

T.C.
ADNAN MENDERES ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI
2015-YL- 018

TUZAKLANMIŞ PARÇACIKLARIN TERMODİNAMİK
ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

Mehmet Şirin AKIN

Tez Danışmanı:
Yrd. Doç. Dr. Haydar UNCU

AYDIN

T.C.
ADNAN MENDERES ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ MÜDÜRLÜĞÜNE
AYDIN

Fizik Anabilim Dalı Yüksek Lisans Programı öğrencisi Mehmet Şirin AKIN tarafından hazırlanan Tuzaklanmış Parçacıkların Termodinamik Özelliklerinin İncelenmesi başlıklı tez, 21.01.2015 tarihinde yapılan savunma sonucunda aşağıda isimleri bulunan jüri üyelerince kabul edilmiştir.

	Ünvanı Adı Soyadı	Kurumu	İmzası
Başkan :	Prof. Dr. Halil YARANERİ	Adnan Menderes Ün.	
Üye :	Yrd. Doç. Dr. Metin BİLGE	Ege Ün.	
Üye :	Yrd. Doç. Dr.Haydar UNCU	Adnan Menderes Ün.	

Jüri üyeleri tarafından kabul edilen bu Yüksek Lisans tezi, Enstitü Yönetim Kurulunun sayılı kararıyla .../.../2015 tarihinde onaylanmıştır.

Prof. Dr. Aydın ÜNAY
Enstitü Müdürü

T.C.
ADNAN MENDERES ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ MÜDÜRLÜĞÜNE
AYDIN

Bu tezde sunulan tüm bilgi ve sonuçların, bilimsel yöntemlerle yürütülen gerçek deney ve gözlemler çerçevesinde tarafımdan elde edildiğini, çalışmada bana ait olmayan tüm veri, düşünce, sonuç ve bilgilere bilimsel etik kuralların gereği olarak eksiksiz şekilde uygun atıf yaptığımı ve kaynak göstererek belirttiğimi beyan ederim.

21.01.2015

Mehmet Şirin AKIN

ÖZET**TUZAKLANMIŞ PARÇACIKLARIN TERMODİNAMİK
ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ**

Mehmet Şirin AKIN

Yüksek Lisans Tezi, Fizik Anabilim Dalı
Tez Danışmanı: Yrd. Doç. Dr. Haydar UNCU
2015, 37 sayfa

Sıcaklığı 0 K ye yakın olan sistemlerde hacim parametresi kontrol edilemediğinden, bu sistemlerde hacim yerine parçacıkları tuzaklamakta kullanılan ve zamanla periyodik olarak değişen manyetik alanın açısız frekansı termodinamiğin birinci yasasındaki iş terimi için daha uygun bir parametredir. Bu tez çalışmasında, termodinamiğin birinci yasasında hacim yerine açısız frekans kullanıldığında termodinamik hal denklemlerinin nasıl değişeceği incelenecektir.

Anahtar Sözcükler

Genelleştirilmiş basınç, harmonik tuzaklama, tuzaklanmış parçacıkların termodinamiği

ABSTRACT**INVESTIGATION OF THERMODYNAMICAL PROPERTIES OF
TRAPPED PARTICLES**

Mehmet Şirin AKIN

M.Sc. Thesis, Department of Physics
Supervisor: Yrd. Doç. Dr. Haydar UNCU
2015, 37 pages

The volume parameter of the systems that are close to 0 K can not be controlled, therefore for these systems, the angular frequency of the time dependent magnetic field to trap the particles is a more suitable parameter for the work term in the first law of thermodynamics. In these thesis, we investigate the change of the thermodynamical equation of states when one uses the frequency instead of the volume in the first law of thermodynamics.

Key Words

Generalized pressure, harmonic trap, thermodynamics of trapped particles

ÖNSÖZ

Tez çalışmam süresince çalışmamın her aşamasında yardım, destek ve anlayışı için, değerli katkı ve eleştirileriyle bana yol gösteren danışman hocam Sayın Yrd. Doc. Dr. Haydar UNCU'ya teşekkürlerimi sunarım. Ayrıca çalışmam boyunca katkı ve önerileri ile bana destek veren arkadaşlarım Dr. Muhammed ARIÇ ve Mehmet ÇAKAR'a teşekkür ederim. Maddi manevi olarak destek ve sevgilerini eksik etmeyen, hep benimle olan aileme teşekkür ve sevgilerimi sunarım.

Mehmet Şirin AKIN

İÇİNDEKİLER

KABUL ONAY SAYFASI	iii
BİLİMSEL ETİK BİLDİRİM SAYFASI	v
ÖZET	vii
ABSTRACT	ix
ÖNSÖZ	xi
SİMGELER DİZİNİ	xv
ŞEKİLLER DİZİNİ	xvii
1. GİRİŞ	1
1.1. Tuzaklanmış Parçacıkların Termodinamiği	1
1.2. Manyetik Tuzaklama ve Harmonik Tuzak	2
1.2.1. Kuadrupol Tuzağı	3
1.2.2. Dönen Manyetik Alanın Ortalama Potansiyeli	5
1.3. Tuzaklanmış Parçacıklar için Termodinamik Potansiyellerin Tanımları	7
2. HARMONİK TUZAK İÇİNDEKİ MB PARÇACIKLARI	15
2.1. Yarı Klasik Yaklaşımda Termodinamik Nicelikler	15
2.2. Maxwell Boltzmann Parçacıklarının Kuantum İstatistiği ile İncelenmesi	16
3. HARMONİK TUZAK İÇİNDEKİ ETKİLEŞMEYEN BOZONLAR	21
3.1. Yarı Klasik Yaklaşım	21
3.2. d Boyutlu Harmonik Tuzak İçindeki Bozonlar	22
3.3. Bir Boyutta Harmonik Tuzak İçindeki Parçacıklar	28
4. SONUÇLAR VE TARTIŞMA	33
KAYNAKLAR	35
ÖZGEÇMİŞ	37

SİMGELER DİZİNİ

BEY	Bose-Einstein Yoğuşukluğu
C_P	Sabit Basıncıta Özısı
C_V	Sabit Hacimde Özısı
C_ω	Sabit Açısal Frekansta Özısı
$C_{\mathcal{P}}$	Genelleştirilmiş Sabit Basıncıta Özısı
k_B	Boltzman sabiti
MB	Maxwell Boltzmann
N	Toplam Parçacık sayısı
P	Basıncı
\mathcal{P}	Genelleştirilmiş Basıncı
S	Entropi
T	Sıcaklık
V	Hacim
Z	Kanonik Bölüşüm Fonksiyonu
ZODP	Zaman Ortalamalı Dönen Potansiyel
\mathcal{L}_{BK}	Büyük Kanonik Toplulukta Bölüşüm Fonksiyonu
q	Bir enerji durumuna girebilecek maksimum parçacık sayısı
$\rho(\epsilon)$	Durum Yoğunluğu
ω	Açısal Frekans

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 3.1	İki ve üç boyutta enerjinin sıcaklıkla değişimi	24
Şekil 3.2	Özısının sıcaklıkla değişimi	27
Şekil 3.3	Bir boyutta enerjinin sıcaklıkla değişimi	29
Şekil 3.4	Özısının sıcaklıkla değişimi	30

1. GİRİŞ

1.1. Tuzaklanmış Parçacıkların Termodinamiği

Enerjinin korunumunu ifade eden termodinamiğin birinci yasaının en çok bilinen hali

$$\Delta E = \Delta Q - P\Delta V + \mu \Delta N \quad (1.1.1)$$

şeklinindedir. Burada, ΔQ terimi sistemin soğurduğu ısıyı, $-P\Delta V$ terimi ise sistem üzerine yapılan işi göstermekte iken $\mu \Delta N$ terimi sisteme parçacık girişi sonucu sistemin enerjisindeki değişimi göstermektedir. Laboratuvar ortamında hacmi kontrol edilebilen sistemler için (örneğin çeşitli gazlar) birinci yasanın bu ifadesi işe yaramaktadır. Ancak bazı sistemlerde sistem üzerine iş yapmanın ya da sistemin iş yapmasının yolu hacim değişimi değildir [1]. Örneğin spin sistemlerinde sistemin hacmi sabit olduğundan sistem üzerine iş yapmanın yolu hacim değişimi değil, dışarıdan manyetik alan uygulamak ya da dışarıdan uygulanan manyetik alanı değiştirmektir [1].

Son yıllarda soğutma yöntemlerinin gelişmesi ile mutlak 0 K sıcaklığına yakın sıcaklıklardaki sistemler üzerine deneyler yapmak mümkün olmaktadır [2]. Bu tarz sistemlerde parçacıkları bir arada tutmak için hacmi kontrol edilebilen pistonlu kaplar tarzı kutular kullanılamaz. Soğutulmuş olan parçacıklar hareketli olmalarından dolayı kutu duvarlarına çarparlar. Kutu duvarlarının düşük sıcaklıklara soğutulmamasından dolayı duvar atomlarının kinetik enerjisi soğutulmuş parçacıklara göre daha yüksek olacaktır. Bu yüzden, kutu duvarlarına çarpan parçacığın, duvarın atomları ile teması sonucu parçacıkların kinetik enerjilerinde dolayısı ile sistemin sıcaklığında artış olacaktır. Bu da soğuk sıcaklıklarda incelenmesi gereken sistemin yapısını bozar. Bu nedenle soğuk sıcaklıklardaki sistemler zamanla periyodik bir biçimde değişen manyetik alan kullanılarak tuzaklanırlar ve bu sistemlere uygulanan manyetik alanların etkisi,

$V(r) = 1/2m\omega^2r^2$ şeklindeki harmonik salıncı potansiyeli ile son derece iyi betimlenebilmektedir [2]. Burada ω periyodik şekilde değişen manyetik alanın açısal frekansını göstermektedir. Bu yüzden Ligare 2002 yılındaki bir çalışmada harmonik tuzak ile tuazklanmış parçacıklar için iş terimini ω cinsinden $\mathcal{P}\Delta\omega$ şeklinde yazmayı önerdi [3]. Buradaki \mathcal{P} ifadesini de genelleştirilmiş basınç olarak adlandırdı. Bir sonraki kısımda bu tanım sonucu termodinamik potansiyellerin kendilerinin ve değişimlerinin ifadelerinin nasıl değiştiğini inceleyeceğiz.

