{\lambda}{2} & \dots & (1 - \lambda) \end{bmatrix}.$$

A pozitif olduğundan dolayı köşegenlik baskındır. Ve üç köşeli matris tekil değildir. Herbir j (1,2,3, ...) değeri için w^j den w^{j+1} elde etmek için ya Crout Çarpanlara ayırma(6.7) yı ya da Sor algoritmasını(7.3) kullanabilir. Algoritma 12.3 Crank-Nicolson metoduna Crout çarpanlara ayırma tekniğininide dahil eder. Crank –Nicolson metodu $O(k^2 + h^2)$ ile orantılıdır. Burada algoritma (6.7)' yi ek A'da algoritma (7.3)' ü ek B'de görebiliriz.

Algoritma 4.1 Crank-Nicolson

Parabolik kısmi diferansiyel denklem için yaklaşık çözüm:

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) - \alpha^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}(x, t) = 0, \quad 0 < x < l, \quad 0 < t < T, \quad (4.11)$$

Denklemin sınır koşulları,

$$u(0, t) = u(l, t) = 0, \quad 0 < t < T \quad (4.12)$$

Başlangıç koşulu olarak

$$u(x, 0) = f(x), \quad 0 \leq x \leq l \quad (4.13)$$

dir.

Giriş Dosyası: son nokta l ; maksimum zaman T ; α sabit; tamsayılar $m \geq 3$, $N \geq 1$.

Çıkış Dosyası: Her bir $i=1,2,\dots,m-1$ ve $j=1,2,\dots,N$ değeri için $u(x_i, t_j)$ de $w_{i,j}$ yaklaşımı

1.Adım $h = \frac{l}{m}$, $\lambda = \alpha^2 \frac{k}{h^2}$, $k = \frac{T}{N}$, $w_m = 0$.

2.Adım $i = 1, 2, \dots, m - 1$ için $w_i = f(ih)$ belirlenir(başlangıç değerleri).3'den 11 ' e kadar olan adımlarda algoritma6.7 kullanılarak köşegenleştirilmiş lineer sistem çözülür.

3.adım $l_1 = 1 + \lambda$;

$$u_1 = -\lambda / (2l_1),$$

4.adım $i = 2, \dots, m - 2$ için

$$l_i = 1 + \lambda + \lambda u_{i-1} / 2 \quad , \quad u_i = -\lambda / (2l_i).$$

5.adım $l_{m-1} = 1 + \lambda + \frac{\lambda u_{i-1}}{2}$ belirlenir.

6.adım $j=1,2,\dots,N$ için 7-11 adımlarını yapalım.

7.adım $t=jk$;

$$z_1 = \frac{[(1-\lambda)w_1 + \frac{\lambda}{2}w_2]}{l_1}$$

8.adım $i=2, \dots, m-1$ için

$$z_i = \frac{[(1-\lambda)w_i + \frac{\lambda}{2}(w_{i+1} + w_{i-1} + z_{i-2})]}{l_i}$$

9.adım $w_{m-1} = z_{m-1}$ belirlenir.

10.adım $i = m - 2, \dots, 1$ için $w_i = z_i - u_i w_{i+1}$.

11.adım çıkış(t); (not: $t = t_j$.)

$$i = 1, \dots, m - 1 \quad x = ih;$$

Çıkış(x, w_i). (Not: $w_i = w_{i,j}$.)

12.adım SON(prosedür tamamlanır) [43].

4.1.1. Split-Step Metod

Bu sayısal metod potansiyele bağlı ikinci dereceden diferansiyel eşitliğinin çözümüne izin vererek Crank-Nicolson metodunu tamamlar (harmonik bir örnek olarak). Bundan böyle no-lineer terimi bir potansiyel gibi ele alarak artık başlayabiliriz. Ve aynı yöntemi kullanarak lineer olmayan eşitliklerinin çözümünü bulup, bize yararlı hale getirebiliriz (Gross-Pitaevskii eşitliği ve onun uzantıları gibi ,yani esas amacımız).

Farklı bir problem göz önünde bulunduralım mesela bir durum bariyerinden dalga paketinin kuantum mekaniksel dağılımı. Birkaç standart kitaplarda bu problem tartışıldı ve birbirleriyle etkileşen ve bariyerlere doğru hareket ederken dalga paketlerinin zaman genişlemesi (yayılmı) olarak tasvir edilen figürler gösterildi. Fakat bilgisayarlarla da dalga fonksiyonları ile ilgili hesaplamalar yapabilir ve birbirleriyle etkileşimlerini izleyebiliriz. Bir boyutta Schrödinger eşitliği [44];

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t) = (T + V)\psi(x,t) \quad (4.14)$$

Burada m parçacığın kütlesi, T kinetik enerjisi terimi ve V potansiyeldir. Kuantum mekaniğinde hem T hem de V operatörlerini göz önüne alınır. T açıkça bir türev operatörü olduğu halde, V ψ 'nin çarpanı olan basit bir fonksiyon iken $T\psi$, ψ 'nin türevi alınarak elde edilir.

Elbette biz bu problemi sonlu-fark yöntemi ile çözebiliriz. Ancak spektral metod tartışmaları terimlerin türevini bulmada bazen daha iyi başka yöntemler olduğunu göstermiştir. Şimdiki problemimiz, dönüşüm metodu kinetik enerji operatörünü bulmamıza olanak sağlar; fakat potansiyel enerji de yardımcı olmaz. Gerçekten ne elde etmek istiyoruz potansiyel terimini mi elde etmek ya da diğeri olan potansiyel terimini mi elde etmek istiyoruz. Özellikle uzay koordinatında potansiyel terimini bulmak isteriz ki bu basit bir fonksiyondur. Ve kolayca değerlendirilebilen dönüşüm uzayında türev terimini bulmak isteriz.

Şimdi Schrödinger eşitliğine dönelim. Bunun zamana bağlılığıyla ilgili olarak, eşitlik için kurallara uygun bir çözüm hemen yazabiliriz. (fiziksel bir not: çözümler kolayca yazılabilir fakat bunlar kullanışlı değildir. Bu durumda ancak gerçel çözüm Schrödinger eşitliğini sayısal olarak çözmek için mükemmel pratik bir yol bize gösterir). Öncelikle operatörü aşağıdaki gibi eksponansiyel olarak tanımlarız;

$$e^A = 1 + A + \frac{1}{2!}AA + \frac{1}{3!}AAA + \dots \quad (4.15)$$

Sahip olduğumuz kinetik ve potansiyel enerji operatörlerini de dahil etmek üzere bu matematiksel ifade operatörler için geçerlidir. Bu tanımla birlikte (4.11) eşitliği için gerçel çözüm aşağıdaki gibidir;

$$\psi(x, t) = e^{-i(T+V)(t-t_0)/\hbar} \psi(x, t_0) \quad (4.16)$$

Alıştırma 4.1

Bir operatörün üst alma tanımını kullanarak doğrulanan (4.11) eşitliği (4.13) eşitliğindeki Schrödinger eşitliği için bir çözümdür. Buna uygun $\delta_t = t - t_0$ 'i tanımlarız. Böylece zaman yayılımı (4.14) eşitliği ile verilir.

$$\psi(x, t) = e^{-i(T+V)\delta_t/\hbar} \psi(x, t_0) \quad (4.17)$$

Bu formül bize t_0 anında bilinen ψ 'den herhangi bir tanımdaki $\psi(x, t)$ 'yi hesaplamak için bize bir yönerge verir. Bu yönerge iki operatörün toplamını içerir. Bunu aşağıdaki gibi yazabiliriz.

$$e^{-i(T+V)\delta t/\hbar} = e^{-iT\delta t/\hbar} e^{-iV\delta t/\hbar} \quad (4.18)$$

