

**AŞIRI-SOĞUK GAZDA ATOMİK(Rb+Rb, K+K ve Rb+K)
SAÇILMA**

M. Kemal ÖZTÜRK

**DOKTORA TEZİ
FİZİK**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**OCAK 2007
ANKARA**

M. kemal ÖZTÜRK tarafından hazırlanan AŞIRI-SOĞUK GAZDA ATOMİK(Rb, K ve Rb-K) SAÇILMA adlı bu tezin DOKTORA tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.

Prof. Dr. Süleyman ÖZÇELİK
Tez Yöneticisi

Bu çalışma, jürimiz tarafından oy birliği ile FİZİK Anabilim Dalında DOKTORA tezi olarak kabul edilmiştir.

Başkan: : Prof. Dr. Mehmet ZENGİN

Üye : Prof. Dr. Süleyman ÖZÇELİK

Üye : Prof. Dr. Ziya B. GÜVENÇ

Üye : Prof. Dr. Bülent KUTLU

Üye : Prof. Dr. Mehmet ÇİVİ

Tarih : 11/01/2007

Bu tez, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tez yazım kurallarına uygundur.

TEZ BİLDİRİMİ

Tez içindeki bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edilerek sunulduğunu, ayrıca tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada orijinal olmayan her türlü kaynağa eksiksiz atıf yapıldığını bildiririm.

M. Kemal Öztürk

**AŞIRI-SOĞUK GAZDA ATOMİK(Rb+Rb, K+K, Rb+K) SAÇILMA
(DOKTORA Tezi)**

M. Kemal ÖZTÜRK

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
Ocak 2007**

ÖZET

Bu çalışmada aşırı düşük sıcaklıklarda ^{85}Rb , ^{39}K ve Rb-K izotop çarpışmaları için literatürde bulunan ab-initio potansiyellere uygun biçimde potansiyel denklemleri uydurma yapılarak elde edilen etkileşme potansiyelini kullanarak Bose-Einstein teorisi BEC'nin kararlı olup olmadığı bilgisini veren saçılma mesafesi ve bağlı durum ve bağlı olmayan durum arasındaki mesafeyi veren etki mesafesi nümerik ve yarıklasik metotlar ile hesap edildi ve deneysel sonuçlarla uyumluluğu test edildi. Düşük sıcaklıklarda atomik faz kaymasının nümerik yöntemle doğrusallığı atom etkileşmeleri için gösterildi ve teorik değerlerle uyumluluğu tartışıldı. Saçılma mesafesi ve etki mesafesi yakınsaklığı Symskoviski ve Gao'nun formülleri ile test edildi. Ayrıca sıfır-enerji tesir kesitleri ve yük transferleri hesap edildi.

Bilim Kodu	:202.1.008
Anahtar Kelimeler	:Bose Einstein yoğunlaşma, Aşırı-soğuk, Potasyum, Rubidyum, Elastik saçılma
Sayfa Adedi	:135
Tez Yöneticisi	:Prof. Dr. Süleyman ÖZÇELİK

**ATOMIC(Rb+Rb, K+K, Rb+K) SCATTERING IN ULTRA-COLD GAS
(PhD Thesis)**

M. Kemal ÖZTÜRK

**GAZI UNIVERSITY
INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY
January 2007**

ABSTRACT

In this thesis, at ultracold temperatures, the scattering length which is specifying the stable or unstable of Bose Einstein Condensation (BEC), and effective range which describes a measure between bound and unbound cases of atomic interaction, has been calculated using numeric and semiclassical method for an appropriate potential form is fitted to *ab-initio* values found in literature for Rb, K and Rb-K isotopes, and then the obtained values are compared with experimental results. At low energies, it shows that the atomic phase shifts display linear behavior, and they are compared with theoretical values. Convergence of scattering length and effective range are tested using formulas of Szmykowski and Gao. Also zero-energy cross sections and spin-change cross sections are calculated for the scattering of these atoms.

Science Code :202.1.008

**Key Words :Bose Einstein Condensation, Ultracold, Potassium Rubidium,
Elastic scattering.**

Page Number:135

Adviser :Prof. Dr. Süleyman Özçelik

TEŞEKKÜR

Çalışmalarım boyunca değerli yardım ve katkılarıyla beni yönlendiren hocam Prof. Dr. Süleyman ÖZÇELİK'e yine kıymetli tecrübelerinden faydalandığım hocalarım Prof. Dr. B. Ziya GÜVENÇ'e ve Prof. Dr. Bülent KUTLU'ya teşekkürü bir borç bilirim. Ayrıca bana doğrudan veya dolaylı destek veren hocalarım ve arkadaşlarıma teşekkür ederim.

Bu tezi, beni her zaman destekleyen çok kıymetli annem Hacer Öztürk ve babam Halil İbrahim Öztürk'e adanmıştır.