1.2. Manyetik Tuzaklama ve Harmonik Tuzak

Özellikle soğuk sıcaklarda, yüksüz atomları uzayın belli bir bölgesinde toplamının en iyi yollarından biri manyetik tuzaklamalardır¹. Bu tuzaklardan en kullanışlı olanın etkin olarak harmonik potansiyel ile betimlendiğini bölüm sonunda göstereceğiz. Şimdi manyetik tuzaklar ve bu tuzakların yüksüz atomları tuzaklama da nasıl kullanıldığını anlatalım. Manyetik tuzaklamanın yüksüz atomları bir arada tutmasının nedeni Zeeman olayı ile anlaşılabilir. Zeeman olayı bir dış manyetik alana konan atomların enerji değerlerindeki değişimi betimler. Zeeman olayında, dış manyetik alandan kaynaklanan enerji değişimi ince yapı yarılmamasından kaynaklanan enerji değişiminden çok daha küçük veya büyük olduğunda, enerji değişimi manyetik alanla doğru orantılıdır. Bunun dışındaki durumlarda da bu değişimi doğru orantılı almak iyi bir yaklaşımdır [4]. O hâlde dış bir manyetik alanın etkisindeki bir atomun i . seviyesinin enerjisinin

$$E_i = E_i^0 - \mu_i B \quad (1.2.2)$$

şeklinde manyetik alanla çizgisel olarak değiştiğini kabul etmek iyi bir yaklaşımdır. Bu denklemde μ_i verili durumun manyetik momenti iken, E_i^0 izole atomun i . seviyesinin öz enerji değeridir. O halde, manyetik alanın enerjiye katkısının atom

¹Bu bölümde anlatılanların önemli bir kısmı Referans [5] in dördüncü ünitesinin birinci kısmının bir bölümünün özetidir. Bu teze hem bütünlük hem de verili bilgilerin Türkçeleştirilmesi amacı ile konulmuştur.

için $U = -\mu_i B$ 'lik bir potansiyel enerji sağladığı kabul edilebilir. Manyetik moment pozitif ise, atom manyetik alanın yüksek olduğu bölgelere doğru bir kuvvet hissederken ($\vec{F} = -\vec{\nabla}U$); negatif ise manyetik alanın düşük olduğu bölgelere doğru bir kuvvet hisseder. Bu yüzden pozitif manyetik momentli atomlar yüksek manyetik alancıl (high-field seeker), negatif manyetik momentli atomlar düşük manyetik alancıl (low-field seeker) olarak anlandırılır.

Manyetik tuzakların, Zeeman enerjileri tarafından belirlenen enerji derinlikleri $\mu_i B$ dir. Atomik manyetik momentlerin büyüklükleri e elektron yükünün büyüklüğü, \hbar indirgenmiş Planck sabiti (yani Planck sabitinin 2π ye bölümü) ve m_e elektronun kütlesi olmak üzere Bohr magnetonu ($\mu_B = e\hbar/2m_e$) civarındadır ve buna karşılık gelen enerjilerin sıcaklık karşılığı 0.67K civarındadır. Laboratuvarlarda elde edilen manyetik alanlar çoğunlukla 1 Tesladan oldukça küçük olduğundan, atomlar manyetik olarak tuzaklanmak için 1K den çok daha küçük sıcaklıklara soğutulmalıdırlar.

Buna göre manyetik tuzaklamayı gerçekleştirmek için ya minimum ya da maksimuma sahip manyetik alanlar oluşturulmalıdır. Ancak elektrik akımının olmadığı bölgelerde, manyetik alanların büyüklüğünün bir maksimuma sahip olamayacağını gösteren bir teoremin sonucunda [6], bir maksimuma sahip manyetik alanlar kullanılamamaktadır. Bu nedenle laboratuvarlarda manyetik tuzaklama yapılırken, düşük manyetik alancıl yüksüz atomlar yerel minimuma sahip alanlar kullanılarak tuzaklanmaktadır.

1.2.1. Kuadropol Tuzağı

Kuadropol tuzağı, manyetik alanın bir noktada sıfırlandığı basit bir manyetik alan konfigürasyonudur. Bu tür bir manyetik alan, örneğin, zıt yönde akım geçirilen Helmholtz halkaları kullanılarak elde edilebilir. Bu tarz bir manyetik alan simetri

ekseni z seçilerek

$$\vec{B} = B'(x, y, -2z) \quad (1.2.3)$$

şeklinde ifade edilebilir. Bu seçimin sonucunda manyetik alanın sıfırlandığı nokta başlangıç noktası (orijin) olarak seçilmiş olur. Ayrıca $\vec{V} \cdot \vec{B} = 0$ olduğundan z eksenini boyunca manyetik alanın değişiminin x ve y eksenleri boyunca değişiminin zıt yönünde iki katı olması gerektiğine dikkat ediniz. Bu manyetik alanın büyüklüğü $|\vec{B}| = B = B'(x^2 + y^2 + 4z^2)^{1/2}$ olduğundan manyetik alanın büyüklüğü, minimum noktası olan başlangıç noktasından uzaklıkla çizgisel olarak değişmektedir.

Kuadrupol tuzakın önemli bir dezavantajı vardır. Bir önceki kısımda, manyetik alanların atomlarla etkileşimi konusu incelenirken, manyetik alan tarafından oluşturulan potansiyel ile etkileşen atomun aynı kuantum durumunda kaldığını varsaydık. Bu varsayım atoma etki eden manyetik alan yavaşça değişiyorsa iyi bir yaklaşımdır. Çünkü bu durumda atom manyetik alanın anlık yönüne göre aynı durumda kalacaktır. Ancak, hareketli bir atom zamana bağlı bir manyetik alan hissedecektir. Manyetik alan zamana bağlı olmayıp, kuadrupol tuzakta olduğu gibi yalnızca konumla değişse bile atom hareket ettiğinden, atomun hissettiği alan zamanla değişir. Böylece, düşük manyetik alancıl atomlar, yüksek manyetik alancıl bir duruma geçiş yaparak tuzak dışına atılabilirler. Zamana bağlı manyetik alanların bu etkisi manyetik alanın frekansı, atomların farklı durumlarının arasındaki geçiş frekansından yüksek ya da yaklaşık aynı ise ciddi olur. Atomların geçiş frekansı $\mu_B B$ ile orantılıdır ve bu yüzden $B = 0$ noktasında bu frekans sıfırlanır ve bu durumda atomların farklı durumları arasındaki geçiş frekansı, manyetik alanın sıfırlandığı noktanın atomik boyutlara göre oldukça büyük bir alanı kapsayan bölgesinde, manyetik alanın frekansından küçük ya da manyetik frekans civarında olacaktır. O hâlde bu bölgelerde, tuzaklanan atomların kayda değer bir kısmı kaybedilir. Diğer bir deyişle, kuadrupol tuzak,

manyetik alanın yok olduğu noktada bir deliğe sahiptir ve bu kuadrupol tuzağın uygulanabilirlik zamanını önemli ölçüde sınırlar.

1.2.2. Dönen Manyetik Alanın Ortalama Potansiyeli

Dönen manyetik alanların oluşturduğu potansiyeli kısaca Zaman Ortalamalı Dönen Potansiyel² (ZODP) olarak adlandıracağız. ZODP tarihsel öneme sahip bir potansiyeldir, çünkü derişik gazlarda Bose-Einstein yoğunluğu (BEY) ilk olarak bu potansiyelle betimlenen manyetik alanların kullanılması sonucu elde edilmiştir [5]. Bu tuzaklamada kuadrupol tuzağının üzerine dönen manyetik alan eklenmiştir. Yani kuadrupol tuzağa yol açan (1.2.3) denklemi ile verilen manyetik alan ile zaman içinde dönen periyodik

$$\vec{B} = (B_0 \cos \omega t, B_0 \sin \omega t, 0), \quad B > 0 \quad (1.2.4)$$

manyetik alan üst üste bindirilmiştir. Bu yüzden ZODP tuzağında kullanılan manyetik alanın genel formülü

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = (B'x + B_0 \cos \omega t, B'y + B_0 \sin \omega t, -2B'z), \quad B > 0 \quad (1.2.5)$$

şeklinde ifade edilir. Bu denklemden kuadrupol tuzağa eklenen manyetik alanın minimum noktasının konumunun sürekli değiştiğini ve ek manyetik alanın minimumu pozitif bir değere çektiği görülmektedir. Ek manyetik alanın frekansı, atomun manyetik altdurumlarının geçiş frekanslarına oranla küçük seçilmelidir. Bu koşul, bir atomun manyetik alandaki değişikliklerden fazla etkilenmeyerek uzun süreler³ boyunca ince yapı durumları arasında geçiş yapmamasını, dolayısıyla da tuzakta kalmasını sağlamak için gereklidir. Bu koşullar altında ek alanın etkisi bir atomun enerjisinin salınımları cinsinden ifade edilebilir. Ek alanın frekansı (birçok

²Zaman Ortalamalı Dönen Potansiyel (ZODP) tuzağı ifadesi, Time averaged orbiting potential(TOP) teriminin Türkçe karşılığı olarak kullanıldı.

³Bu durumda atomun dinamiğini belirleyen tipik birim süre, ince yapı arasındaki enerji farklarından elde edilen $\omega_{gec} = \frac{\Delta E}{\hbar}$ açısai frekansının tersinin 2π ile çarpılması sonucu elde edilir. $\zeta = \frac{2\pi}{\omega_{gec}}$

deneyde olduğu gibi) atomik hareketin frekansından çok büyük seçilirse, bir atomun (1.2.5) denkleminde verilen periyodik potansiyelin, bir periyodunun zaman ortalaması alınarak elde edilen bir etkin potansiyelin etkisi altında hareket ettiği varsayımını yapmak iyi bir yaklaşım olacaktır. (BEY) deneylerinde kullanılan alkali atomlarının manyetik alan içindeki hareketlerinin frekansı 10^2 Hz iken, manyetik alt durumları arasındaki geçiş frekansı 10^6 Hz civarındadır. Bu yüzden deneylerde ek manyetik alanın frekansı $10^3 - 10^4$ Hz civarında seçilmektedir. Şimdi yukarıda belirtilen özelliklere sahip ve ifadesi (1.2.5) denkleminde verilen bir manyetik alan altında hareket eden atoma etki eden etkin potansiyeli bulalım. Bu manyetik alanın büyüklüğü anlık olarak;

$$B(t) = [(B_0 \cos \omega t + B'x)^2 + (B_0 \sin \omega t + B'y)^2 + 4B'^2 z^2]^{1/2} \quad (1.2.6)$$

şeklindedir. Kuadropol potansiyelinin minimum noktası etrafında ve $\frac{r}{r_0} \lll \left| \frac{B_0}{B'} \right|$ konumları için bu büyüklük yaklaşıkça

$$B(t) = B_0 + B'(x \cos \omega t + y \sin \omega t) + \frac{B'^2}{2B_0} [x^2 + y^2 + 4z^2 - (x \cos \omega t + y \sin \omega t)^2] \quad (1.2.7)$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada r_0 sistemin dinamiğinin birim uzunluğu olarak yorumlanabilecek $\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2}$ değerine eşittir. Bu büyüklüğün bir periyot boyunca zaman ortalaması;

$$\langle B \rangle_t = \frac{\omega}{2\pi} \int_0^{2\pi/\omega} dt B(t) \quad (1.2.8)$$

ifadesinden elde edilir. Bu denklemdaki integral alındığında,

$$\langle B \rangle_t \simeq B_0 + \frac{B'^2}{4B_0} (x^2 + y^2 + 8z^2) \quad (1.2.9)$$

elde edilir. Bu sonucun önemli bir özelliği zaman - ortalamalı alanın hiç bir zaman sıfır olmaması ve sonuç olarak ta tuzakta bir "delik" bulunmamasıdır. O hâlde bir i alt manyetik durumunda bulunan bir atomun enerjisine manyetik katkı küçük r

değerleri için

$$E_i(\langle B \rangle_t) \simeq E_i(B_0) - \mu_i(B_0) (\langle B \rangle_t - B_0) \simeq E_i(B_0) - \mu_i(B_0) \frac{B'^2}{4B_0} (x^2 + y^2 + 8z^2) \quad (1.2.10)$$

şeklindedir. Bu denklemde

$$\mu_i(B_0) = - \frac{\partial E_i}{\partial B} |_{B_0} \quad (1.2.11)$$

ifadesi manyetik momentin alan doğrultusundaki izdüşümüdür. O hâlde, zamanla değişen ek manyetik alanın etkisinin, kuadropol alanın başlangıç noktasından uzaklıkla çizgisel olarak değişen biçimini, kuadratik hale dönüştürerek harmonik salınıcı potansiyeli biçimine sokmak olduğu söylenebilir. Bu hareketin üç koordinat boyunca salınım frekansı

$$\omega_x^2 = \omega_y^2 = -\mu_i \frac{B'^2}{2mB_0} \quad (1.2.12)$$

$$\omega_z^2 = -8\mu_i \frac{B'^2}{2mB_0} \quad (1.2.13)$$

şeklindedir. Manyetik tuzaklamada düşük alancıl atomlar kullanıldığında μ_i değerlerinin negatif, dolayısıyla da $\omega_x^2, \omega_y^2, \omega_z^2$ değerlerinin pozitif olduğuna dikkat ediniz.