Malesef bu tanım doğru değildir. Fakat doğru olsa idi, zaman yayılımı(genişlemesi) operatörünü iki terime ayırmada başarılı olabilirdik ve her ikisini ayrı ayrı elde edebilirdik. Kısaca şöyle diyebiliriz eşitlik geçerli değilse bozulma ya da yayılma geçerli bir yaklaşım olarak kullanılabilir. İki faktörde içine alan bu yayılımı(genişlemesi) operatörünü ayıran bu teknik, genel olarak split-operatör yaklaşımı olarak bilinir. Ve bu uzayın bize gösterdiğinden daha yaygın kullanım alınma sahiptir. (4.18) eşitliği neden geçerli değildir? Genelde farklı yollara başvurulduğunda türevler ve diğer operatörler farklı sonuçlar ortaya çıkarır. Örneğin $A = x$ ve $B = \frac{d}{dx}$ operatörlerini göz önünde bulunduralım. Sonra

$$A.B\psi = x \frac{d\psi}{dx} \quad (4.19)$$

Fakat

$$B.(A\psi) = \frac{d}{dx}(x.\psi) = \frac{dx}{dx}.\psi + x \frac{d\psi}{dx} = \psi + x \frac{d\psi}{dx} = \psi(1 + A.B) \quad (4.20)$$

Çünkü operatörlerin sırası önemlidir. Operatörler yer değiştiremez. Operatörlerin yer değiştirebilirliği A ve B komütatörleri tarafından belirtilebilir. Bu (4.21) eşitliğindeki gibi tanımlanmıştır.

$$[A, B] = AB - BA \quad (4.21)$$

Ve bu eşitlik bunun keyfi bir fonksiyon üzerinde işlem yapmasına izin verilerek değerlendirilir. Eğer operatörler birbirinden bağımsız ise o zaman operatörler yer değiştirebilir ve komutatör sıfırdır. Operatörümüz için aşağıdaki eşitliği yazabiliriz;

$$\left[x, \frac{d}{dx} \right] \psi = x\psi - \frac{d}{dx}(x.\psi) = -\psi \quad (4.22)$$

Ψ keyfi bir değer olduğu için, komutatör ψ 'den bağımsızdır; d/dx ve x arasındaki bir bağıntı ile ifade edebiliriz. Ve böylece ;

$$\left[x, \frac{d}{dx} \right] = -1 \quad (4.24)$$

Olarak yazarız. Şimdi de $e^A e^B$ gibi iki eksponansiyelin çarpımını göz önüne alalım. Operatörün ekponansiyel tanımına göre her bir faktörün genişlemesini aşağıdaki gibi doğrulayabiliriz.

$$e^A e^B = e^C \quad (4.25)$$

Yalnız ve yalnızca

$$C = A + B + \frac{1}{2}[A, B] + \dots \quad (4.26)$$

Olmalıdır. Bu ünlü Baker-Campbell-Hausdorff(BCH) teoremi olarak bilinir.

C'nin iki terimini bulalım tam anlamıyla BCH teoremi bize şunu söyler:

T ve V yer değiştirmedikçe (4.18) eşitliği geçersizdir ki genelde olmaz. Fakat daha da fazlası bu teorem bilinen hata yaklaşımlarını geliştirmede oldukça kullanışlıdır. Örneğin; (4.18) eşitliğini biliyoruz, eşitlikteki sadece $O(\delta^2)$ 'yi yok sayar. Çarpımın simetrik dağılımı kullanılarak kesin yaklaşımlar elde edilir. Örneğin aşağıdaki gibi $O(\delta_t^2)$ aracılığı ile tam kesin olan tanımdır .

$$e^{-i(T+V)\delta_t/\hbar} \approx e^{-iV\delta_t/2\hbar} e^{-iT/\hbar} e^{-iV\delta_t/2\hbar} \quad (4.27)$$

4.2. Tek Boyutta Örnekler

Aşağıda kuantum mekaniği basit problemlerin bir boyutta bilinen kesin (analitik) çözümleri ile onların sayısal(nümerik) çözümleri sonuçları karşılaştırılmış ve sayısal yöntem çözüm yaklaşımları kullanılarak örneklendirilmiştir.

4.2.1. Gaussianın Serbest Genişlemesi

Klasik mekanikte kinetik enerjilerin toplamı olan mekanik enerjiyi bunların kuantum mekaniğindeki işlemci karşılıkları ile birleştirerek schrödinger eşitliği elde edilir. Schrödinger denkleminin çözümü incelediğimiz sistemin izinli dalga fonksiyonlarını ve enerji özdeğerlerini verir. Dalga fonksiyonunu $\psi(x, t)$, kullanılarak sistemin ölçülebilir niceliklerini hesaplamak mümkündür. Schrödinger denklemi kuantum

sistemi hakkında bize bilgi veren bir fonksiyondur. Schrödinger denklemi kapalı formda

$$H\psi = E\psi \quad (4.28)$$

şeklinde yazılır. Operatör ve işlemcileri yerine yazdığımızda Sch. denklemi aşağıdaki gibi olur:

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \quad (4.29)$$

Öncelikle basit lineer kuyu problemi ile konuya başla yacağız. Sch. denklemini çözmek için $V(x,y,z)$ potansiyelin açık ifadesinin bilinmesi gerekir. Biz de burada daha basit olması için potansiyeli $V(x)$ gibi tek boyutta alırız. Burada bir boyutlu parçacık için Sch. denklemini göreceğiz. Uygulanan herhangi bir potansiyel olmadan Gaussian fonksiyonu orjinde yoğunlaşır. Zamanın bir fonksiyonu olarak Crank –Nicolson Metodu ile bir sistemin dinamiği çözülür.

Biz bir boyutta potansiyelin olmadığı serbest parçacık için schrödinger eşitliğini aşağıdaki gibi yazarız:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} = i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} \quad (4.30)$$

Dönüşüm uygularsak;

$$k\tilde{x} = 2kx, \quad \tilde{t} = 4w_R t \quad (4.31)$$

$$w_R = \frac{E_R}{\hbar}, \quad E_R = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

İçeriğini kullanarak (\sim) işareti kaldırarak ve gösterimi basitleştirirsek;

$$i\psi_t + \psi_{xx} = 0 \quad (4.32)$$

Şeklinde yazabiliriz. Burada t ve xx ifadeleri sırasıyla biri zamana göre birinci dereceden türevi ikincisi konuma göre ikinci dereceden denklem olarak adlandırılır.

Sınır koşulları göz önüne alındığında $\psi(-\infty, t) = \psi(\infty, t) = 0$ ve başlangıç koşulu :

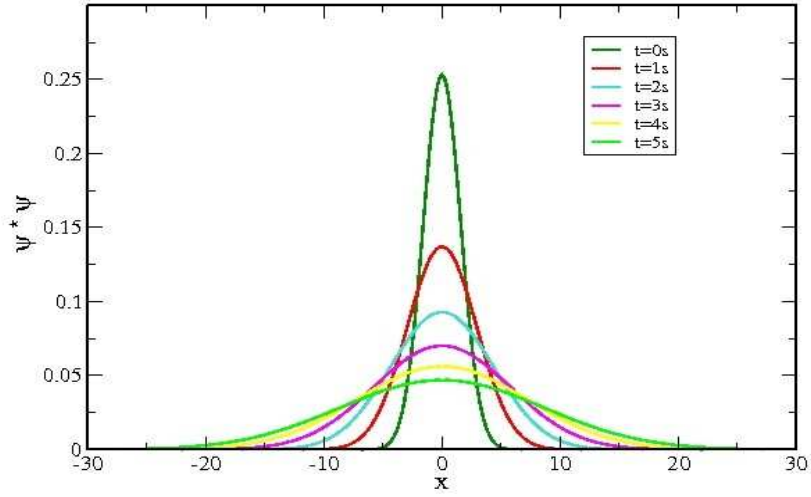
$$\psi(x', 0) = \frac{\alpha^{1/4}}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{\alpha x'^2}{2}} \quad (4.33)$$

Hem yoğunluk fonksiyonu $|\psi(x, t)|^2$ [45] ve gaussian serbest genişlemesi olan normal dalga fonksiyonu analitik çözüme sahiptir.