DPT 2001 K 120590 nolu projenin yürütücüsü ve Fizik Bölüm Başkanı Sayın Prof. Dr. Süleyman ÖZÇELİK'e, proje kapsamında tez çalışmamın tamamlanmasını sağladığı için teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET	iv
ABSTRACT	v
TEŞEKKÜR	vi
İÇİNDEKİLER	vii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ	x
ŞEKİLLERİN LİSTESİ	xii
SİMGELER VE KISALTMALAR	xiv
1. GİRİŞ	1
2. SOĞUK ÇARPIŞMA BİLGİSİ	5
2.1. Soğuk Saçılma Teorisinin Temel Kavramları	8
2.2. $E \rightarrow 0$ Limitinde Kuantum Özellikler	15
2.3. Taban Seviye Çarpışmaları	18
2.3.1. Bose-Einstein yoğunlaşması	21
3. METOT	27
3.1. Atomik Özellikler ve Etkileşme Potansiyeli	28
3.1.1. Atomik yapı	28
3.1.2. Etkileşme potansiyeli	29
3.2. Yarı-Klasik Çözüm	33
3.2.1. Saçılma mesafesi	33
3.2.2. Etki menzili teorisi	40
3.2.3. WKB metoduna dayalı etki menzilin hesaplanması	44
3.3. Szmytkowski Tarafından Elde Edilen Analitik Saçılma Mesafeleri	49

Sayfa

3.3.1. Ters kuvvet potansiyelleri	52
3.3.2. İki ters kuvvet potansiyelin süper pozisyonu	54
3.3.3. Atomik saçılmalar	58
3.4. Kuantum Kusur Teorisi	61
3.5. Nümerik Yöntem	66
3.5.1. Saçılma problemin formülasyonu	66
3.5.2. Fox-Goodwin (Numerov) Metodu	71
3.5.3. Faz kaymasının nümeriksel tanımlanması	74
4. HESAPLAMALAR	78
4.1. Potansiyel Denklemi ve Parametrelerinin Elde Edilmesi	78
4.1.1. Potasyum için etkileşme potansiyeli	80
4.1.2. Rubidyum etkileşme potansiyeli	84
4.1.3. Rubidyum-potasyum etkileşme potansiyeli	86
4.2. Saçılma Mesafesi	89
4.2.1. Potasyum'un triplet seviye saçılma mesafesi	89
4.2.2. Rubidyum'un triplet seviye saçılma mesafesi	91
4.2.3. QDT ile hesaplanılan rubidyum saçılma mesafelerin yakınsaklığı	93
4.2.4. Szmytkowski'nin formülleri ile yarı-klasik sonuçların yakınsaklığı	94
4.2.5. Rb-K izotopların singlet ve triplet seviye saçılma mesafeleri	94
4.2.6. QDT ile hesaplanılan Rb-K saçılma mesafelerin yakınsaklığı	97
4.3. Etki Menzili	99
4.3.1. Aşırı soğuk potasyum atomunun etki menzili	99
4.3.2. Aşırı soğuk Rubidyum atomunun etki menzili	100

Sayfa

4.3.3. QDT ile hesaplanılan rubidyumun etki menziline yakınsaklığı.....	101
4.3.4. Aşırı soğuk Rubidyum-Potasyum çarpışmasının etki menzili	102
4.3.5. QDT ile hesaplanılan rubidyumun potasyumun etki menziline yakınsaklığı.....	103
4.4. Faz Kayması.....	104
4.4.1. Aşırı soğuk potasyum saçılmasının faz kayması	104
4.4.2. Aşırı soğuk rubidyum saçılmasının faz kayması	105
4.4.3. Aşırı soğuk rubidyum potasyum çarpışmasının faz kayması.....	106
4.5. Tesir Kesiti.....	108
4.5.1. Aşırı soğuk potasyum çarpışmasının tesir kesiti.....	108
4.5.2. Aşırı soğuk rubidyum çarpışmasının tesir kesiti.....	110
4.5.3. Aşırı soğuk rubidyum potasyum çarpışmasının tesir kesiti	112
4.6. Hata Hesabı	116
5. SONUÇ VE ÖNERİLER.....	118
KAYNAKLAR	126
ÖZGEÇMİŞ	135