1.3. Tuzaklanmış Parçacıklar için Termodinamik Potansiyellerin Tanımları

Parçacık sayısının sabit olduğu ve hacmin kontrol edilebildiği bir sistem için enerjideki değişim;

$$\Delta E = \Delta Q - P\Delta V \quad (1.3.14)$$

şeklindedir. Ancak tuzaklanmalarda hacmin laboratuvar ortamında kesin bir kontrolünü yapmak mümkün değildir. Oysa, manyetik alanların açısız frekansı (ω) kontrol edilebilir. O halde bu tarz sistemler için enerji değişimi;

$$\Delta E = \Delta Q + \mathcal{P} \Delta \omega \quad (1.3.15)$$

şeklinde yazıp genelleştirilmiş basınç olarak adlandırdığımız \mathcal{P} değişkenini kullanarak enerji değişim formülünü (1.3.15) teki gibi değiştirilerek yazılabilir. (Burada \mathcal{P} değişkeninin gerçek anlamda basınç olmadığına dikkat edilmelidir). Termodinamiksel bir potansiyel olan Helmholtz serbest enerjisi

$$F = E - TS \quad (1.3.16)$$

şeklinde tanımlanmıştır. Helmholtz serbest enerjisi istatistik mekanikte çok kullanışlıdır. Çünkü Helmholtz serbest enerji, kanonik topluluk kullanılarak bulunan bölüşüm fonksiyonu (Z) cinsinden kullanılarak kolaylıkla hesaplanabilmektedir;

$$F = -kT \ln Z . \quad (1.3.17)$$

Termodinamiğin birinci yasası

$$dE = T dS - P dV + \mu dN \quad (1.3.18)$$

ve Helmholtz Serbest enerjinin değişimini veren

$$dF = dE - T dS - S dT \quad (1.3.19)$$

denklemini kullanarak, bu değişim

$$dF = -S dT - P dV + \mu dN \quad (1.3.20)$$

şeklinde elde edilir. Burdan da entropi ifadesini hesaplamak basittir:

$$-S = \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{V,N} . \quad (1.3.21)$$

Şimdi, kısaca gazların standart termodinamiğinde özısı hesaplarını tekrarlayalım. Sistemdeki parçacık sayısı ve hacim sabit iken ısı değişimi $\delta Q = T dS$, enerji değişimine eşittir. ((1.3.18) denkleminde $dV = dN = 0$). Böylece sabit hacimde özısı

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V \quad (1.3.22)$$

eşitliği ile elde edilir. Sabit basınç altındaki sistemlerde özısı $\left(\frac{\delta Q}{\delta T}\right)_P$ eşitliğinden yararlanarak elde edilir. Sabit basınç altında özısıyı hesaplamanın en iyi yolu C_V basitçe hesaplanabildiğinden $C_P - C_V$ ifadesini bulmaktır. Bu amaçla δQ nun ifadesini iki farklı şekilde yazalım:

$$\delta Q = C_V dT + T \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V dV \quad (1.3.23)$$

ve

$$\delta Q = C_P dT + T \left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_T dP. \quad (1.3.24)$$

Yukarıdaki denklemlerin ilkinde δQ , (T, V) nin değişimleri cinsinden ifade edilirken; ikincisinde δQ , (T, P) nin değişimleri cinsinden verilmiştir. (1.3.24) denkleminde P nin değişimi V ve T cinsinden bulunup, bu denklem

$$dP = \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V dT + \left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T dV \quad (1.3.25)$$

şeklinde de ifade edilebilir. Bu ifade (1.3.24) denkleminde yerine konarak

$$\begin{aligned} \delta Q &= C_P dT + T \frac{\partial S}{\partial P} \left[\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V dT + \left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T dV \right] \\ &= \left[C_P + T \left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_T \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V \right] dT + \left[T \left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_T + \left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_V \right] dV \end{aligned} \quad (1.3.26)$$

elde edilir. Hem (1.3.23) hem de (1.3.26) denkleminde ısı değişimi T,V cinsinden verildiğinden, dT ve dV nin katsayıları birbirine eşit olmalıdır. Buradan

$$C_V - C_P = T \left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_T \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V \quad (1.3.27)$$

bulunur. (1.3.19) denkleminde yola çıkıp F nin, T, V ve N nin sürekli ve türevlenebilir bir fonksiyonu olması sonucu elde edilen

$$\frac{\partial}{\partial P} \left[\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T \right]_V = \frac{\partial}{\partial V} \left[\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V \right]_T \quad (1.3.28)$$

eşitliği kullanılarak

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V = \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T \quad (1.3.29)$$

elde edilir. (1.3.29) eşitliği, (1.3.27) de yerine konarak

$$C_P - C_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial P} \right)_T \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_T \quad (1.3.30)$$

yazılabilir. Termodinamiğin birinci yasaını veren (1.3.18) denklemi de kullanılarak, enerjinin de sabit olduğu durumlarda

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_T = \frac{P}{T} \quad (1.3.31)$$

bulunur. Bu eşitlik (1.3.30) de yerine konarak

$$C_P - C_V = P \left(\frac{\partial S}{\partial P} \right)_T \quad (1.3.32)$$

elde edilir. $\left(\frac{\partial S}{\partial P} \right)_T$ ifadesi de Gibbs serbest enerjisi $G = E - TS + PV$ nin değişimi olan

$$dG = -SdT + VdP + \mu dN \quad (1.3.33)$$

eşitliğinin ikinci türevleri kullanılarak basitleştirilebilir.

$$\left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_P = - \left(\frac{\partial S}{\partial P} \right)_T \quad (1.3.34)$$

(1.3.34) eşitliği (1.3.32) de yerine konarak

$$C_P - C_V = -P \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P \quad (1.3.35)$$

bulunur.

Şimdi bu hesapları iş terimi $dW = \mathcal{P} d\omega$ alındığında yapalım. Bu durum da enerji değişimi

$$dE = TdS + \mathcal{P}d\omega + \mu dN \quad (1.3.36)$$

olurken, serbest enerji değişimi

$$dF = -SdT + \mathcal{P}d\omega + \mu dN \quad (1.3.37)$$

olur. Buradan

$$\mathcal{P} = \left(\frac{\partial F}{\partial \omega} \right)_{T,N} \quad (1.3.38)$$

bulunur. Entropi ifadesi ise

$$S = \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{\omega, N} \quad (1.3.39)$$

şeklinde değişir. Sabit parçacık sayısına sahip ($dN = 0$) tuzaklanmış bir sistemin özısılarını hesaplamak için enerji değişimi için yeni önerilen

$$dE = T dS + \mathcal{P} d\omega \quad (1.3.40)$$

denkleminde yola çıkalım. Sabit frekansta özısı bu denklemden basitçe hesaplanabilir. Ancak sabit \mathcal{P} de özısı $C_{\mathcal{P}}$ yi bulmak daha zordur. Bunun için

$$C_{\omega} = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_{\omega} = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{\omega} \quad (1.3.41)$$

$$\delta Q = T dS \quad (1.3.42)$$

$$\delta Q = C_{\omega} dT + T \left(\frac{\partial S}{\partial \omega} \right)_{T} d\omega \quad (1.3.43)$$

$$\delta Q = C_{\mathcal{P}} dT + T \left(\frac{\partial S}{\partial \mathcal{P}} \right)_{T} d\mathcal{P} \quad (1.3.44)$$

denklemlerinden yararlanalım. (1.3.44) denklemindeki $d\mathcal{P}$ ifadesini dT ve $d\omega$ cinsinden yazıp yerine koyarsak

$$\delta Q = C_{\mathcal{P}} dT + T \left(\frac{\partial S}{\partial \mathcal{P}} \right)_{T} \left[\left(\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial T} \right)_{\omega} dT + \left(\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \omega} \right)_{T} d\omega \right] \quad (1.3.45)$$

elde edilir. Bu denklemdaki terimleri düzenleyerek

$$\delta Q = \left[C_{\mathcal{P}} + T \left(\frac{\partial S}{\partial \mathcal{P}} \right)_{T} \left(\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial T} \right)_{\omega} \right] dT + T \left(\frac{\partial S}{\partial \mathcal{P}} \right)_{T} \left(\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \omega} \right)_{T} d\omega \quad (1.3.46)$$

elde edilir. (1.3.44) ve (1.3.46) denklemlerinde dT lerin katsayısının eşit olması gerektiğinden

$$C_{\omega} = C_{\mathcal{P}} + T \left(\frac{\partial S}{\partial \mathcal{P}} \right)_{T} \left(\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial T} \right)_{\omega} \quad (1.3.47)$$

ya da

$$C_{\omega} - C_{\mathcal{P}} = -T \left(\frac{\partial S}{\partial \mathcal{P}} \right)_{T} \left(\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial T} \right)_{\omega} \quad (1.3.48)$$

bağıntısı bulunur. Ayrıca

$$F = E - TS \quad (1.3.49)$$

ifadesinden yola çıkarak

$$dF = \mathcal{P} d\omega - S dT \quad (1.3.50)$$

yazılabilir. Bu eşitlikten türetilen

$$\frac{\partial}{\partial T} \left[\left(\frac{\partial F}{\partial \omega} \right)_T \right]_{\omega} = \frac{\partial}{\partial \omega} \left[\left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{\omega} \right]_T \quad (1.3.51)$$

$$\left(\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial T} \right)_{\omega} = - \left(\frac{\partial S}{\partial \omega} \right)_T \quad (1.3.52)$$