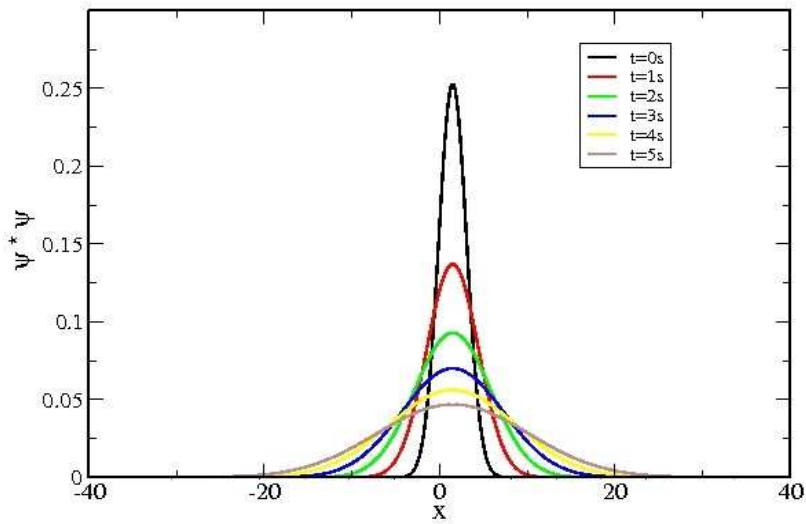
$$\psi(x, t) = \frac{\alpha^{1/4}}{\pi^{1/4}} \sqrt{\frac{1}{2ait+1}} \exp\left[\frac{-\frac{\alpha}{2}x^2 + i\alpha^2 x^2 t}{1+4\alpha^2 t^2}\right] ; \quad (4.34)$$

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\pi^{1/4}} \sqrt{\frac{\alpha}{1+4\alpha^2 t^2}} \exp\left[\frac{-\alpha^2 x^2}{1+4\alpha^2 t^2}\right] . \quad (4.35)$$

α sabit kabul edilir ve değeri bir olarak alınır. $h = 0,1$, $k = 0,001$ alınarak aşağıdaki grafik elde edilir.

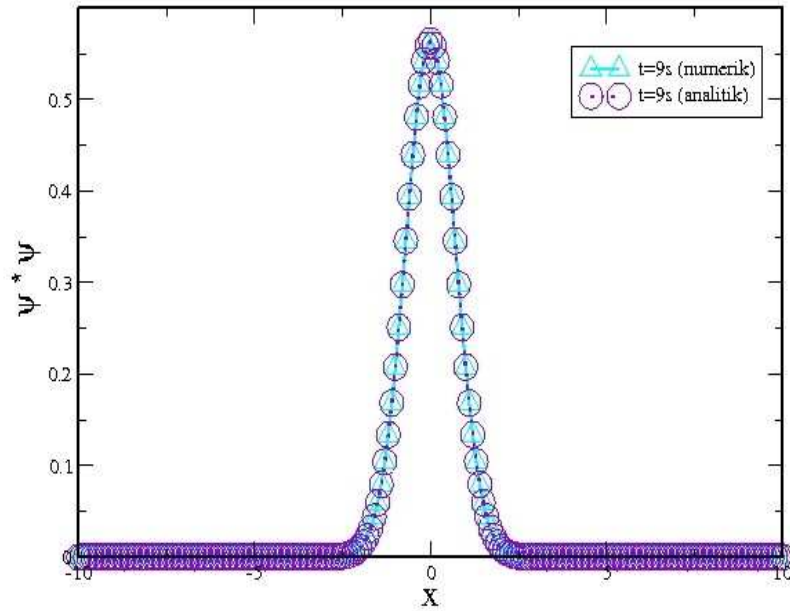


Şekil 4.1. : Uzaydaki olasılık yoğunluk dağılım fonksiyonu. $\alpha = 1$ iken zaman içinde Gaussian serbest genişlemesinin nümerik çözümü. Farklı eğriler farklı zamanları göstermektedir. Boyutsuz değerlerin sonuçları. $x_0 = 0$ başlangıç değeri olarak alınmıştır.



Şekil 4.2. Uzaydaki olasılık yoğunluk dağılım fonksiyonu. $x_0 = 1.5$ başlangıç değerindeki Gaussian serbest genişlemesinin nümerik çözümünü vermektedir. Görüldüğü gibi tek fark sadece grafik başlangıç noktası sağa doğru kaymıştır.

Şekil 4.1.'den de anlaşıldığı gibi Gaussian genişlemesi beklenildiği gibi bir yayılım göstermektedir. Şekil 4.3.' de analitik ve nümerik çözüm arasındaki farkın minimum olduğu görülmektedir. Crank-Nicolson metodu yaklaşımıyla beklenen hata değeri $O(h^2 + k^2)$ kadardır. Sayısal değer olarak 1.01×10^{-22} mertebesinde bir sonuç elde ederiz. Bu da oldukça küçüktür.



Şekil 4.3. Uzayda olasılık yoğunluk fonksiyonu. $t = 6$ ve $\alpha = 1$ değerlerinde nümerik ve analitik çözüm karşılaştırılmıştır. En büyük hata değeri $9,61 \times 10^{-05}$ kadardır.

4.2.2. Harmonik osilatörün temel durumu

Bir diğer bilinen kuantum harmonik kuyu problemini analiz edeceğiz. Bu durumda Schrödinger eşitliğinin konusu olan harmonik potansiyeli çözmek için Split-Step yaklaşımından yararlanacağız.

Harmonik potansiyel için bir boyutta Schrödinger eşitliği aşağıdaki gibi yazılır.

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} \quad (4.36)$$

Aşağıdaki değer dönüşümlerini izleyeceğiz:

$$\tilde{x} = x/l_0, \quad 2\tilde{t} = \omega t \quad (4.37)$$

$$l_0^2 = \frac{\hbar}{m\omega}, \quad \tilde{\psi} = \psi \sqrt{l_0}$$

K eşitliğinin içeriğini düzenler ve daha basit şekilde yazalım:

$$-\psi_{xx} + x^2 \psi = 0 \quad (4.38)$$

Burada türetilen t ve xx endekslerinden ilki zamanın birinci dereceden türevini ikincisi konumun 2.dereceden türevini tanımlar. Başlangıç koşullarında normalize olduğunu varsayarsak,

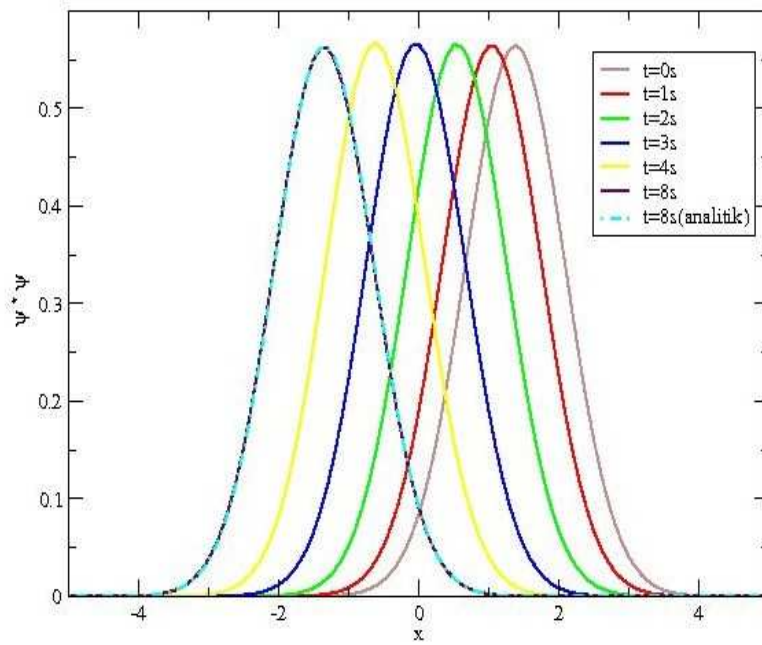
$$\psi(x, 0) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{1}{2}(x - x_0)^2\right] \quad (4.39)$$

Harmonik osilatörün potansiyeli için $\psi(x,t)$ ve bunun yoğunluğu içinde $|\psi(x,t)|^2$ 'nin çözümü vardır [45].

$$\psi(x, t) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/4} e^{-i(t+xx_0 \sin 2t - x_0^2 \sin 4t)} e^{-\frac{1}{2}(x-x_0 \cos 2t)^2} \quad (4.40)$$