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 3. 1. Alkali atomlar için proton sayısı Z , nötron sayısı N , çekirdek spini I ve çekirdek manyetik moment μ_m ($\mu_N = e\hbar/2m_p$ çekirdek magneton biriminde) değerleri.....	28
Çizelge 4.1. Atomik birimde Değiş dokuş potansiyel için valans elektron dalga fonksiyonun genliği (A ve B), C katsayısı ve elektronun iyonizasyonyarıçapı (ρ).....	80
Çizelge 4.2. Triplet seviyede potasyum atomu için potansiyel sabitleri.....	82
Çizelge 4.3. Triplet seviyede rubidyum atomu için potansiyel sabitleri.....	84
Çizelge 4.4. Singlet ve triplet seviyelerde Rubidyum-Potasyum etkileşmesi için potansiyel sabitleri	87
Çizelge 4.5. Kesme yarıçapları için saçılma mesafeleri $a(a.u.)$ ve yarı-klasik faz kayması ϕ	89
Çizelge 4.6. Farklı üç kesme yarıçapı için yarı-klasik faz kayması ve saçılma mesafesi ve ayrıca literatürde bulunan saçılma mesafeleri.....	92
Çizelge 4.7. $^3\Sigma_u^+$ seviyede aşırı soğuk Rb - Rb çarpışmalar için saçılma mesafesinin yakınsaklığı.....	94
Çizelge 4.8. Singlet ve triplet seviyelerde aşırı soğuk rubidyum-potasyum karışımlarının saçılma mesafeleri	95
Çizelge 4.9. Singlet ve triplet seviyelerde aşırı soğuk rubidyum-potasyum karışımlarının ortalama saçılma mesafesi a (atomic birim) ve yarı-klasik faz kayması.....	96
Çizelge 4.10. Beş farklı kesme yarıçapında çarpışan potasyum atomların etki menzili r_e (a.u.).....	99
Çizelge 4.11. Rubidyum atom saçılmasının farklı üç kesme yarıçapı için etki menzili(a.u.)	100
Çizelge 4.12. Rubidyum-potasyum izotoplarının saçılması için etki menzili r_e (a.u.).....	102

Çizelge	Sayfa
Çizelge 4.13. Aşırı-düşük enerjilerde iki potansiyel için hesap edilen faz kaymaları, tesir kesitleri ve toplam tesir kesitleri	108
Çizelge 4.14. Numerov metodu kullanılarak $V(r)$ için hesaplanan tesir kesitleri ve faz kaymaları	112

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.1. Atomik ortam için de Broglie dalga boyuna karşılık, sıcaklık boyunca değişik fiziksel olayların şematik gösterimi. a_0 terimi H atomunun Bohr yarıçapını temsil eder	6
Şekil 2.2. Manyetik alanın büyüklüğüne bağlı ^{87}Rb atomun taban aşırı ince düzeyleri [8] ve her seviyenin Zeeman yarılması	11
Şekil 2.3. Rb_2 molekülün taban seviye potansiyel enerji eğrileri [8]. İç şekil $F_a + F_b = 1+1, 1+2,$ ve $2+2$ aşırı ince düzeyli atomların uzun menzillerinin genişletilmesini gösterir	12
Şekil 2.4. a) Pozitif, sıfır ve negatif üç farklı potansiyel için kısa menzilli dalga fonksiyonun genişletilmesini gösterir. b) $1\mu\text{m}$ 'lik skala da uzun menzilde geniş de Broglie dalga fonksiyonunu (Potansiyellere karşılık elde edilen saçılma mesafeleri şekil üzerinde verilir)	17
Şekil 3.1. Singlet ve triplet sevide bulunan elektronlar ile iki taban seviye rubidyum atomu için atomik ayrımın fonksiyonu olarak etkileşme potansiyeli	32
Şekil 3.2. Tipik atomlar arası potansiyel ve r 'nin karakteristik değeri	34
Şekil 4.1. $^{39}\text{K}_2$ 'nin triplet seviyesinde deneysel verilerle birlikte seçilen kesme yarıçapı için potansiyel enerji eğrisi. İç yerleşim doğrusal Regresyon ve R^2 değerlerini gösterir	81
Şekil 4.2. Kesme yarıçapının seçilen değerleri için normalize raydal dalga fonksiyonu $y(r)$	83
Şekil 4.3. Rubidyum atomunun triplet seviyesi için <i>ab-initio</i> eğrileri, itici ve çekici potansiyel terimlerden oluşan potansiyel ile karşılaştırılarak elde edilen potansiyel enerji eğrileri	85
Şekil 4.4. Moleküler KRb 'nin singlet ve triplet seviyelerinde en iyi kesme yarıçapı için <i>ab-initio</i> potansiyel(katı çizgi) ile karşılaştırılarak elde edilen potansiyel enerji eğrileri(noktalı çizgi). İç set R^2 ve kesme yarıçapını göstermektedir	88
Şekil 4.5. K sonsuza giderken, K parametresinin fonksiyonu olarak QDT ile hesaplanılan saçılma mesafesinin yakınsaklığı	93