ifadelerini kullanarak;

$$C_{\mathcal{P}} - C_{\omega} = T \left(\frac{\partial S}{\partial \mathcal{P}} \right)_T \left(\frac{\partial S}{\partial \omega} \right)_T \quad (1.3.53)$$

elde edilir. Bu denklemden türevleri elde etmek kolay değildir. Bu yüzden

$$dE = T dS + \mathcal{P} d\omega \quad (1.3.54)$$

ifadesinden yola çıkarak elde edilen

$$\left(\frac{\partial S}{\partial \omega} \right)_T = - \frac{\mathcal{P}}{T} \quad (1.3.55)$$

eşitliğini (1.3.53) de yerine yazarsak;

$$C_{\mathcal{P}} - C_{\omega} = - \mathcal{P} \left(\frac{\partial S}{\partial \omega} \right)_T \quad (1.3.56)$$

bulunur. Bu ifadeyi Gibbs serbest enerjisi G yi kullanarak basitleştirelim;

$$G = E - TS - \mathcal{P} \omega \quad (1.3.57)$$

olduğuna göre, sabit parçacık sayısı için

$$dG = -S dT - \omega d\mathcal{P} \quad (1.3.58)$$

olmaktadır. (1.3.58) ifadesini kullanarak;

$$\frac{\partial}{\partial T} \left[\left(\frac{\partial G}{\partial \mathcal{P}} \right)_T \right]_{\mathcal{P}} = \frac{\partial}{\partial \mathcal{P}} \left[\left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_{\mathcal{P}} \right]_T \quad (1.3.59)$$

bulunur. Ayrıca

$$\left(\frac{\partial S}{\partial \mathcal{P}} \right)_T = \left(\frac{\partial \omega}{\partial T} \right)_{\mathcal{P}} \quad (1.3.60)$$

eşitliği kullanarak $C_{\mathcal{P}} - C_{\omega}$ için basit bir ifade

$$C_{\mathcal{P}} - C_{\omega} = -\mathcal{P} \left(\frac{\partial \omega}{\partial T} \right)_{\mathcal{P}} \quad (1.3.61)$$

şeklinde bulunur.

2. HARMONİK TUZAK İÇİNDEKİ MB PARÇACIKLARI

2.1. Yarı Klasik Yaklaşımında Termodinamik Nicelikler

Kanonik toplulukta Maxwell Boltzman (MB) parçacıklarının bölüşüm fonksiyonu

$$Z = \sum_i e^{-\beta \varepsilon_i} \quad (2.1.1)$$

ifadesi ile tanımlanmaktadır [7]. Ancak bir çok Hamiltoniyenin özdeğerleri bu ifadede yerine konulduğunda (2.1.1) toplamı hesaplanamaz. Bu yüzden bu toplama

$$Z = \int_0^\infty \rho(\varepsilon) e^{-\beta \varepsilon} d\varepsilon \quad (2.1.2)$$

şeklindeki integralle yaklaşılır.¹ Burada $\rho(\varepsilon)$ durum yoğunluğunu göstermektedir. Hesapların genelliği açısından hareket boyutunu da değişken alıp d ile göstereceğiz. d boyutta harmonik tuzak potansiyelinin durum yoğunluğu

$$\rho(\varepsilon) = \frac{\varepsilon^{d-1}}{(d-1)(h\omega)^d}, \quad d \geq 2 \quad (2.1.3)$$

şeklinde [5]. (2.1.3) denklemini (2.1.2) de yerine konarak d boyutlu harmonik tuzak içindeki MB parçacıklarının bölüşüm fonksiyonu için

$$Z = \frac{1}{(d-1)(h\omega)^d} \int_0^\infty \varepsilon^{d-1} e^{-\beta \varepsilon} d\varepsilon \quad (2.1.4)$$

elde edilir. (2.1.4) denkleminin çözümünü kolaylaştırmak için $\beta \varepsilon = u$ değişimi yapıp kısmi integral yöntemi uygulanarak bu denklem

$$Z_1 = \frac{1}{(d-1)(h\omega)^d} \frac{1}{\beta^d} \int_0^\infty u^{d-1} e^{-u} du \quad (2.1.5)$$

şekline getirilir. Bu denklemdeki integral alınarak;

$$Z_1 = \frac{1}{(h\omega)^d} \frac{1}{\beta^d} = \left(\frac{kT}{\hbar\omega} \right)^d \quad (2.1.6)$$

¹Bu yönteme yarı klasik yaklaşım adı verilir.

bulunur. Etkileşmeyen parçacıklar için N parçacığın bölüşüm fonksiyonu bir parçacık bölüşüm fonksiyonu cinsinden

$$Z_N = \frac{1}{N!} [Z_1(T, \omega)]^N \simeq \left(\frac{e}{N}\right)^N \left(\frac{kT}{\hbar \omega}\right)^{dN} \quad (2.1.7)$$

şeklinde yazılır. Burada $N!$ parçacıkların ayırdedilemez oluşunu hesaba katmak için eklenmiştir. Ayrıca hesap kolaylığı açısından $N!$ yerine Stirling yaklaşımı yapılarak yaklaşık $(e/N)^N$ alınmıştır [8]. Bölüşüm fonksiyonu hesaplandıktan sonra Helmholtz serbest enerjisi kolaylıkla bulunabilir.

Helmholtz Serbest enerjisi kanonik bölüşüm fonksiyonu cinsinden

$$F = -kT \ln Z = -kT N \ln \left[\frac{e}{N} \left(\frac{kT}{\hbar \omega} \right)^d \right] \quad (2.1.8)$$

şeklinde ifade edilir [7]. Buradan (1.3.38) denklemi kullanılarak genelleştirilmiş basınç

$$\mathcal{P} = \frac{dNkT}{\omega} \quad (2.1.9)$$

bulunur. Bu denklem Harmonik tuzak içindeki MB parçacıklarının hal denklemdir. Ayrıca tuzaklanmış parçacıkların ortalama enerjisi de bölüşüm fonksiyonu aracılığı ile kolaylıkla bulunur:

$$E = - \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \right)_{N, \omega} = dNkT \quad (2.1.10)$$

2.2. Maxwell Boltzmann Parçacıklarının Kuantum İstatistiği ile İncelenmesi

Aslında harmonik tuzak içindeki MB parçacıkları için yarı klasik yaklaşıma gerek yoktur. Çünkü bu sistem için genellikle çok az durum için hesaplanabilen (2.1.1) denklemi hesaplanabilmektedir. Bu bölümde denklemlerin en genel hali çok uzun olduğundan hesaplarımızı üç boyut için yapacağız. Harmonik tuzak potansiyelinin enerji seviyeleri

$$E_i = E_{n_x, n_y, n_z} = \hbar \omega_x \left(n_x + \frac{1}{2} \right) + \hbar \omega_y \left(n_y + \frac{1}{2} \right) + \hbar \omega_z \left(n_z + \frac{1}{2} \right), \quad (2.2.11)$$

$$n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, \dots$$

şeklinde olduğundan bu durum için (2.1.1) denklemi;

$$Z_1 = \sum_{n_x, n_y, n_z} e^{-\beta[(n_x + \frac{1}{2})\hbar\omega + (n_y + \frac{1}{2})\hbar\omega + (n_z + \frac{1}{2})\hbar\omega]} \quad (2.2.12)$$

şeklinde yazılabilir. (2.2.12) ifedesindeki toplam n_x, n_y, n_z toplamları cinsinden ayrıştırılabilir. Bu yapılarak

$$Z_1 = \sum_{n_x=0}^{\infty} e^{-\beta(n_x + \frac{1}{2})\hbar\omega_x} \sum_{n_y=0}^{\infty} e^{-\beta(n_y + \frac{1}{2})\hbar\omega_y} \sum_{n_z=0}^{\infty} e^{-\beta(n_z + \frac{1}{2})\hbar\omega_z} \quad (2.2.13)$$

elde edilir. Eş yönlü bir harmonik salıncı için $\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$ olur. Buradan izotropik bir harmonik salıncı içindeki bir MB parçacığının bölüşüm fonksiyonu için

$$Z_1 = \left(\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(n + \frac{1}{2})\hbar\omega} \right)^3 = \left(e^{-\frac{\beta\hbar\omega}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega n} \right)^3 \quad (2.2.14)$$

elde edilir. (2.2.14) ifedesini daha basit şekilde çözmek için $\beta\hbar\omega = x$ değişken değişimi yaparsak

$$Z_1 = \left(e^{-\frac{x}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} (e^{-x})^n \right)^3 \quad (2.2.15)$$

bulunur. Şimdi de (2.2.15) ifedesinin çözümünü yapalım. $|y| < 1$ için

$$\sum_{n=0}^{\infty} y^n = 1 + y + y^2 + y^3 + \dots = \frac{1}{1-y} \quad (2.2.16)$$

eşitliğinden yararlanabilmek amacıyla $e^{-x} = y$ tanımı yapalım. $x = \beta\hbar\omega$ olarak tanımlandığından sıfırdan büyüktür. Çünkü $\beta > 0, \hbar > 0, \omega > 0$ şeklindedir. Böylece $0 < y < 1$ eşitsizliğinin sağlandığını görürüz. Buradan

$$Z_1 = \left(\frac{e^{-\frac{x}{2}}}{1 - e^{-x}} \right)^3 = \left(\frac{1}{e^{x/2} - e^{-x/2}} \right)^3 = \left(\frac{2}{e^{x/2} - e^{-x/2}} \right)^3 \quad (2.2.17)$$

bulunur. Son bulduğumuz (2.2.17) ifadesinde parantez içindeki terim $\sinh \alpha = \frac{e^\alpha - e^{-\alpha}}{2}$ ya benzediğinden

$$Z_1 = \left[\frac{2}{\sinh\left(\frac{x}{2}\right)} \right]^3 \quad (2.2.18)$$

bulunur. Etkileşmeyen N parçacığın bölüşüm fonksiyonu

$$Z = \frac{1}{N!} (Z_1)^N \quad (2.2.19)$$

olduğuna göre;

$$Z = \frac{1}{N!} \left(\frac{2}{\sinh(\frac{x}{2})} \right)^{3N} \quad (2.2.20)$$

elde edilir. Burada $N!$ her bir parçacığın ayırtelemes oluşunu hesaba katmak için eklenir. (2.2.20) ifadesinde her iki tarafın da doğal logaritması alınarak

$$\ln Z = -\ln N! + 3N \ln 2 - 3N \ln \sinh(x/2) \quad (2.2.21)$$

elde edilir. (2.2.21) ifadesinde Stirling yaklaşımı kullanılarak [8]

$$\ln Z = -N \ln N + N + 3N \ln 2 - 3N \ln \sinh(x/2) \quad (2.2.22)$$

bulunur. (2.2.20) denklemindeki bölüşüm fonksiyonu (1.3.38) denkleminde yerine konarak serbest enerji

$$F = N k_B T \left(3 \ln[\sinh(x/2) - 1 - \ln(\frac{8}{N})] \right) \quad (2.2.23)$$

bulunur. Bu ifade de $x = \beta \hbar \omega$ yerine konduğunda

$$F = N k_B T \left(3 \ln[\sinh(\frac{\beta \hbar \omega}{2}) - 1 - \ln(\frac{8}{N})] \right) \quad (2.2.24)$$

değeri elde edilir. Buradan genelleştirilmiş basınç;

$$\mathcal{P} = \frac{\partial F}{\partial \omega} = 3N k_B T \frac{\beta \hbar}{2} \cosh(\frac{\beta \hbar \omega}{2}) \frac{1}{\sinh(\frac{\beta \hbar \omega}{2})} \quad (2.2.25)$$