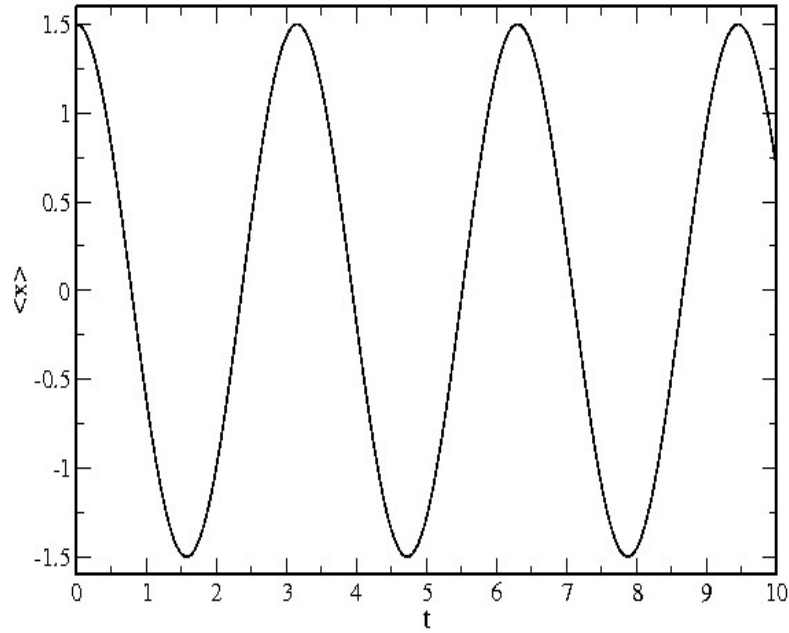
$$|\psi(x, t)|^2 = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/2} e^{-(x-x_0 \cos 2t)^2} \quad (4.41)$$

$h = 0.1$ ve $k = 0.001$ değerlerini kullanarak nümerik çözüm için elde edilen grafik aşağıdaki gibidir.



Şekil 4.4. Uzayda olasılık yoğunluk fonksiyonu. $x_0 = 1.4$ değerinde harmonik osilatörün koherent durumunun yayılım simülasyon gösterimi görülmektedir. Farklı eğriler farklı zamanı temsil eder. Düz çizgiler nümerik çözümü verir kesikli çizgi t=8 anındaki analitik çözümü verir. Özellikle t=8 anında nümerik ve analitik çözümün karşılaştırılması daha detaylı olarak gösterilmektedir.

En büyük hata $2,34 \times 10^{-03}$ mertebesindedir ve bizim bu yöntemdeki hata payımız $2,70 \times 10^{-03}$ mertebesindedir. Beklenildiği gibi fonksiyonun zamanla değişimini şekil 3.4.'de görebiliriz.



Şekil 4.5. Boyutsuz değerlerde zamanın fonksiyonu gaussianın ortalama durumu (Average position of the Gaussian function of time in dimensionless values)

4.2.3. Bir Solitonun Yayılımı

İlk olarak bir solitonun lineer olmayan yayılımını gözden geçireceğiz. Bu lineer olmayan schrödinger eşitliği ile temsil edilir.

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + g|\psi(x,t)|^2 \psi(x,t) = 0 \quad (4.42)$$

Burada önce basitleştirme fonksiyonunu kullanırız ve $\psi(x,t)$ yerine boyutsuz $u(x,t)$ ' yi kullanırız:

$$iu_t + u_{xx} + |u|^2 = 0 \quad (4.43)$$

burada ilk terim zamana bağılı ikinci terimde konuma bağılı ikinci dereceden türevi temsil eder. Hareket eden dalga tipine aşağıdaki biçimde bir çözüm ararız:

$$u(x, t) = r(x - ct)e^{i[\theta(x-ct)+nt]} \quad (4.44)$$

r ve θ gerçel fonksiyonları ve c ve n gerçel sabitler ile çözüm aranır. Bu problem için özel solitary dalgasının çözümü bulunmaktadır [46].

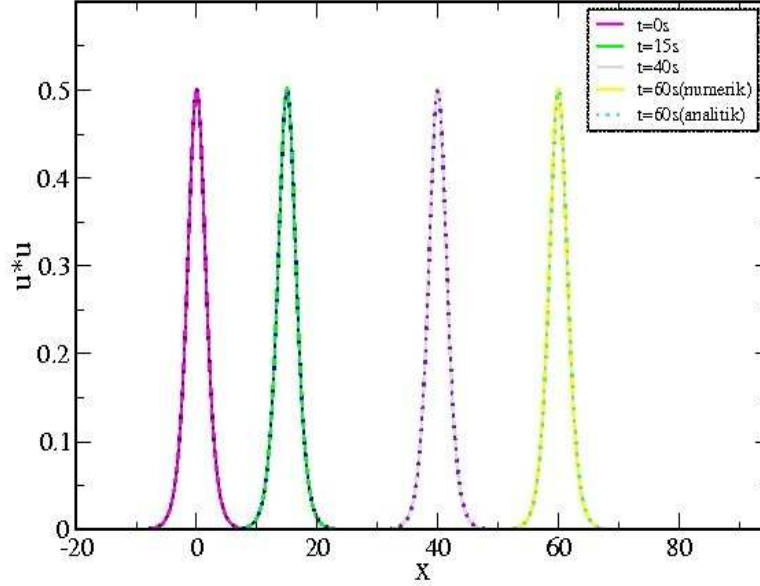
$$u(x, t) = ae^{i\left\{\frac{1}{2}c(x-ct)+nt\right\}} \operatorname{sech}\left\{\frac{a(x-ct)}{\sqrt{2}}\right\} \quad (4.45)$$

eşitlikteki $a^2 = 2\left(n - \frac{1}{4}c^2\right) > 0$ dır.

Başlangıç şartlarını kullanarak dalga fonksiyonunu normalize ederiz:

$$u(x, t) = ae^{i\{1/2cx\}} \operatorname{sech}\left\{\frac{ax}{\sqrt{2}}\right\} \quad (4.46)$$

$c = 1$, $n = 1/2$, $a = \frac{1}{\sqrt{2}}$ ve $h = 0,02$, $k = 0,001$ değerleri kullanılarak aşağıdaki grafiği elde ederiz.



Şekil 4.6. Uzayda olasılık yoğunluk fonksiyonu. Yukarıda Solitary dalgasının yayılım simülasyonu görülmektedir. Farklı zamanlardaki anlık durumlarda nümerik (kesikli çizgiler) ve analitik (noktalı çizgiler) çözümlerinin birbirleri ile olan uygunluğunu göstermektedir.

Şekil bize başlangıç fonksiyonunun sağa doğru yayılımını yani formunu koruduğunu gösterir. Nümerik hata yaklaşık $2,80 \times 10^{-03}$ kadardır.

4.2.3.1. Solitary dalgası

Bölüm üçte de bahsettiğimiz gibi solitonlar birer solitary (kararlı) dalgasıdır. Dalga olayları matematiksel fizikte çokça karşımıza çıkar. Onlar öncelikle bir dizideki dalgalar olarak karşımıza çıkarlar ya da belki bir su yüzeyinde ya da gerilmiş bir perde de ve benzeri alanlarda dalgalarla karşılaşabiliriz [46].