Şekil	Sayfa
Şekil 4.6. K sonsuza giderken K parametrenin fonksiyonu olarak QDT ile hesaplanılan singlet a) ve triplet b) saçılma mesafesinin WKB sonucuna yakınsaması.....	98
Şekil 4.7. K sonsuza giderken, K parametresinin fonksiyonu olarak QDT ile hesaplanılan etki menzilin yakınsaklığı.....	101
Şekil 4.8. K sonsuza giderken K parametrenin fonksiyonu olarak QDT ile hesaplanılan etki menzilin yakınsaması.....	104
Şekil 4.9. Potasyum atomu için farklı kesme yarıçaplarında Eş. 3.4'deki potansiyel için hesaplanan s-dalga faz kaymaları(kesik çizgi) ve $LJ_{12,6}$ tipi potansiyeli için eşit fazda ϕ faz kaymaları(üçgen). Çember çizgi $\delta_0 = -a k'$ yı temsil eder.....	104
Şekil 4.10. Farklı kesme yarıçaplarında $V(r)$ potansiyeli için hesaplanılan s-dalga faz kaymaları (katı çizgiler). Noktalı çizgiler $\delta_0 = -a k$ ile hesaplanan faz kaymalarını gösterir.....	106
Şekil 4.11. Singlet ve triplet seviyelerde(Katı çizgiler) $V(r)$ potansiyeli için hesaplanılan s-dalga faz kaymaları. Noktalı çizgiler $\delta_0 = -a k$ ile hesaplanılan eğriler göstermektedir.....	107
Şekil 4.12. Farklı sıcaklıklarda ve açısal momentumun artan değerlerinde potasyum atomunun saçılması için diferansiyel tesir kesitleri (seçilen $r_c=18,75a.u.$ kesme yarıçapı için).....	109
Şekil 4.13. $r_c=18,75a.u.$ kesme yarıçapında ve $L=2, 4$ açısal momentumda farklı sıcaklıklarda rubidyum atomun saçılması için diferansiyel tesir kesiti .	111
Şekil 4.14. Karışık rubidyum-potasyum izotopları için enerjinin fonksiyonu olarak spin-yük tesir kesitleri.....	114
Şekil 4.15. Karışık Rubidyum-potasyumun farklı izotopların singlet a) ve triplet b) ve değiş dokuş oran sabiti c).....	115
Şekil 4.16. Hata hesabının yarıklasik saçılma mesafesinden hesaplanması	117

SİMGELER VE KISALTMALAR

Bu çalışmada kullanılmış bazı simgeler ve kısaltmalar, açıklamaları ile birlikte aşağıda sunulmuştur.

Simgeler	Açıklama
y	Dalga fonksiyonu
k	Dalga sayısı
a	Saçılma mesafesi
$\bar{a}$	Ortalama saçılma mesafesi
r_e	Etki mesafesi
$\bar{r}_e$	Ortalama etki mesafesi
δ_0	Sıfır-enerji faz kayması
φ	Yar-klasik faz kayması
σ_e	Toplam elastik tesir kesiti
σ_e^S	Singlet elastik tesir kesiti
σ_e^T	Triplet elastik tesir kesiti
σ_{sc}	Spin kayma elastik tesir kesiti
N_{bd}	Titreşim seviyelerin toplam sayısı
V	Potansiyel
ρ	Küresel kabuk yarıçapı
λ_{dB}	Broglie dalgaboyları
C	der Waals sabiti
K	Oran sabiti
μ	İndirgenmiş kütle
R	Atomlar arası mesafe
E	Enerji
T	Sıcaklık

Simgeler**Açıklama** **S**

Elektronik spin

 I

Çekirdek spini

 F

Toplam spin

 L

Yörünge açısal momentumu

 γ

Asimptotik parametre

 Φ

Yarı-klasik faz kayması

 f_c

Kesme fonksiyonu

Kısaltmalar**Açıklama****BEC**

Bose Einstein yoğunlaşması

QDT

Kuantum Kusur Teori

DTK

Diferansiyel tesir kesiti

WKB

Wentzel, Kramers ve Brillouin

a.u.

Atomik birim

1. GİRİŞ

Son yüzyılın sonlarına doğru aşırı düşük sıcaklıkların cazibesi fizikçilerin çoğunun dikkatini çekmiştir. Mutlak sıfıra doğru yeni gelişmeler yeni ve zengin fiziği ortaya koymuştur. Bu cazibeye kapılan bilim adamlarının dondurucu soğüğün neden yeterince soğuk olmadığı fikrine kapılmaları insanları şaşırtabilir, fakat eğer güneşin yüzeyinde yaşamış olsaydık, doğanın görünüşü nasıl olacaktı. Soğutucuları keşfetmeksizin yalnız gaz maddeleri tanınmış olacak ve asla sıvı ve katıları gözlemiş olmayacaktık [1]. Normal olarak yeryüzü sıcaklığına soğutma, çarpıcı bir şekilde maddenin farklı durumlarını ortaya çıkarmıştır. Fakat bu gelişmeler bir başlangıçtır, birçok durum daha fazla soğutma ile ortaya çıkar. Kelvin menzilineki bu yaklaşım ^4He 'nin 1911'de süper iletkenliğin ve 1938'de süper akışkanlığın keşfiyle ortaya çıkan bu olaylar teknolojideki yoğun olarak kullanılmaktadır. Mili Kelvin bölgede soğutma 1972'de ^3He süper akışkanlığını ortaya çıkardı. 1980'lerde lazer soğutmanın keşfi aşırı düşük sıcaklık fiziğine yeni bir yaklaşım getirdi[1]. Seyretilik atom bulutlarının mikrok Kelvin sıcaklıkta örnekleri üretildi ve bu sıcaklıkta çarpışmaların incelendiği ve kesin ölçümlerinin yapıldığı çalışmaları ortaya koydu. NanoKelvin sıcaklıklar kuantum dejenere bölgesini araştırmak için gerekli oldu. Bose Einstein yoğuşması (BEC) 1995'de gerçekleştirildi. Soğutmadaki bu başarıların her biri önemli bir gelişme sayıldı ve bu başarılar Nobel ödülü ile ödüllendirildi [1].