şeklinde elde edilir. Bu ifade daha da basitçe

$$\mathcal{P} = \frac{3N \hbar}{2} \coth(\frac{\beta \hbar \omega}{2}) \quad (2.2.26)$$

biçiminde yazılabilir. Denklem (2.2.26) $T \rightarrow \infty$ ya da $\beta \rightarrow 0$ limitinde yarı klasik yöntemle bulunan genelleştirilmiş basınç ile aynı sonucu vermelidir. Bunu kontrol

etmek için $x = \frac{\beta \hbar \omega}{2}$ tanımı yapalım. $\beta \rightarrow 0$ limitinde x te 0 a gidecektir. $x \rightarrow 0$ limitinde $\coth(x) \approx \frac{1}{x}$ olduğundan (2.2.26) denkleminde

$$\mathcal{P} = \frac{3Nk_B T}{\omega} \quad (2.2.27)$$

bulunur. Bu ifade beklendiği gibi yarı klasik yöntemle bulunan (2.1.9) denkleminde $d = 3$ alındığında elde edilen ifade ile aynıdır.

Şimdi de enerji ifadesini bulalım.

$$E = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \quad (2.2.28)$$

$$-\ln Z = N \left(3 \ln \left[\sinh \left(\frac{\beta \hbar \omega}{2} \right) \right] - 1 - \ln \left(\frac{8}{N} \right) \right) \quad (2.2.29)$$

ifadeleri kullanarak

$$E = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \frac{3N\hbar\omega}{2} \frac{\cosh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)}{\sinh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)} = \frac{3N\hbar\omega}{2} \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \quad (2.2.30)$$

bulunur. Bu sonuç $\beta \hbar \omega \rightarrow 0$ limitinde

$$E = 3Nk_B T \quad (2.2.31)$$

vermektedir ki bu da yarı klasik yaklaşım ile bulduğumuz (2.1.10) denklemi ile aynıdır. Bulduğumuz enerji ifadesini kullanarak C_ω ve C_P ifadelerini de bulabiliriz.

C_ω hesabı basittir:

$$C_\omega = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_{\omega, N} \quad (2.2.32)$$

Enerji ifadesini (2.2.30) denkleminde $\beta = 1/(k_B T)$ cinsinden bulduğumuzdan türevi sıcaklık yerine β cinsinden yazalım:

$$\frac{\partial}{\partial T} = \frac{\partial \beta}{\partial T} \frac{\partial}{\partial \beta} = -\frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial}{\partial \beta} = \frac{-k_B}{k_B^2 T^2} \frac{\partial}{\partial \beta} = -k_B \beta^2 \frac{\partial}{\partial \beta} \quad (2.2.33)$$

$\frac{\partial}{\partial T}$ nin β cinsinden bu ifadesi kullanılarak

$$C_\omega = -k_B \beta^2 \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_{\omega, N} \quad (2.2.34)$$

$$C_\omega = 3Nk_B \left(\frac{3\hbar\omega}{2} \right) \frac{1}{\sinh^2\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)} \quad (2.2.35)$$

bulunur. Bu ifadenin de $\beta\hbar\omega \rightarrow 0$ limitinde yarı klasik yaklaşımla aynı olduğu görülmektedir:

$$C_\omega = 3Nk_B \quad (2.2.36)$$

Sabit basınçta özısıyı bulmak için, birinci bölümde görmüş olduğumuz (1.3.61) ifadesini kullanalım:

$$C_{\mathcal{P}} - C_\omega = -\mathcal{P} \left(\frac{\partial \omega}{\partial T} \right). \quad (2.2.37)$$

$$\mathcal{P} = \frac{3N\hbar}{2} \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \quad (2.2.38)$$

olduğunu daha önce bulmuştuk. Buradan ω yı çekerek

$$\coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) = \frac{2\mathcal{P}}{3N\hbar} \quad (2.2.39)$$

yazıp

$$\omega = \frac{2}{\beta\hbar} \operatorname{arccoth}\left(\frac{2\mathcal{P}}{3N\hbar}\right) \quad (2.2.40)$$

ifadesini elde edersek, türev almak kolaylaşır ve

$$\left(\frac{\partial \omega}{\partial T} \right)_{\mathcal{P}} = \frac{2k_B}{\hbar} \operatorname{arccoth}\left(\frac{2\mathcal{P}}{3N\hbar}\right) \quad (2.2.41)$$

bulunur. (2.2.41) eşitliğini (1.3.61) daki ifadede yerine koyduğumuz da;

$$C_{\mathcal{P}} - C_\omega = -\mathcal{P} \left(\frac{\partial \omega}{\partial T} \right)_{\mathcal{P}} = -\frac{2k_B\mathcal{P}}{\hbar} \operatorname{arccoth}\left(\frac{2\mathcal{P}}{3N\hbar}\right) \quad (2.2.42)$$

elde edilir. Daha önce bulmuş olduğumuz (2.2.35) eşitliğini (2.2.42) da yerine koyup, $C_{\mathcal{P}}$ yi çekersek:

$$C_{\mathcal{P}} = -3Nk_B \frac{\beta\hbar\omega}{2} \operatorname{arccoth}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) + 3Nk_B \left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)^2 \frac{1}{\sinh^2\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)} \quad (2.2.43)$$

bulunur. Bu ifadenin $\beta\hbar\omega \rightarrow 0$ limitini aldığımızda $C_{\mathcal{P}}$ ifadesinin de yarı klasik yaklaşım da bulduğumuz sonuç ile aynı olduğu görülür:

$$C_{\mathcal{P}} = -3Nk_B + 3Nk_B = 0. \quad (2.2.44)$$

(2.2.36) ve (2.2.44) denklemlerinde bulunan sonuçlar genel teori ile uyumludur.

Çünkü yarı klasik yaklaşım $\beta\hbar\omega \rightarrow 0$ limitinde geçerlidir.

3. HARMONİK TUZAK İÇİNDEKİ ETKİLEŞMEYEN BOZONLAR

3.1. Yarı Klasik Yaklaşım

Büyük kanonik toplulukta bölüşüm fonksiyonu

$$\mathcal{L}_{BK} = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N} \left(\sum_{i=0}^{\infty} e^{-\beta E_i} \right) \quad (3.1.1)$$

şeklindedir. Sistem dengeye ulaştığında ortalama enerjisi ve parçacık sayısı sabitlendiğinden (3.1.1) denklemi $\langle E \rangle = U = \sum n_i \varepsilon_i$ ve $N = \sum n_i$ koşulları altında geçerlidir [7]. Bu denklemde ε_i tek parçacık enerji seviyelerini, n_i ise bu seviyelerdeki parçacık sayılarını göstermektedir. (3.1.1) denklemini bu nicelikler cinsinden;

$$\mathcal{L}_{BK} = \prod_{i=0}^{\infty} \sum_{n_i=0}^{\infty} e^{-\beta n_i(\varepsilon_i - \mu)} \quad (3.1.2)$$

şeklinde yazılabilir [7]. Bulduğumuz (3.1.2) ifadesini açarsak,

$$\mathcal{L}_{BK} = \left(\sum_{n_0=0}^{\infty} e^{-\beta n_0(\varepsilon_0 - \mu)} \right) \left(\sum_{n_1=0}^{\infty} e^{-\beta n_1(\varepsilon_1 - \mu)} \right) \left(\sum_{n_2=0}^{\infty} e^{-\beta n_2(\varepsilon_2 - \mu)} \right) \dots \quad (3.1.3)$$

elde edilir. Bu ifade kısaca

$$\mathcal{L}_{BK} = \prod_{i=0}^{\infty} \frac{1}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_i - \mu)}} \quad (3.1.4)$$

biçiminde yazılabilir. Bulduğumuz (3.1.4) ifadesinin logaritmasını alarak

$$\ln \mathcal{L}_{BK} = \ln \prod_{i=0}^{\infty} \frac{1}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_i - \mu)}} \quad (3.1.5)$$

$$\ln \mathcal{L}_{BK} = \sum_i \ln \frac{1}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_i - \mu)}} \quad (3.1.6)$$

elde ederiz. Bundan sonraki işlemlerde ki rahatlık açısından $z = e^{\beta\mu}$ ve $q(T, V, z) = \ln \mathcal{L}_{BK}$ tanımları yaparak

$$\ln \mathcal{L}_{BK} = q = \sum_i \ln \frac{1}{1 - z e^{-\beta\varepsilon_i}} = - \sum_i \ln(1 - z e^{-\beta\varepsilon_i}) \quad (3.1.7)$$

bulunur. Bu toplam genellikle alınmadığından yarı klasik yaklaşımda hesaplanır:

$$q(V, T, z) = \int_0^{\infty} g(\varepsilon) \ln(1 - ze^{-\beta\varepsilon}) d\varepsilon - \ln(1 - z) \quad (3.1.8)$$

(3.1.7) denkleminde, (3.1.8) denklemine geçerken integrale ek olarak taban durumdaki toplam terimi eklenmiştir. Bunun nedeni durum yoğunluğu $\rho(\varepsilon)$ nin taban durumu $\varepsilon = 0$ da 0 değeri vermesidir. Bu yüzden taban değeri olan $\varepsilon = 0$ değeri integralde içerilmez. Bu eksikliği gidermek için taban durumu terimi integrale ek olarak yazılır [7]. (3.1.8) deki integral alınarak bozonlar için bölüşüm fonksiyonu bulunmuş olur. Bölüşüm fonksiyonundan yola çıkarak bozonların bir enerji seviyesindeki ortalama parçacık sayısını veren dağılım

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} - 1} \quad (3.1.9)$$

bulunur. Bu dağılım durum yoğunluğu cinsinden bozonların toplam parçacık sayısı

$$N = \int_0^{\infty} \frac{\rho(\varepsilon)}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} - 1} d\varepsilon, \quad (3.1.10)$$

ortalama enerjileri ise

$$E = \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon \rho(\varepsilon)}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} - 1} d\varepsilon, \quad (3.1.11)$$

biçiminde yazılır [7].