4.2.3.1.a Solitary dalgası ve keşfi

Solitary dalga'ya böyle denilmesinin sebebi tekil bir birim ve lokal olarak meydana gelmesidir, ilk olarak 1834 yılında Edinburgh-Glasgow kanalında J.Scott Russell tarafından gözlemlenmiştir; ve o bunu 'Büyük Geçiş Dalgası' olarak adlandırmıştır. Russell gözlemlerini 1844 'Dalgalar üzerine gözlemler' olarak "British Association" a su sözlerle raporlamıştır:

“ İnanıyorum ki bu fenomeni en iyi şekilde ortaya koymanın yolu onunla ilk karşılaşmamızda meydana gelen olayları tanımlamaktır. Dar bir kanalda bir çift at tarafından hızlıca çekilen bir bot'un hareketini gözlemliyordum, bot aniden durduğunda kanalda harekete geçirdiği su yığını hareketine devam etti; şiddetli bir çalkantı ile teknenin bas tarafında toplandı, ve tekneyi aniden geride bırakarak büyük bir hızla ileri dalgalandı, büyük bir solitary dalgası yüksekliğince, yuvarlak, pürüzsüz ve iyi biçimlendirilmiş bir dalga yığını form değişikliği veya hız eksilmesi yaşamadan kanal boyunca yoluna devam etti. Onu at sırtında takip ettim, saatte 8-9 mil civarında yuvarlanıyorken ve 30 feet civarında uzunlukta ve bir foot ve bir buçuk foot yüksekliğinde orijinal şeklini korurken yakaladım. Yüksekliği gitgide azaldı, ve bir-iki mil takipten sonra onu kanalın kıvrımlarında kaybettim. ”

Russell ayrıca bazı laboratuvar deneyleri gerçekleştirmiştir, su kanalının bir ucuna ağırlık düşürerek solitary dalgaları oluşturmuştur. Dalgaları hayatımızın birçok alanında görebiliriz. Solitary dalgalarının en güzel örneklerinden biride Tsunami olayıdır. Aynı zamanda optik solitonlarda vardır bunlarda haberleşme sistemlerinde bilgi alışverişi gibi sistemlerde de kullanılır.

No-liner Schrödinger eşitliğini aşağıdaki gibi yazarız:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + |\psi|^2 \psi = i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} \quad (4.47)$$

Dönüşüm uygularsak ;

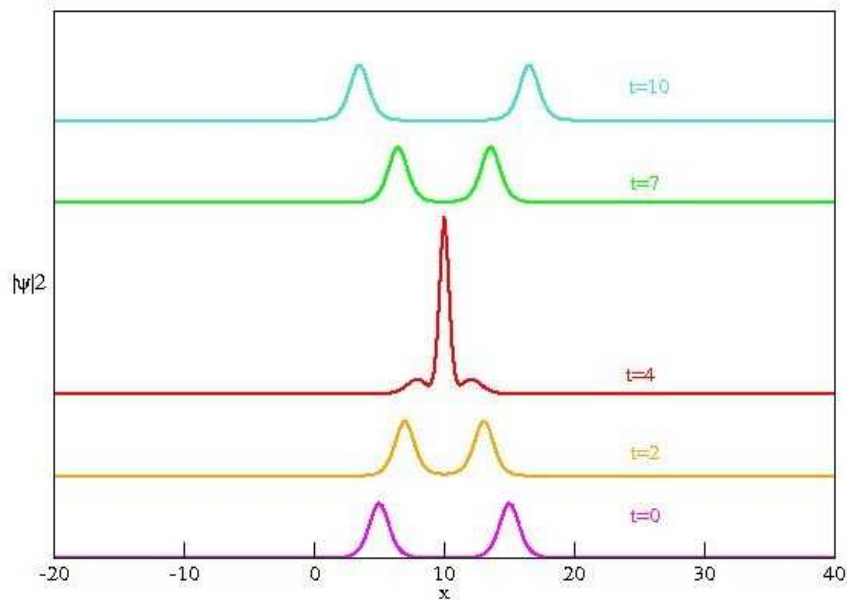
$$iu_t + u_{xx} + u|u|^2 = 0 \quad (4.48)$$

denklemini elde ederiz. Bu lineer olmayan Schrödinger eşitliğidir. Ve hareket eden dalganın çözümü aşağıdaki formda verilir:

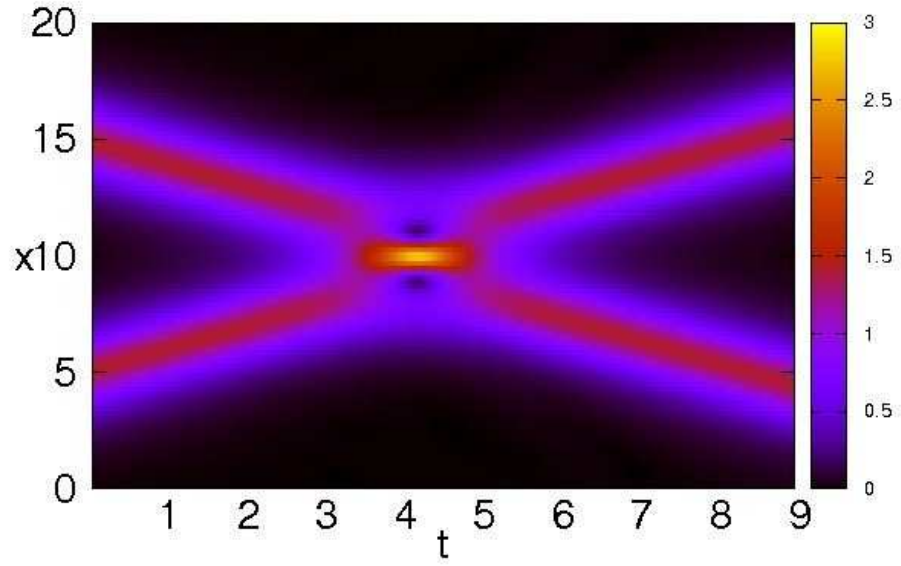
$$u = r e^{i(\theta+nt)} \quad (4.49)$$

burada $r(x - ct)$ ve $\theta(x - ct)$ reel fonksiyonlar, ve c ve n reel sabitlerdir. Solitary dalgasının çözümünü aşağıdaki formda gösteririz

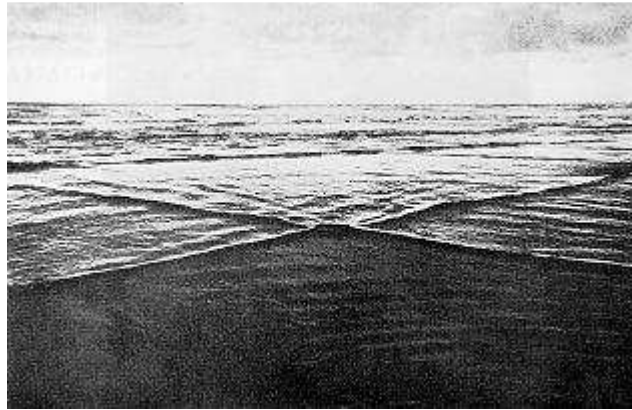
$$u(x, t) = a_1 e^{\frac{i}{2}c_1(x-c_1t)} \frac{\text{sech}(a_1(x-c_1t))}{\sqrt{2}} + a_1 e^{(-\frac{i}{2}c_1(x-c_1t))} \frac{\text{sech}(a_1(x-c_1t))}{\sqrt{2}} \quad (4.50)$$



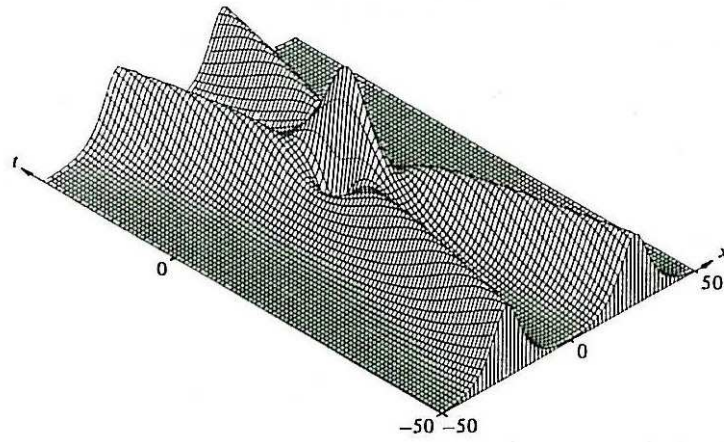
Şekil 4.7. iki solitonun çarpışma öncesini ,esnasını ve sonrasını göstermektedir. $t=0$ ve $t=2$ çarpışmadan önceki durumu yavaş yavaş dalgaların birbirine yaklaştığını; $t=4$ ise tam çarpışma esnasını $t=7$ ve $t=10$ çarpışmadan sonraki solitary dalgalarının gittikçe birbirinden nasıl ayrıldığını göstermektedir.