Kuantum dejenere gazları elde edebilmek için esas teknik soğutma tekniğidir. Çünkü yüksek sıcaklıktaki seyretilik atomlar klasik olarak davranır. Atomların de Broglie dalgaboyları $\lambda_{dB} = h/(2\mu k_B T)^{1/2}$, atomlar arası mesafeyle karşılaştırıldığında küçüktür. Seyretilik gazdaki atomların soğutulması ile de Broglie dalgaboyu λ_{dB} , atomlar arası mesafeye eşitlenmeye başladığı zaman kuantum dejenere durumu başlar. Atomik dalga paketleri üst üste biner ve gaz ayırt edilemeyen parçacıklar haline dönüşür ve “kuantum çorbası” tabiri ile tanımlanır. Eğer atomlar boson ise aynı kuantum seviyeyi oluşturan atom bulutu

olarak tanımlanan yoğuşma kesin bir sıcaklıkta ortaya çıkar (bu ideal gaz için $n\lambda_{dB}^3 = 2,612$ şartına bağlıdır). Eğer atomlar fermiyon ise soğutma düzenli olarak gazın “fermi denizi” olmasına daha yakın getirir. Bu durumda her bir atom Paul dışarlama ilkesine uygun en düşük enerji seviyesinde olur [1].

Bir BEC ve Fermi denizi, gazın aşırı soğuk olması gibi basit mantığa dayalıdır. Ancak çoğu zaman, sıvı ve katıya benzer faz geçişleri ile kuantum dejenerasyon boşa çıkar. Bu geleneksel durumlardan son derece düşük yoğunluklar ile kaçınılır. Bu yoğunluklar yaklaşık olarak havanın yoğunluğundan yüz binde biri kadardır. Birkaç saniye veya dakikada üç boyutlu çarpışmalar, (bu çarpışmalar yoğunluğunun tersinin karesi ile orantılıdır) molekül ve topakların biçimlenmesi ile istenmeyen durumu ortaya koyar. İkili(binary) çarpışmaların oranı artırılarak yoğunluk orantılı olarak düşürülür ve bu istenmeyen durumdan kaçınılır. İkili çarpışmalar çok sıklıktadır ve gazın 10 ms içinde dengeye ulaşmasını sağlar [1, 2].

MikroKelvin sıcaklık bölgesine ulaşma, iki işlemin birleştirilmesi ile mümkün olur. Laser soğutma önce gazı soğutur. Daha sonra soğutulan seyreltik gaz manyetik tuzaklarla hapsedilir. İkinci durumda zorlamalı buharla soğutma, tuzak derinliği azaltılır ve enerjisi fazla olan atomların çarpışma sonucunda kaçması sağlanır. Geriye kalan atomlar yeniden termalize olarak daha düşük sıcaklıklara gider. BEC deneylerinde kuantum dejenerasyonu sıcaklıkları 500nK ve $2\mu K$ arasında ve yoğunlukları 10^{14} ve $10^{15} cm^{-3}$ arasında olur. En geniş yoğuşma Na’da 30 milyon atom ve H’de 1 milyar atomdur; En küçüğü birkaç yüz atomu içerir. Manyetik tuzağa bağlı olarak yoğuşmanın şekli yaklaşık olarak hem 10-50 μm çaplı yuvarlak veya yaklaşık 15 μm çaplı ve 300 μm uzunluğunda sigara şekline sahiptir. Bütün soğuma işlemi yoğuşmayı birkaç saniyeden birkaç dakikaya kadar sürdürür [2, 3].

BEC çalışmaları 1995 den başlayarak aşırı derecede büyüdü ve atom fiziği, kuantum optik ve katıhal fiziği çalışma topluluklarının büyük dikkatini çekti. Tuzaklaşmış aşırı

soğuk buhar yeni kuantum sistemleri olarak ortaya çıktı. Bu alan tarihi dönüm noktası olarak bilinir. Kısa zamanda yaklaşık 20 ülkede BEC gözlemdi.