3.2. d Boyutlu Harmonik Tuzak İçindeki Bozonlar

Bu bölümde Harmonik salıncı tuzağı için mümkün olan en genel sonuçları bulmak amacıyla boyut sayısını değişken alacağız ve d ile göstereceğiz. Ancak $d = 1$ için sonuçlar ıraksamalar içerdiğinden bu durumu bir sonraki bölümde ayrıca inceleyeceğiz. d boyutlu harmonik salıncı potansiyelinin durum yoğunluğu

$$\rho(\varepsilon) = \frac{\varepsilon^{d-1}}{(d-1)(\hbar\omega)^d} \quad d \geq 2 \quad (3.2.12)$$

ifadesi ile verilmektedir [9]. Durum yoğunluğu cinsinden toplam parçacık sayısı için (3.1.10) ifadesi kullanılarak

$$N = \int_0^{\infty} \rho(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{1}{(d-1)(\hbar\omega)^d} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^{d-1}}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon} - 1} d\varepsilon \quad (3.2.13)$$

elde edilir. (3.2.13) integrali alınarak toplam parçacık sayısının ifadesi

$$N = \frac{\Gamma(d) g_d(z)}{(d-1)(\hbar\omega)^d} \quad (3.2.14)$$

şeklinde bulunur. Bu denklemdaki $g_d(z)$ fonksiyonu

$$g_d(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{k^d} \quad (3.2.15)$$

şeklinde ifade edilen polylogaritma fonksiyonudur [9]. Harmonik tuzaktaki bozonların enerjileri

$$E = \int_0^{\infty} \rho(\varepsilon) \varepsilon f(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{1}{(d-1)(\hbar\omega)^d} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^d}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon} - 1} d\varepsilon \quad (3.2.16)$$

ifadesinden bulunur. (3.2.16) denklemindeki integral hesaplandığında

$$E = \frac{\Gamma(d-1)d}{(\hbar\omega\beta)^d \beta} g_{d+1}(z) \quad (3.2.17)$$

elde edilir. Bulduğumuz enerji ifadesini toplam parçacık sayısı N cinsinden yazarsak;

$$E = \frac{d k_B T g_{d+1}(z)}{g_d(z)} N \quad (3.2.18)$$

bulunur. $T < T_c$ sıcaklıklarında $z = 1$ olduğundan bu ifade

$$E = \frac{d k_B T g_{d+1}(1)}{g_d(1)} N \quad (3.2.19)$$

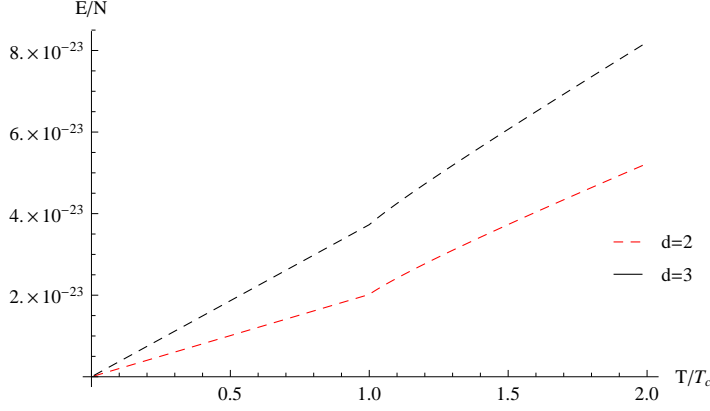
şekline dönüşür. Bu denklemler kullanılarak elde edilen enerjinin iki ve üç boyutta sıcaklıkla değişimi Şekil 3.1 de gösterilmektedir.

Şimdi de d boyut için $C_{\mathcal{P}}$ ve C_{ω} hesaplarını yapalım.

$$dE = T dS + \mathcal{P} d\omega + \mu dN \quad (3.2.20)$$

olduğuna göre;

$$\begin{aligned} C_{\omega} &= \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_{\omega, N} = Nd \frac{\partial}{\partial T} \left(k_B T \frac{g_{d+1}(z)}{g_d(z)} \right) \\ &= Nd \left(k_B \frac{g_{d+1}(z)}{g_d(z)} + k_B T \frac{\partial}{\partial T} \frac{g_{d+1}(z)}{g_d(z)} \right) \end{aligned} \quad (3.2.21)$$



Şekil 3.1. İki ve üç boyutta enerjinin sıcaklıkla değişimi

elde edilir. (3.2.21) deki türev alınarak

$$C_{\omega} = Nd \left[k_B \frac{g_{d+1}(z)}{g_d(z)} + k_B T \left(-k_B \beta^2 \mu + \beta \frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \left(\frac{g_d(z) g_d(z) - g_{d+1}(z) g_{d-1}(z)}{g_d^2(z)} \right) \right] \quad (3.2.22)$$

ifadesi bulunur. Bulduğumuz son ifadeyi daha düzenli hale getirirsek;

$$C_{\omega} = Nd \left[k_B \frac{g_{d+1}(z)}{g_d(z)} + \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} - \frac{\mu}{T} \right) \left(1 - \frac{g_{d+1}(z) g_{d-1}(z)}{g_d^2(z)} \right) \right] \quad (3.2.23)$$

elde edilir. (3.2.23) iadesindeki $\left(\frac{\partial \mu}{\partial T} - \frac{\mu}{T} \right)$ yerine N nin sabit olması sonucu elde edilen

$$\left(\frac{\partial N}{\partial T} \right)_{\omega, N} = 0 \quad (3.2.24)$$

eşitliği kullanıp

$$N = \frac{\Gamma(d-1)}{(\beta \hbar \omega)^d} g_d(z) = \Gamma(d-1) \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega} \right)^2 g_d(z) \quad (3.2.25)$$

ifadesinden

$$\left(\frac{\partial \mu}{\partial T} - \frac{\mu}{T} \right) = -d k_B \frac{g_d(z)}{g_{d-1}(z)} \quad (3.2.26)$$

bulunur. Buradan

$$C_{\omega} = Nd k_B \left[\frac{g_{d+1}(z)}{g_d(z)} - \frac{d g_d(z)}{g_{d-1}(z)} \left(1 - \frac{g_{d+1}(z) g_{d-1}(z)}{g_d^2(z)} \right) \right] \quad (3.2.27)$$

elde edilir. Yüksek sıcaklıklarda yani $T \rightarrow \infty$ ise $g_n(z) \approx z$ yaklaşımı yapılabileceğinden

$$\frac{g_{d+1}(z)g_{d-1}(z)}{g_d^2(z)} = 1 \quad (3.2.28)$$

olmaktadır. Böylece bu limitte beklendiği gibi MB parçacıkları için bildiğimiz

$$C_\omega = Ndk_B \quad (3.2.29)$$

bulunur.

Son olarak \mathcal{P} ve $C_{\mathcal{P}}$ ifadelerini bulmak için grand potansiyeli kullanacağız;

$$\Phi = E - TS - \mu N = \mathcal{P} \omega \quad (3.2.30)$$

Bu eşitlikten Φ nin değişimi için

$$d\Phi = -SdT - Nd\mu + \mathcal{P}d\omega \quad (3.2.31)$$

elde edilir. Büyük kanonik topluluk bölüşüm fonksiyonu \mathcal{L}_{BK} cinsinden grand kanonik potansiyel

$$\Phi = -k_B T \ln \mathcal{L}_{BK} = -k_B T q \quad (3.2.32)$$

şeklinde [7]. Böylece yarı klasik yaklaşımdaki

$$q(T, V, z) = - \int \rho(\varepsilon) \ln(1 - ze^{-\beta\varepsilon}) d\varepsilon - \ln(1 - z) \quad (3.2.33)$$

ifadesini ve d boyutta harmonik salıncı potansiyelinin sahip Hamiltoniyenin durum yoğunluğu $\rho(\varepsilon)$ nin (3.2.12) da verilen ifadesi kullanılarak

$$q = - \frac{1}{(d-1)(\hbar\bar{\omega})^d} \int_0^\infty \varepsilon^{d-1} \ln(1 - ze^{-\beta\varepsilon}) d\varepsilon - \ln(1 - z) \quad (3.2.34)$$

elde edilir. Bu denklemdaki integral alındığında

$$q = \frac{\Gamma(d+1)}{d(d-1)} \left(\frac{k_B T}{\hbar\bar{\omega}} \right)^d g_{d+1}(z) - \ln(1 - z) \quad (3.2.35)$$

ifadesi bulunur. Bu ifade grand potansiyelde yerine konup

$$\Phi = k_B T \left(\frac{\Gamma(d)}{d-1} \left(\frac{k_B T}{\hbar\bar{\omega}} \right)^d g_{d+1}(z) - \ln(1 - z) \right) \quad (3.2.36)$$

elde edilir. Eş yönlü salıncı için $\omega_1 = \omega_2 = \dots = \omega_d = \bar{\omega} = \omega$ olduğundan

$$\Phi = k_B T \left(\frac{\Gamma(d)}{d-1} \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega} \right)^d g_{d+1}(z) - \ln(1-z) \right) \quad (3.2.37)$$

bulunur. Genelleştirilmiş basınç

$$\mathcal{P} = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \omega} \right)_{\mathcal{P}_N} \quad (3.2.38)$$

eşitliğinden

$$C_{\mathcal{P}} - k_B T \left(\frac{\Gamma(d)}{d-1} \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega} \right)^d \frac{g_{d+1}(z)}{\omega} \right) \quad (3.2.39)$$

bulunur. \mathcal{P} ifadesi (1.3.38) denklemindeki $C_{\mathcal{P}} - C_{\omega}$ da yerine konarak

$$C_{\mathcal{P}} - N d k_B \left[\frac{g_{d+1}(z) d}{g_d(z)} - \frac{d, g_d(z)}{g_{d-1}(z)} \left(1 - \frac{g_{d+1}(z) g_{d-1}(z)}{g_d^2(z)} \right) \right] = -d N k_B \frac{g_{d+1}(z)}{g_d(z)} \quad (3.2.40)$$

elde edilir. (3.2.40) eşitliği daha sade bir şekilde

$$C_{\mathcal{P}} = \frac{N d^2 k_B}{g_{d-1}(z)} \left(1 - \frac{g_{d+1}(z) g_{d-1}(z)}{g_d^2(z)} \right) \quad (3.2.41)$$

yazılabilir. Bu ifade $T \rightarrow \infty$ limitinde beklendiği gibi

$$C_{\mathcal{P}} = 0 \quad (3.2.42)$$

değerini vermektedir.