Şekil 4.8. Bir önceki şeklin üstten görünümüdür. Siyah renkteki yerlerde herhangi parçacık bulunmamaktadır. Yan taraftaki ışık çubukta aşağıdan yukarıya gidildikçe parçacık yoğunluğunun arttığını gösterir.



Şekil 4.9 Denizde meydana gelen solitonların görünümü.



Şekil 4.10. iki solitonun etkileşimine oldukça yakın bir çözüm verir. Bu çözüm $u(x, 0)$, birbirinden farklı iki solitonun doğrusal olarak çakışmasıdır, başlangıç değerleri için Pseudo-Spektral metod kullanılarak eşitliğin nümerik integrasyonu ile çözüm bulunur.

Yukarıdaki şekil bizim fortran bilgisayar programı ile hesaplayıp bulduğumuz şekil ile benzerlik içerisindedir.

4.2.3.1.b Tsunami

Merkezi deniz dibinde olana derin depremlerden sonra zemin çökmesi ve taban kayması ile oluşan dev dalgalara Japonlar tarafından verilen isim olan Tsunami şiddetli sarsıntılardan sonra kıyı bölgeleri için büyük tehlike oluşturuyor. Okyanus kütlelerinde var olan sismik bir şoktan doğan tsunami dalgaları onlarca metre yüksekliğe ulaşabiliyor ve deniz kıyısındaki topraklarda yıkıcı etki yapıyor. Depremlerden sonra oluşan tsunamiler diğer deniz dalgalarından farklıdır. Derin denizde varlığı hissedilmezken sığ sularda yeri geldiğinde bazen 30 metreye kadar yükselerek çok şiddetli akıntılar yaratabiliyor. Tsunami ilk oluştuğunda tek dalga ama kısa süre içerisinde üç ya da beş dalgaya dönüşerek çevreye yayılmaya başlıyor. Bu dalgaların genelde birincisi ve sonuncusu zayıf oluyor fakat diğer dalgalar etkilerini kıyıda hissettirebilecek bir enerji ile kıyıda ilerliyor.

4.3. Fortran Programı

1953 yılının sonlarında, IBM'de çalışan John W. Backus ve ekibi IBM 704 ana-bilgisayarında daha verimli çalışabilecek bir programlama dili önermiştir. İlk taslak "The IBM Mathematical FORMula TRANSSlating System" adlı altında 1954'de tamamlanıp 1957'de 32 deyim içeren ilk Fortran derleyicisi dağıtımı yapılmıştır. Takip eden yıllarda her yeni sürümde gelişerek, 1958'de FORTRAN II ve FORTRAN III, 1961'de FORTRAN IV, 1966'da FORTRAN 66 1977'de FORTRAN 77 derleyicileri kullanıma sunulmuştur. Uzun bir süre sonra, önemli değişiklikler yapılmış Fortran 90 sürümü oluşturulmuştur. Hemen ardından, birkaç küçük değişiklikle Fortran 95 geliştirilmiştir [47].

Neden fortran programını tercih ediyoruz?

Fortran, sayısal hesaplamada güçlü ve yeterince esnek bir dildir. Fortran, diğer dillerde olamayan esnek kütüphane fonksiyonlarına sahiptir. Fortran, tanımlayıcı adları küçük-harf büyük-harf ayrımı yapmaz. Fortran, basit bir yapısı olduğu için, programlama giriş iyi bir dildir. Fortran, diğer dillerde olmayan esnek kütüphane fonksiyonlarına sahiptir. Fortran, sayısal hesaplamada C/C++, Java ve görsel programlama dillerinden daha güçlü ve hızlıdır. Fortran programında kullanılan başlıca terimler:

PROGRAM : deyimi ana programın başladığını gösterir. Programın adı Cember olarak verilmiş.

IMPLICIT NONE : deyimi program içinde kullanılacak değişken ve sabitlerin hepsini tanımlamaya zorlar. Aksi halde, ilk harfi I,J,K,L,M,N ile başlayan değişkenler tamsayı diğerleri ise gerçel sayı kabul edilir.

REAL :: R, Alan, Cevre : Program içersinde kullanılan R, Alan ve Cevre değişkenlerinin veri tipi gerçel sayı tipi (real) olarak bildirmiştir.

PARAMETER : Program çalıştığı sürece içeriği değişmeyecek olan sabitlerin bildiri için kullanılan bir deyimdir.

PRINT : Ekranı sabit veya değişkenleri yazdırmak için

READ : Klavyeden veri okumak için kullanılan bir deyimdir.

* ve ** : * çarpma işlemi için, ** kuvvet alma işlemi için kullanılan aritmetik operatörlerdir.

END PROGRAM :Ana programın bittiği yeri işaret eder.

CALL : Bu komut herhangi bir işlem bloğundan herhangi bir işlem bloğunu çağırmak için kullanılır.

Fortran yeni bir dilgi gibi düşünülebilir. Bilgisayar ve verileri giren kişi arasında kurulmuş iletişim dilidir. Yoksa bilgisayara kendi seçtiği işlem zincirlerini uygulamak isteyen her kişi bu karmaşık, hataya açık ve denetlemesi oldukça zor olan makine dili komutları ile uğraşmak zorunda kalacaktı. Programlama dillerinin oluşturulmasını sağlayan neden budur. Fortran 90' ı kullandık burada.Ve burada fortran programı ya da kaynak kodları .f90 olan dosyasında saklanır. Fortran 90 ve 90+, argüman sayısı değişebilen esnek fonksiyonlar ve subrutineler tanımlamaya ve bir alt programın argüman listesinden istenilenleri kullanmaya izin verir. Alt programların argüman sayısı esnektir [48].

4.4.1. Gross-Pitaevskii denkleminin nümerik çözümünü yapan fortran programı

Programı oluştururken, Gross Pitaevskii denklemini çözmek için nümerik yöntem olarak, Cranck-Nicolson metodu ve split –Step metodu kullanılmıştır.

Program, bir ana program ve birkaç alt programdan oluşmaktadır. Ana program metodun gerektirdiği gibi alt programları her defasında çağırır. Alt program belirli olan işlem zincirini belli parametrelere uygular.Ana program alt programı çağırmadan önce onunla alakalı ön düzenlemeyi yapar ve alt program bittikten sonra gereki olan değeri bize verir.

Gross-Pitaevskii denklemini bilindiği gibi lineer olmayan Schrödinger eşitliğinden ibarettir. Programda Cranck-Nicolson ve Split-Step metodunu kullanarak ki bu bir alt programdır. Schrödinger eşitliği bulunur ve bunun çözümünden de dalga fonksiyonunu elde ederiz. Bulunan bu dalga fonksiyonu da kullanılarak atomların bulunma olasılığı ve olasılık yoğunluğu elde edilir. Şemalaştırırsak;

Cranck-Nicolson+Split-Step Metod kullanılarak → Schrödinger eşitliği çözülür → bu çözüm bize dalga fonksiyonunu verir → bulunan dalga fonksiyonu da $\langle x \rangle$ ve $\langle x^2 \rangle$ ' ı değerleri bize verir.

Burada bu kadar işlemi yapmak gerek zaman açısından gerek sonuçların doğruluğu açısından fortran programı kullanılmıştır. Ve program esnek olduğu için kullanım açısından çok rahattır yapılmasını istemediğin işlemin başına ‘!’ işareti koymak yeterlidir. Ve yine işlem aralığını belirlemek de senin elindedir. İstersen büyük matris ele alırsın istersen işlemi sadece birkaç matrisli sistem ile bitirebilirsin.

Programda öncelikle Cranck Nicolson sabiti(β) için bir büyük bir küçük değerler verilmiştir. Büyük olanlarda elde edilen sonuçlarda uyumsuz olan nümerik ve analitik çözümden dolayı betanın küçük olan değerlerinde hesaplamalar yapılmıştır. Genelde başlangıç zamanı olarak sıfır kullanılmıştır. Hesaplamalarda kullandığımız fortran programı ekte verilmiştir.