Bu tez çalışmasında, dünyada etkisi büyük olan bu gelişmenin bilime kazandırdıklarını anlama yanında atomik türlerin BEC'nin oluşmasında çok önemli olan atomik çarpışmalar, aşırı düşük sıcaklık menzillerinde etkileşme potansiyeli belirlenen $Rb+Rb$, $K+K$ ve $Rb+K$ etkileşen atomik türleri için yarıklasik [4], analitik [5, 6] ve nümerik [7] metotlar kullanılarak incelendi. Bu türler için amacımız, potansiyel parametrelerin hesaplanması ile birlikte BEC'nin kararlılığını kontrol eden saçılma mesafesi ve etkileşmenin menzilini tanımlayan etki menzilini hesaplamaktır. Metotlar arasında uyumluluğunu tartışmak amacı ile saçılma özelliklerin yakınsaklığı incelendi. Ayrıca bu türler için soğuk atom saçılmayı tarif eden diğer özellikler incelendi.

Amacımız doğrultusunda ve konunun literatürde geldiği noktayı belirlemek için Bölüm 2'de soğuk saçılma bilgisi yanında özet olarak literatür bilgisi sunuldu.

Son yıllarda BEC'ye yön verebilecek birçok teori ortaya çıktı. Bu teoriler olayı açıklamak için basit teorileri kullandılar. Örneğin BEC dinamiği Bölüm 2'de tartışılacak Gross-Pitaevski denklemi veya doğrusal olmayan Schrödinger denklemi ile tanımlanırken, çarpışma dinamiği basit Radyal denklemin çözümüne dayanır. Buradaki zorluk atomların etkileşmesini belirleyen itici ve çekici potansiyelin üstel ve ters kuvvet terimleri içermesidir. Bu terimler denklemin tam çözümünü zorlaştırır. Ancak çözüm için belli yaklaşımlar kullanmak gerekir. Bu yaklaşımlar yarı-klasik, nümerik ve belli koşullar altında tam çözüme yakın çözümlerden oluşur. Bölüm 3'de bunlardan Yarı-Klasik çözüm [4], Szmytkowski tarafından elde edilen analitik Saçılma Mesafeleri [5], Kuantum Kusur Teori [6] ve Nümerik Yöntem [7] sunuldu. Bu metotların genel özelliklerin dışında ortak özelliği saçılma mesafesini hesaplamasıdır. İleride tartışacağımız üzere soğuk atomik türler için en yaygın kullanılan metotlardır ve bu metotlardan elde edilen sonuçlar deneysel değerlerle uyumluluk gösterir. Bu yaklaşımların en temelinde bu türler için sistemi tanımlanan

uygun potansiyel kullanılması gerekir. Yine Bölüm 3'ün atomik özellikler ve etkileşme potansiyeli kısmın da genel bir tartışma verildi.

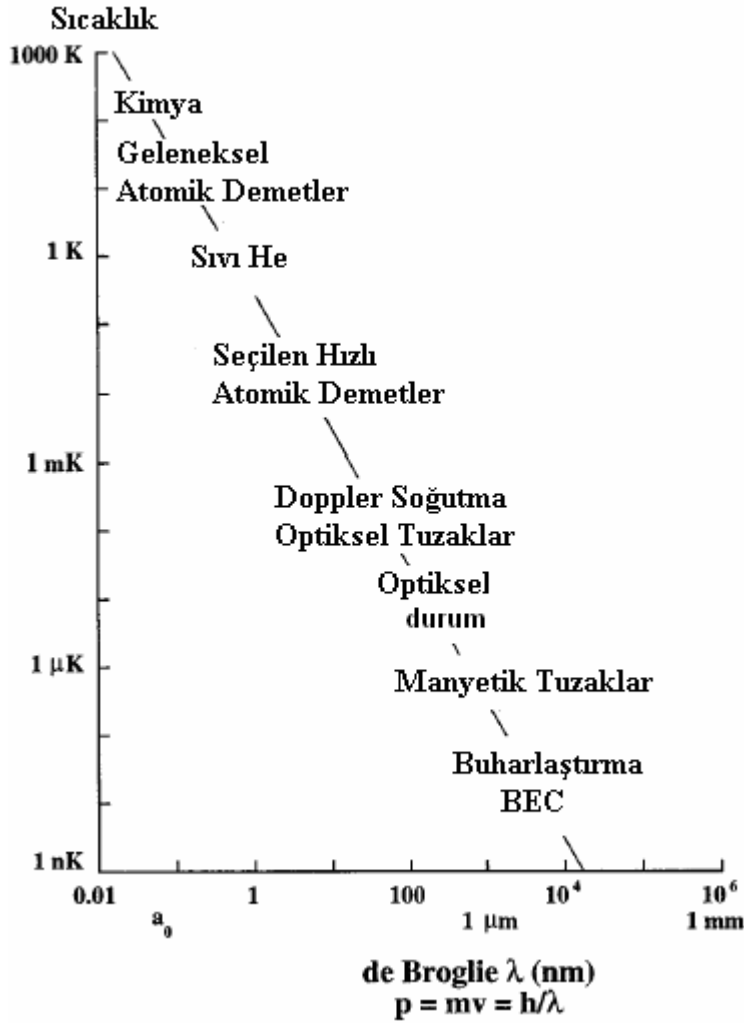
Hesaplamalar kısmında, her saçılma özelliği başlığı altında sırasıyla potasyum, rubidyum ve potasyum rubidyum'un saçılma özellikleri hesaplandı. İlk kısımda bu etkileşen türler için etkileşme potansiyel genel formu elde edildi ve saçılma mesafesi, etki mesafesi ve bu saçılma özelliklerin yakınsaklığı incelendi. Daha sonraki kısımlarda aşırı düşük sıcaklıklarda faz kayması ve tesir kesiti hesabı ve tartışması yapıldı.