$T < T_c$ için $z \rightarrow 1$ alındığından, (3.2.18) denklemini kullanılarak

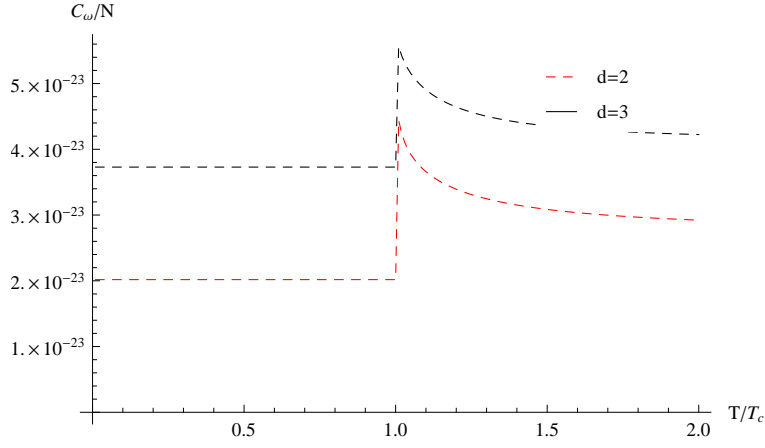
$$N = \frac{\Gamma(d-1) g_d(1)}{(\beta \hbar \omega)^d} = \Gamma(d-1) g_d(1) \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega} \right)^d \quad (3.2.43)$$

bulunur. Benzer şekilde enerji ve C_{ω} için (3.2.19) ve (3.2.21) denklemlerinde $z = 1$ yerine konarak

$$E = N d k_B T \frac{g_{d+1}(1)}{g_d(1)} \quad (3.2.44)$$

ve

$$C_{\omega} = N d k_B \frac{g_{d+1}(1)}{g_d(1)} \quad (3.2.45)$$



Şekil 3.2. Özısının sıcaklıkla değişimi

eşitlikleri elde edilir.

Şimdi de C_ω nın sürekliliğini inceleyelim. Bunun için $T \rightarrow T_c$ olduğunda C_ω nın sağdan ve soldan limitlerine bakalım. Öncelikle, $T \rightarrow T_c^+$ limitini inceleyelim. Bu limitte uçuculuk $z \rightarrow 1$ limitini sağladığından, (3.2.27) denkleminde z bir alınarak istenilen limit bulunur:

$$\begin{aligned} \lim_{T \rightarrow T_c^+} C_\omega &= Ndk_B \left[\frac{g_{d+1}(z)}{g_d(z)} - \frac{d g_d(z)}{g_{d-1}(z)} \left(1 - \frac{g_{d+1}(z) g_{d-1}(z)}{g_d^2(z)} \right) \right] \\ &= Ndk_B \left[\frac{g_{d+1}(1)}{g_d(1)} - \frac{d g_d(1)}{g_{d-1}(1)} \left(1 - \frac{g_{d+1}(1) g_{d-1}(1)}{g_d^2(1)} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.2.46)$$

Şimdi de $T \rightarrow T_c^-$ limitini inceleyelim. T_c den küçük sıcaklıklarda (3.2.45) denkleminde de görüldüğü gibi C_ω sabittir ve limitte bu sabite eşittir:

$$\lim_{T \rightarrow T_c^-} C_\omega = Ndk_B \frac{g_{d+1}(1)}{g_d(1)} \quad (3.2.47)$$

(3.2.46) ve (3.2.47) ifadelerinden de görüldüğü gibi C_ω , T_c sıcaklığında süreksizdir. Bu süreksizlik özısının sıcaklıkla değişiminin gösterildiği Şekil 3.2 grafiğinde net bir şekilde görülmektedir. Bu süreksizlik T_c noktasında Bose gazının 1. dereceden faz geçişi yaptığını göstermektedir.

3.3. Bir Boyutta Harmonik Tuzak İçindeki Parçacıklar

Daha öncede belirttiğimiz gibi yarı klasik yaklaşım (2.1.2) integralinde bir boyuttaki durum yoğunluğu yerine konduğunda integral ıraksadığından sonuç vermemektedir. Bu yüzden bir boyutta harmonik tuzaktaki bozonların davranışlarını 2005 yılında V.I. Yukalov tarafından geliştirilen modifiye edilmiş yarı klasik yaklaşım kullanarak inceleyeceğiz [9]. Bir boyutta toplam parçacık sayısı

$$N = \frac{1}{\hbar\omega} \int_0^\infty \frac{ze^{-\beta\varepsilon} d\varepsilon}{1 - ze^{-\beta\varepsilon}} = \frac{1}{\hbar\omega} \int_0^\infty \sum_{k=1}^\infty z^k e^{-\beta\varepsilon k} d\varepsilon \quad (3.3.48)$$

eşitliği ile verilir. Burada $\frac{1}{\hbar\omega}$ çarpanı bir boyutlu harmonik salınıcının duurm yoğunluğudur. (3.3.48) eşitliğindeki integral alınınca eşitlik

$$N = \frac{k_B T}{\hbar\omega} g_1(1) \quad (3.3.49)$$

halini alır. Burada $g_1(1) = \zeta(1) \rightarrow \infty$ olmaktadır. Bu boyutta, $g_1(1)$ ıraksadığından, yarı klasik yaklaşım BEY in ancak $T = 0$ K de olacağını öngörür. Oysa bir boyutlu sistemlerde yapılan deneyler [10, 11], bir boyutta da BEY elde edilebildiğini göstermiştir. Bu yüzden yarı klasik yaklaşım burada iyi sonuç vermemektedir. Ancak yarı klasik yaklaşımda basit bir değişiklik yapılarak bu sorun giderilebilir [9]. Bu değişiklik, (3.3.48) integralinin alt limitimin sıfır yerine küçük ama sonlu bir değer alınmasıdır. Bu alt limit kuantum mekaniğinden bildiğimiz $\hbar\omega/2$ alınırsa (3.3.48) ifadesindeki ıraksamadan kurtulunur:

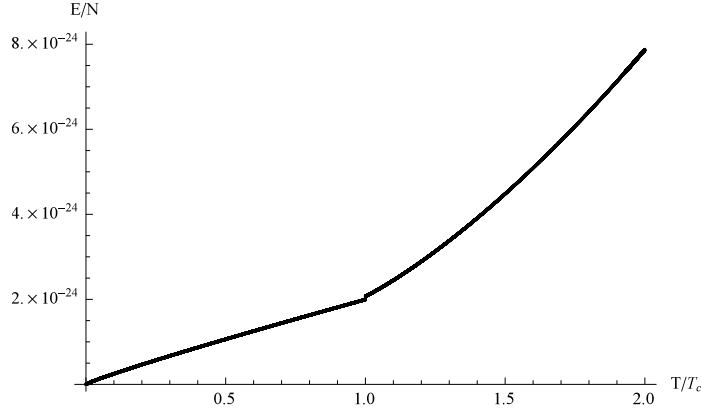
$$N = \frac{1}{\hbar\omega} \int_{\hbar\omega/2}^\infty \frac{ze^{-\beta\varepsilon} d\varepsilon}{1 - ze^{-\beta\varepsilon}} = \frac{1}{\hbar\omega} \int_{\hbar\omega/2}^\infty \frac{ze^{-\beta\varepsilon} d\varepsilon}{1 - ze^{-\beta\varepsilon}}. \quad (3.3.50)$$

(3.3.50) daki integral alınarak

$$N = -\frac{k_B T}{\hbar\omega} \ln \left[1 - e^{-\beta(\frac{\hbar\omega}{2} - \mu)} \right] \quad (3.3.51)$$

bulunur. Bu eşitlikten kimyasal potansiyel μ ya da uçuculuk z çekilerek, enerji değerini hesaplayabiliriz:

$$E = \frac{1}{\hbar\omega} \int_{U_{min}}^\infty \frac{\varepsilon z e^{-\beta\varepsilon} d\varepsilon}{1 - z e^{-\beta\varepsilon}} \quad (3.3.52)$$



Şekil 3.3. Bir boyutta enerjinin sıcaklıkla değişimi

Bu ifadedeki $z = 1$ olduğunda, $g_2(1)$ iraksamadığından $U_{min} = 0$ alınabilir ve integral hesaplanabilir. Buna göre (3.3.52) ifadesinin çözümü $T > T_c$ için

$$E = \frac{(k_B T)^2}{\hbar \omega} g_2(z) \quad (3.3.53)$$

şeklinde iken, $T < T_c$ için

$$E = \frac{(k_B T)^2}{\hbar \omega} g_2(1) = \frac{(k_B T)^2}{\hbar \omega} \zeta(2) \quad (3.3.54)$$

bulunur. Bir boyutta bu eşitlikler kullanılarak enerjinin sıcaklıkla olan değişimi Şekil 3.3 de gösterilmiştir.

Son olarak C_ω , $C_\mathcal{P}$ ve \mathcal{P} ifadelerini hesaplayalım. C_ω ifadesinin

$$C_\omega = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_{\omega, N} \quad (3.3.55)$$

olduğunu daha önceki bölümde görmüştük. (3.3.55) ifadesi, $T > T_c$ için (3.3.53)

$$C_\omega = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_{\omega, N} = \frac{2k_B^2 T}{\hbar \omega} g_2(z) + \frac{(k_B T)^2}{\hbar \omega} \frac{\partial}{\partial T} g_2(z) \quad (3.3.56)$$

elde edilir. Bu ifade kısaca

$$C_\omega = k_B \left(\frac{2k_B T}{\hbar \omega} g_2(z) - \frac{\mu}{\hbar \omega} g_1(z) \right) \quad T > T_c \quad (3.3.57)$$

biçiminde yazılabilir. $T < T_c$ için ise (3.3.54) denkleminde yararlanarak

$$C_\omega = \frac{2k_B^2 T}{\hbar \omega} g_2(1) \quad T < T_c \quad (3.3.58)$$

sonucu bulunur. Bu eşitlikler kullanılarak elde edilen C_ω nın sıcaklıkla değişimi Şekil 3.4 de gösterilmiştir.

Daha önceki bölümde yaptığımız gibi bir boyut için de C_ω nın $T = T_c$ de sürekli olup olmadığını inceleyelim. Bunun için sırası ile (3.3.57) ve (3.3.58) denklemlerinin sıcaklık T_c ye yaklaşırken sağdan ve soldan limit değerlerini hesaplayalım:

$$C_\omega(T \rightarrow T_c^-) = \frac{2k_B^2 T}{\hbar \omega} g_2(1) \quad (3.3.59)$$

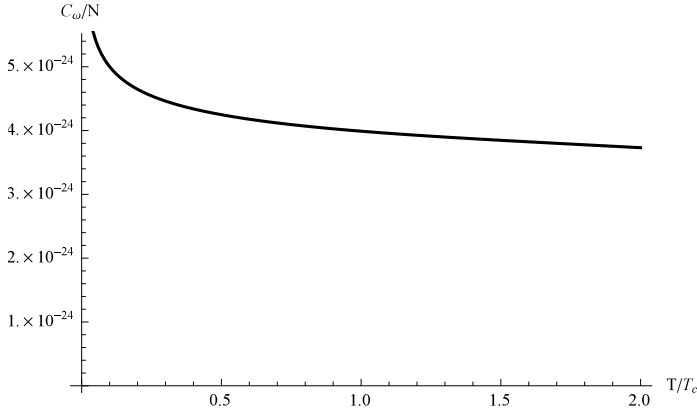
$$C_\omega(T \rightarrow T_c^+) = \frac{2k_B^2 T_c}{\hbar \omega} g_2(1) - \frac{\mu}{\hbar \omega} g_1(1) \quad (3.3.60)$$