BÖLÜM 5. SONUÇLAR

Bu çalışmada bir boyutlu lineer olmayan soliton yayılımını hesaba katarak Bose-Einstein yoğunlaşmasının dinamikleri ve kararlılığını gösterildi. Bu sistemler tipik lineer olmayan kübik Schrödinger eşitliği tarafından tanımlanır.

Uzaysal ve zamansal 2.dereceden kısmi diferansiyel denklemlerin nümerik çözümleri için teknikler kullanıldı. Lineer ve lineer olmayan terimlere ilave olarak korunumlu ya da korunumsuz ve ihtiyacımız olan kodlar (kurallar) uyarlandı.

Bose-Einstein yoğunlaşmasına uygulanan lineer olmayan Schrödinger eşitliği başlıca optiksel ve madde dalgaları gibi alanlarda da çalışıldığı için oldukça önemlidir. Çok düşük sıcaklıkta tek parçacıklı sistemin dinamiği ve optiksel ağların etkisi incelendi.

Optiksel ağ, deneysel olanaklar tarafından hareket ederek ve lineer terim eklenerek tanımlanabilir ya da lineer olmayan terim hesaba katılır. (Feshbach rezonansı aracılığı ile iki cisim arasındaki saçılma uzunluğu değişerek deneysel çalışmalar yapılır).

Uzaysal optiksel yoğunluk değişimi, atomik saçılmanın periyodik uzaysal değişimine yol açar. Bu nedenle son yıllarda BEY 'na optiksel ağlarda önem verilmiştir. Hem teorik hem deneysel alandaki soliton yayılımı ve oluşumu ile ilgili Feshbach rezonansı ve Mott yalıtkanı gibi çeşitli fiziksel olaylara ilgisi nedeniyle BEY 'e önem verilmiştir.

Madde dalgalarının dinamiği BEY' da çok çalışılmaktadır. Soliton ya da periyodik dalgalar biçiminde ve fizik ötesinde birçok alanda örneğin deniz bilimi, makine mühendisliği, telekomünikasyon, gibi birçok alanda da buna başvurulmaktadır.

Deneysel açıdan bakacak olursak; lineer optik ağlar son olarak BEY kullanılmıştı ve Bloch titreşimleri olayları, Mott yalıtkanlarda kuantum fazgeçişleri ve soliton oluşumları elde edildi. İncelenen optiksel soliton ve madde dalgaları hem zaman hem

konuma bağılı olarak lineer olmayan ve dağılımdan meydana gelen farklı manipülasyon değerlerinde ortaya çıkar.

Optiksel iletişim ve bilgi toplama alanlarında uygulanan ve dağılım tarafından kontrol edilen solitonlar, güçlü modülasyon ve uzaysal zaman saçılması açısından birçok avantaja sahip olduğu için ilgi çekicidir.

Bu çalışmada aşağıdaki sıra izlendi:

ikinci kısımda kısaca BEY hakkında bilgi ve tarihsel gelişimi hakkında bilgiler verilmiştir.

Çalışmada harmonik potansiyelde tuzaklanmış bozonlarda gözlenen Bose-Einstein yoğunlaşmasının özelliklerini Crank–Nicolson metodu ve Split-Step metodu kullanılarak incelenmiştir. Hesaplamalar Crank Nicolson eşitliği için nümerik sabit olan β değerinin küçük değerlerinde yapıldı. Çünkü β değerinin büyümesi demek analitik ve nümerik metod arasında büyük bir uyumsuzluğun olduğunu gösteriyordu. Ve böylece tüm çözümleri β değerinin küçük olduğu durumlarda inceledik. Sayısal çözümde Split-Step, Crank-Nicolson gibi metotlar doğrusal olmayan Schrödinger eşitliği gibi doğrusal olmayan kısmi difreansiyel denklemlerini çözmek için kullanılan nümerik metotlardır.

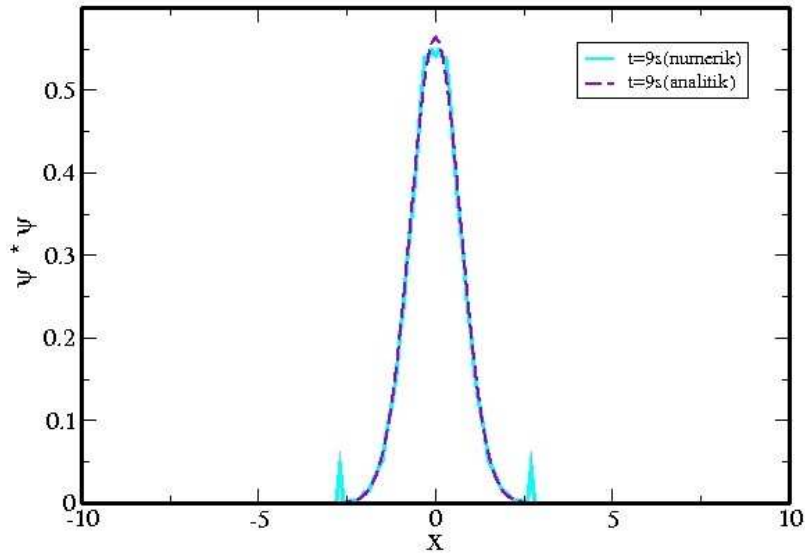
Çalışmada 1D lineer olmayan soliton yayılımını hesaba katarak Bose-Einstein Yoğunlaşmasının kararlılığını ve dinamiklerini gösterdik. Bu sistemler tipik lineer olmayan kübik Schrödinger denklemi tarafından tanımlanır. Biz yoğunluğun kararlılığını elde etmek için dış etkileşimlerin yanı sıra iki atom arası etkileşimin olduğu durumu ararız. Deneysel durumlarda hesaba katılarak farklı etkileşim tipleri kullanıldı.

Bose-Einstein Yoğunlaşmasına uygulanan doğrusal olmayan Schrödinger eşitliği başlıca optiksel ve madde dalgaları gibi alanlarda daha geniş kapsamlı olduğu için çok önemlidir. Çok düşük sıcaklıktaki birçok parçacıklı sistemin dinamik özellikleri incelendi.

Üçüncü kısımda çalışma ile ilgili teorik bilgiler verilecektir. Bu kısımda elde ettiğimiz nümerik sabitin küçük değeri için tüm çözümleri yaptık. Aşağıdaki şekilden de anlaşılacağı gibi nümerik sabit (Ek C' deki β değeri) büyük iken nümerik ve

analitik çözüm arasındaki uyumsuzluktan kaynaklanmaktadır. Ve bozon gazlarında gözlenen Bose-Einstein yoğunlaşmasının temel durum özellikleri ve parçacıklar arası etkileşiminin şiddetine göre değişimi Gross-Pitaevskii denklemleri kullanılarak elde edilmiştir.

Parçacıklar arası etkileşimin zayıf olduğu seyrek gaz durumunda Gross Pitaevskii eşitliğinin iyi sonuç verdiği gözlenmiştir. Fakat etkileşim arttıkça GP eşitliği geçerliliğini yitirmeye başlamıştır.



Şekil 5.1. Nümerik terim betanın büyük olduğu değerlerde nümerik ve analitik çözümün karşılaştırılması. Şekil büyük değerlerde uyumsuz olduğunu gösterir.

Dördüncü kısımda verilen nümerik çalışmalarla alakalı sayısal yöntemler gösterildi. Nümerik metotlara uygulanan örnekler için kesin çözümler ile birlikte öğretici amaçlı olması için hata değerleri de elde edilmiştir. Soliton dalgalarından bahsedilmiştir. Ve buna örnek olarak tsunami olayı gösterilmiştir.