Sonuç ve Öneriler bölümünde hesaplamalar ayrıntılı olarak tartışıldı ve sonuçlar literatür ile uyumluluğu karşılaştırıldı. Sonuçların literatür ile uyum içinde olduğu görüldü.

2. SOĞUK ÇARPIŞMA BİLGİSİ

15 yıl önceki başarılı teori ve deneyler lazerin millikelvin altı sıcaklıklarda atomları soğutulabileceğini ve yoğunlaşmanın biçimleneceğini gösterdi [3, 8, 9]. Dolayısıyla atomik, moleküler ve optik fizikte çarpıcı birkaç araştırma konusu ortaya çıktı [10]. Bunlardan atom girişimi [11], madde-dalga holografisi [12], optiksel örgüler [13] ve seyreltik gazda Bose-Einstein yoğunlaşması (BEC) çalışmalarını [1] sayabiliriz. Bu olaylar, lazer ile atomların soğutulması sonucu ortaya çıktı ve temelde soğuk atomik çarpışmalar önemli rol oynar [8]. Bu sayede atom, molekül ve optik fizik alanı dışında yeni bir alan ortaya çıktı. Soğuk spektroskopide çarpışmalar atomik ve molekül parametrelerin kesin ölçülmesinde önemli değişiklik yapar veya radyasyon alanlarında çarpışan atomları bir araya toplama etkisi gösterir. Bunu daha iyi anlayabilmek için Kay. [8]' den alınan Şekil 2.1'e bakmalıyız: Tipik atomik de-Broglie dalga boyu, sıcaklıkla değişir. Eksen boyunca değişik fiziksel olaylar görülür. Birkaç yüz nanometre mertebede de-Broglie dalga boylarına sahip ideal gaz kimyası, alışageldiği gibi bağlı yük dağılımları ile tanımlanan potansiyel yüzeyler boyunca hareket eden parçacıkların etkileşmesi olarak yorumlanır. Bir zamanlar sıvı helyum fiziğin sınırı olarak düşünülürdü: Şekil 2.1' de bu durum görülür. Optiksel ve buharlaştırarak soğutma ile sıvı helyum sıcaklığı altında geniş bir genlik mertebesinde ortamlar oluşturdu. Doppler soğutma ve optiksel soğutma durumunda de Broglie dalga boyu, kimyasal bağ uzunluğundan daha uzun veya karşılaştırılabilir olur ve soğuk optiksel lazerin dalga boyu uzunluğuna yaklaşır. Burada dalga ve rölativistik etkiler beklenebilir. Örneğin rezonans, girişim ve aşırı mesafelerde etkileşme etkileri önemli olur. Souminen soğuk çarpışma bölgesini Doppler soğutma ve optiksel molasses soğutmaya uygun sıcaklık menzillerini 1mK ve 1 μ K arasında ifade etti [14]. Bu sıcaklık mertebesinde çoğu çarpışma konusu, atomların etkileşmelerine uygun biçimlenmesini sağlayacak bir veya daha fazla lazer alanına gerek duyar. Uyarılmış yarı-moleküler seviyeler yoğunlaşmada önemli rol oynaması ile 1 μ K aşağısında buharlaştırarak soğutma, Bose- Einstein yoğunlaşmayı gerçekleştirmek için önemli olur. De Broglie dalga boyları kritik yoğunlaşma yoğunluğunda, atomlar arası mesafeyle karşılaştırılabilir bir ölçüde genişler. Atomik türlerin kuantum

dejerene seviyeleri görünmeye başlar. Bu bölgede taban seviye çarpışmalar radyal hareket boyunca yer alır ve taban seviye dalga fonksiyonun faz kayması veya saçılma mesafesi ile karakterize edilir. Atomik öteleme enerjisi, kinetik enerjisinin aşağısında saçılan fotondan manyetik bobinler aracılığı ile bir atoma transfer edilir. Lazerler, atomik soğumada ($\sim \mu\text{K}$ aşağısında) daha fazla rol oynamaz ve buharlaştırarak soğutma ile $1\mu\text{K} \rightarrow 0$ sıcaklık menziline çarpışmalar olur. Bu çarpışmalar aşırı-soğuk (ultracold) olarak isimlendirilir [15].