(3.3.60) için $\mu(T_c = 0)$ olduğundan

$$C_\omega(T \rightarrow T_c^+) = \frac{2k_B^2 T_c}{\hbar \omega} g_2(1) \quad (3.3.61)$$

sonucunu elde ederiz. Buradan bir boyutta C_ω ifadesinin daha büyük boyutlarda olduğu gibi süreksiz olmadığı görülür. Ayrıca C_ω nın bir boyutta sürekli olduğu Şekil 3.4 grafiğinden de net bir şekilde görülmektedir. Şimdi \mathcal{P} ve $C_{\mathcal{P}}$ ifadelerini hesaplayabilmek için bir boyuttaki bozon gazının büyük kanonik topluluktaki bölüşüm fonksiyonunu hesaplayalım.

$$\ln \mathcal{Z}_{BK} = \frac{1}{\hbar \omega} \int_{U_{min}}^{\infty} \ln(1 - z e^{-\beta \epsilon}) d\epsilon \quad (3.3.62)$$



Şekil 3.4. Özısının sıcaklıkla değişimi

(3.3.62) eşitliğinin çözümü için $U_{min} = 0$ aldığımızda ıraksama olmadığından

$$\ln \mathcal{Z}_{BK} = \frac{k_B T}{\hbar \omega} g_2(z) \quad (3.3.63)$$

olmaktadır. Buradan

$$\Phi = -k_B T \ln \mathcal{Z}_{BK} = -\frac{(k_B T)^2}{\hbar \omega} g_2(z) \quad (3.3.64)$$

eşitliği kullanılarak \mathcal{P} ifadesi

$$\mathcal{P} = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \omega} \right)_{\mu, N} \quad (3.3.65)$$

şeklinde bulunur. Bu ifadeyi de (1.3.61) denklemini kullanarak $C_{\mathcal{P}}$ yi bulmakta kullanacağız. (1.3.61) denklemi sabit \mathcal{P} de frekansın sıcaklığa göre türevini içerdiğinden yukarıdaki denklemi

$$\left(\frac{k_B T}{\hbar \omega} \right)^2 = \frac{\mathcal{P}}{-\hbar g_2(z)} \quad (3.3.66)$$

biçimine getirip buradan ω yı çekerek

$$\omega = \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right) \left(\frac{-\hbar g_2(z)}{\mathcal{P}} \right)^{1/2} \quad (3.3.67)$$

türevi rahatlıkla alabiliriz. Bu işlem yapıldığında

$$\left(\frac{\partial \omega}{\partial T} \right)_{\mathcal{P}} = \frac{k_B}{\hbar} \left(\frac{\hbar \omega}{k_B T} \right) \quad (3.3.68)$$

bulunmaktadır. Bulduğumuz (3.3.68) ifadesini de kullanarak

$$C_{\mathcal{P}} - C_{\omega} = -\hbar \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega} \right)^2 g_2(z) \frac{k_B}{\hbar} \left(\frac{\hbar \omega}{k_B T} \right) = -k_B \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega} \right) g_2(z) \quad (3.3.69)$$

şeklinde bulunur. $C_{\mathcal{P}}$ ifadesini bulmak için (3.3.57) denkleminde elde ettiğimiz ifadeyi burada yerine koyarsak

$$C_{\mathcal{P}} - \left(\frac{2k_B^2 T}{\hbar \omega} g_2(z) - k_B \frac{\mu}{\hbar \omega} g_1(z) \right) = -k_B \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega} \right) g_2(z) \quad (3.3.70)$$

C_{ω} ifadesi de son denklemde yerine konduğunda

$$C_{\omega} = \frac{k_B^2 T}{\hbar \omega} g_2(z) - k_B \frac{\mu}{\hbar \omega} g_1(z) \quad (3.3.71)$$

elde edilir. T nin büyük olduğu sıcaklıklarda $z \ll 1$ olur ve bu limite $g_n(z) = z$ olduğundan $C_{\mathcal{P}}$ için

$$C_{\mathcal{P}} = k_B z \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega} - \frac{\mu}{\hbar \omega} \right) \quad (3.3.72)$$

elde edilir. Bu ifadeye z değeri, $\ln z$ nin sonsuza gitmesinden daha hızlı bir şekilde sıfıra gittiğinden (3.3.73) ifadesinde ki $C_{\mathcal{P}}$ ifadesinin de sıfıra gittiği görülmektedir:

$$C_{\mathcal{P}} = k_B \left(\frac{k_B}{\hbar \omega} \right) z (1 - \ln z) \rightarrow 0. \quad (3.3.73)$$

Bu sonuç bozon gazlarının yüksek sıcaklıklarda MB parçacıkları gibi davrandığı bilindiğinden ve 2. bölümde MB parçacıkları için $C_{\mathcal{P}}$ sıfır bulunduğundan daha önce elde ettiğimiz sonuçlarla uyumludur.

4. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Bu çalışmada harmonik tuzakta tuzaklanmış parçacıklar için 2002 yılında M. Ligare [3] tarafından önerilen ve Maxwell Boltzman parçacıklarına uygulanan termodinamik model bozonlara uygulanacak şekilde geliştirilmiştir. Giriş kısmında da belirttiğimiz gibi bu modelde termodinamiğin birinci yasasındaki iş terimi olan $dW = -PdV$ terimi yerine, ω harmonik tuzak potansiyelinin ortalama frekansı olmak üzere yeni bir iş terimi olan $dW = \mathcal{P}d\omega$ terimi kullanılmıştır. Bu terim aynı zamanda geliştirilmiş basınç olan \mathcal{P} niceliğinin tanımı olarak ta düşünülebilir. Önceki bölümlerde iş teriminin değiştirildiği bu modelde enerji, geliştirilmiş basınç, sabit frekans ve geliştirilmiş basınçta ısı sığası gibi niceliklerin hesaplanabildiği, sıcaklıkla değişimlerinin incelenbildiğini gösterdik.

Bu modeldeki temel farklardan biri de basınç yerine biraz önce sözettiğimiz geliştirilmiş basıncın kullanılmasıdır. Bu yüzden geliştirilmiş basıncın fiziksel anlamı üzerine yorum yapmakta yarar var. Geliştirilmiş basıncın boyutunun, $\mathcal{P}d\omega$ çarpımının enerji boyutunda olmasından dolayı kuantum mekaniğinden bildiğimiz \hbar ya da klasik mekanikteki aksiyon ile aynı olduğu görülmektedir. Bir parçacığın ya da sistemin aksiyonu bu parçacık ya da sistemin hareketliliği (mobilitesi) hakkında bilgi vermektedir. Buradan yola çıkarak geliştirilmiş basıncın da tuzak içindeki parçacıkların hareketliliği hakkında bilgi verdiği düşünülebilir. Yani geliştirilmiş basınç hacmi kontrol edilebilen sistemlerdeki basınç benzeri bir niceliktir. Kinetik teoriden bildiğimiz gibi basınç, parçacıkların kinetik enerjileri arttıkça artıp, azaldıkça azalan bir niceliktir [12]. Harmonik tuzak frekansı artarsa, $1/2m\omega^2r^2$ şeklinde olan harmonik tuzağın kolları kapanacaktır. Bunun sonucunda parçacıklar üzerine bir iş yapılacak ve parçacıklar daha dar bir bölgeye tuzaklanacaklardır. Bu da parçacıkların hareketliliğinin artacağı anlamına gelir. $dW = \mathcal{P}d\omega$ teriminden de görülebileceği gibi, iş değişiminin frekans değişimi $d\omega$ ya oranı \mathcal{P} yi

vermektedir. Bu da parçacıkların hareketliliğinin \mathcal{P} ile ilişkili olduğunu göstermektedir. Bu yorum belirsizlik ilkesi ile de uyumludur. ω arttığında harmonik salıncı potansiyelinin kolları kapanacağından parçacıklar daha dar bir alana hapsolacaklardır. Bu durumda konumlarındaki belirsizlik azalacak dolayısı ile momentumdaki belirsizlikleri artacaktır. Momentumdaki belirsizlik $\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$ şeklinde tanımlıdır. Harmonik salıncı içindeki parçacıkların simetriden dolayı momentumlarının ortalamasının sıfır olduğu açıktır. O halde momentumun belirsizliği, momentumun karesinin ortalamasının kareköküne eşittir. Sonuç olarak momentumun belirsizliği arttığından parçacıkların momentumlarının karesinin ortalaması yani parçacıkların hareketliliği artacaktır. Buradan da \mathcal{P} nin parçacıkların hareketliliğinin bir ölçümünü verdiği görülür.

KAYNAKLAR

- [1] Mandl, F. 1988. Statistical Physics. 2.baskı, pp.21-28, New York.
- [2] Pethick, C.J., Smith, H. 2002. Bose-Einstein condensation in dilute gases. 2.baskı, Cambridge University Press, pp.62-65, Cambridge.
- [3] Ligare, M. 2002. Elementary thermodynamics of trapped particles. **arXiv:physics/0210055v1** [physics.ed-ph]: 1-3.
- [4] Verçin, A., Dereli, T. 2014. Kuantum Mekaniği, 3.baskı, TÜBA Yayınları, pp.370-376, Ankara.
- [5] Petchick, C.J.H. 2008. Bose-Einstein condensation in dilute gases. 2.baskı. Cambridge University Press, pp.36-38, New York.
- [6] Wing, W.H. 1984. Prog.Quantum Electronics 8: 181.
- [7] Greiner, W., Neise, L., Stöcker, H. 1997. Thermodynamics and statistical mechanics. Columbia University, pp. 108-119, New York.
- [8] Boas, M.L. 2006. Mathematical methods in the physical sciences. 3. baskı John Wiley Sons pp.552-553, New Jersey.
- [9] Yukalov, V.I. 2005. Modified Semiclassical approximation for trapped Bose gases, **Phys Rev A.**, 72 033608 1-6.
- [10] Görlitz, A., Vogels, J.M., Leanhardt A. E., Raman, C., Gustavson, T.L., Abo-Shaeer, J.R., Chikkatur A. P., Gupta S., Inouye S., Rosenband T., Ketterle W. 2001. Realization of Bose-Einstein Condensates in Lower Dimensions, **Phys. Rev. Let**, 87: 130402 1-4.
- [11] Khajawa, Al, U., Andersen, J.O., Proukakis, N.P., Stoof, T.C. 2002. Low Dimensional Bose gases, **Phys. Rev. A** 66: 013615 1-4.
- [12] Reif., F. 1965 . Fundamentals of statistical and thermal physics. Mc Graw Hill, pp.262-278, NewYork.

ÖZ GEÇMİŞ**KİŞİSEL BİLGİLER**

Adı Soyadı : Mehmet Şirin Akın
Doğum Yeri ve Tarihi : NUSAYBİN 28/03/1988

EĞİTİM DURUMU

Lisans Öğrenimi : Adnan Menderes Üniversitesi
Fen-Edebiyat Fak., Fizik Böl.
Yüksek Lisans Öğrenimi : Adnan Menderes Üniversitesi
Fen-Edebiyat Fak., Fizik Böl.
Bildiği Yabancı Diller : İngilizce

İLETİŞİM

E-posta Adresi : mehmet-47300@hotmail.com
Tarih : 21.01.2015