KAYNAKLAR

- [1] AKBAŞ, H.Z., ATAV, Ü., Bose-Einstein Yoğunlaşmasına Doğal Orbitaler Yaklaşımı. ,1,2009.
- [2] AYDINER, E., 2001 Nobel Fizik Ödülü Bose-Einstein Yoğunlaşması. 2001.
- [3] PENROSE, O. and L. Bose-Einstein Condensation and Liquid Helium. Physical Review 97,1474-1489, 1955.
- [4] H. T. C. Stoof, M. Houbiers, C. A. Sackett, and R. G. Hulet, Phys. Rev. Lett. **76**, 10 (1996).
- [5] BUGOLİUBOV, N. , On the Theory of Superfluidity. J.Phys.USSR, 11(1):23, 1947.
- [6] ANDERSON, M.H., ENSHER,J.R., MATHEWS, M.R., WIEMAN, C.E., CORNELL, E.A. (1995). Observation of Bose.Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor.Science 269,198-201,1995.
- [7] GARDNER, J. R. et al. (1995). Collisions of Doubly Spin Polarized Ultracold ⁸⁵Rb Atoms. Physical Review Letters **74**, 3764–3767, 1995.
- [8] DAVIS, K.B. et al. (1995). Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms. Physical Review Letters **75**, 3969–3973, 1995.
- [9] BRADLEY, C. C., SACKETT, C. A., TOLLETT, J. J., and HULET, R. G. (1995). Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interaction. Physical Review Letters **75**, 1687–1690, 1995.
- [10] FRİED, D. et al. (1998). Bose-Einstein Condensation of Atomic Hydrogen. Physica Review Letters **81**, 3811–3814, 1998.
- [11] MODUGNO, G. et al. (2001). Bose-Einstein Condensation of Potassium Atoms by Sympahthetic Cooiling. Science **294**, 1320–1322, 2001.
- [12] JOCHİM, S. et al. (2003). Bose-Einstein Condensation of Molecules. Science. **302**, 2101–2103, 2003.
- [13] ÖZTÜRK,T., Harmonik Olarak Tuzaklanmış Bozonlarda Bose-Einstein Yoğunlaşması, Yüksek Lisans Tezi, Selçuk Üniversitesi,6,26,2005.
- [14] KETTERLE, W., Experimental Studies of Bose-Einstein Condensation, Physics

Today, Vol.52, Iss.12, p.30, 1999.

- [15] DAVIS K.B et al., Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms Phys. Rev.Lett., Vol.75, Iss.22, p.3969, 1995.
- [16] ANDERSON M.H, et al., Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor, Science, Vol.269, Iss.5221, p.198, 1995.
- [17] MOERDIJK A.A, Prospects for Bose-Einstein Condensation in Atomic Li-7 and Na-23, Phys. Rev. Lett., Vol.73, Iss.4, p.518, 1994.
- [18] PINES, D. and Nozières P, The Thoery of Quantum Liquids, W.A Benjamin, Inc. 1966.
- [19] HUANG, K., Statistical Mechanics, 1987.Jon-Wiley & Sons
- [20] <http://colorado.edu/physics/2000/bec/> 03-01-2010.
- [21] JILA <http://jila.colorado.edu/bec/> 08-11-2009.
- [22] <http://gencmatematik.net/akademik-matematik/numerik-analiz.html>/02-02-2010.
- [23] SIGWARTH, O., Gross-Pitaevskii equation in atomic Bose-Einstein conensates 09-12-2004.
- [24] EINSTEIN,A.,Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften I, 261 (1924); I, 3 (1925). Traduzido para o português por Dahmen, S. R. em Rev. Bras. Ens. Fis. 27(1), 113 (2005).
- [25] PÍZA, A. F. R. de Toledo, Condensados Atômicos de Bose-Einstein, acessado em 19/02/2008, http://fma.if.usp.br/_piza/notas_de_aula.html.
- [26] ANDERSON, M. H., ENSHER, J. R., MATTHEWS, M. R., WIEMAN, C. E. e CORNELL, E. A.,Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor, Science 269,198 (1995).
- [27] ANDERSON, M. H., ENSHER, J. R., MATTHEWS, M. R., WIEMAN, C. E. e CORNELL, E. A.,Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor, Science 269,198 (1995).
- [28] BRADLEY, C. C., SACKETT, C. A., TOLLET, J. J. e HULET, R. G., Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interactions, Phys. Rev. Lett. 75, 1687 (1995).
- [29] ABDULLAEV, F. Kh. e GARNIER, J., Propagation of matter-wave solitons in periodic and random nonlinear potentials, Phys. Rev. A 72, 061605(R) (2005).

- [30] Francisco da Luz, H.L., *Sistemas não-lineares aplicados a condensados atômicos com interações dependentes do tempo*, São Paulo, 2008
- [31] PÍTAEVSKIĪ, L. e STRÍNGARĪ, S., *Bose-Einstein Condensation*, 1st ed., Oxford University Press, New York, 2003.
- [32] Gross, E. P., Structure of a Quantized Vortex in Boson Systems, *Il Nuovo Cim.*20(3),454 (1961) Pitaevskii, L. P., Vortex lines in an imperfect Bose gas, *Sov. Phys. JETP* 13, 451 (1961).
- [33] ŞENEL, M., AYBEK, A.Ş. *Quantum Fiziği*
- [34] DRAZIN, P. G. e JOHNSON, R. S., *Solitons: an introduction*. 1st ed., Cambridge University Press, Cambridge, 1996.
- [35] ABDULLAEV, F. Kh., GAMMAL, A., KAMCHATNOV, A. M. e TOMİO, L., Dynamics of bright matter wave solitons in a Bose-Einstein Condensate, *Int. J. of Mod. Phys. B* 19(22),3415 (2005).
- [36] <http://www.gencomatematic.net/akademik-matematik/numerik-analiz.html>
- [37] BLOCH, F., Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern, *Z. Phys.* 52,555 (1929).
- [38] KOLOVSKY, A. R. e PONOMAREV, A. V., Damped Bloch oscillations of cold atoms in optical lattices, *Phys. Rev. A* 66, 053405 (2002).
- [39] MORSCH, O. e Oberthaler, M., Dynamics of Bose-Einstein condensates in optical lattices, *Rev. Mod. Phys.* 78, 179 (2006).
- [40] FRİEDRİCH, H., *Theoretical Atomic Physics*, 2nd ed., Springer Press, New York, 1998.
- [41] BRAATEN, E. e HAMMER, H.W., Universality in few-body systems with large scattering length, *Phys. Rep.* 428, 259 (2006).
- [42] THEİS, M. et al., Tuning the Scattering Length with an Optically Induced Feshbach Resonance, *Phys. Rev. Lett.* 93, 123001 (2004).
- [43] BURDEN, R.L., Faires, J.D., *Burden_and_Faires_Numerical_Analysis_7th_Edition.djvu* 704-714
- [44] DEVİRES, P.L., *A First Course in Computational Physics*, 377, 1948.

- [45] SAKURAI, J. J., Modern Quantum Mechanics. 2nd ed., Addison Wesley, 1994.
- [46] DRAZİN, P. G. e Johnson, R. S., Solitons: an introduction. 1st ed., Cambridge University Press, Cambridge, 1996.
- [47] <http://www1.gantep.edu.tr/~bingul/> 29-10-2010.
- [48] BİNBAŸ, N.E., Bloch Denklemlerinin Fortran'da Nümerik Yöntemlerle Çözümü, Yüksek Lisans Tezi, Dicle Üniversitesi, 2001.

ÖZGEÇMİŞ

1986 yılında Tarsus' da doğdum. Öğrenimime ilk olarak 1992 yılında Kerime Özkul İlköğretim Okulu'nda başladım. Orta öğretimime Turgut İçgören İlköğretim Okulu'nda devam ettim. Lise öğretimimin hazırlık ve birinci sınıfını Barbaros Hayrettin Lisesi' nde geriye kalan iki seneyi İstanbul' da Üsküdar Lisesi' nde tamamladım. 2004 yılında Sakarya Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik bölümünü kazandım. 2008 yılında Sakarya Üniversitesi' nde Atom ve Molekül Fiziği Anabilim dalında yüksek lisans eğitime başladım. 26. Uluslararası Fizik Kongresinde Atom, Molekül ve Plazma Fiziği alanında sözlü bildirime katıldım. 2009 yılında Erasmus programı ile Almanya' da Augsburg Üniversitesine geldim ve burada Bose-Einstein Yoğunlaşması alanında bir çalışmaya başladım ve hala devam etmekteyim.