Şekil 2.1. Atomik ortam için de Broglie dalga boyuna karşılık, sıcaklık boyunca değişik fiziksel olayların şematik gösterimi. a_0 terimi H atomunun Bohr yarıçapını temsil eder

1970’li yıllarda atomik ve kimyasal fizikteki araştırmacılar lazeri, elastik olmayan çarpışmaları veya kimyasal reaksiyonları kontrol etmede kullandılar. Ancak CO₂ lazerlerin, kızılötesi bölgesinde moleküllerin ısıtması istenmeyen sonuçtur. Bu sorunun aşılması 1970 li yıllarda pulslu boya lazerler geliştirilerek, spektrumun görünür bölgede ayarlanabilir olması ile kontrol edildi [8]. Bu sayede “radyoaktif çarpışmalar” önerildi. Buna göre moleküllerin elektronları, çekirdekten ziyade lazer ile etkileşir. İkinci nesil deneylerde optiksel kuvveti ortaya çıkarmak için büyük çaba gösterdiler. Atomun üzerinde “çoklu foton uyarılma” ve “uyarılmanın doğrusal olmaması” sağlanarak istenen kuvvet etkilerini ortaya çıkardı. Bu sayede kuvvet etkisinin gözlenmesi iki faktöre bağlıdır. Birincisi uygun bir sıcaklıkta Doppler genişlemesi, uygulanan optiksel alan modları ile etkileşen atom ve moleküllerin birkaç yüz kere çarpışmasına izin verir. İkinci olarak Optiksel alan, çarpışma boyunca atomik davranışı kuvvetli ağır kimyasal bağları etkileyerek değiştirir. Bunun için cm kare başına birkaç megavattan daha büyük güç birikimine ihtiyaç gerektirir. Bu işlemler için kullanılan atom veya moleküller nötr gaz, iyonize plazmaya hızlıca dönüştürülerek elde edilir. Bu dönüştürme işlemi optiksel olarak atom ve molekülleri parçalamaksızın lazer ile çarpışmasını kontrol etmek için gereklidir [16].

Çok sayıda klasik atomik çarpışma birkaç femto saniye (uyarılmış moleküller veya atomlar sürekli ışık yaymalarından önce gerekli nano saniye ile kıyaslandığında on kat kısa olur) sürmesine rağmen aşırı-düşük bölgede parçacıklar çok yavaşça hareket eder. Özetle bir çarpışma sayacının tamamlanması 100 lerce nano saniye alır. Uzun çarpışma süresi, iki etkileşen çift için dış radyasyon alanından enerji yutar eder veya sürekli ve kesikli işlemler ile enerjinin yayılmasını sağlar [8].

Kuantum istatistiksel etkiler, metalik ve yüksek sıcaklık süper iletkenler ve sıvı helyumun süper akışkanlığında gözlenir. Son yüzyılın önemli çalışmaları sayılan bu olayların atomik düzeylerinde çalışmak kesinlikle zordur. Çünkü parçacıklar yoğun ve ağır bir şekilde etkileşirler. Ancak zayıf etkileşen seyreltik gazların davranışı mikroskopik modeller ile alakalıdır. Bu gazın özelliklerinin gözlenmesi ve ölçülmesi

oldukça kolay ve iyi kontrol edilebilir olmasıdır. Seyreltik kuantum gazların ideal gazlara göre en önemli farkı ikili etkileşme yapmalarıdır. Bu yüzden aşırı-düşük sıcaklık çarpışmaları konusu çoğu araştırmaların gelişmesinde doğal bir kaynak olmuştur. Çarpışmalar Böse-Einstein yoğunlaşmasının iki kritik görünümünü tanımlar. Birinci olarak BEC'nin elde edilmesi için gerekli buharlaştırma durumunda çarpışma oranı elastik çarpışma tesir kesitine bağlı, s-dalga saçılma mesafesinin karesi ile orantılı olmasıdır. Diğer saçılma mesafesinin işareti yoğunlaşmanın kararlılığını gösterir. Pozitif saçılma mesafesi BEC'nin gelişmesinin sonuçlanması ile kararlı BEC olarak tarif edilir. Negatif saçılma mesafesi kararlı olmayan durumu gösterir. Fakat sınırlı sayıda atomun yoğunlaşma durumunda olduğunu tarif eder. 'Semptotik' soğutma (iki atomik tür aynı anda soğutulur) ile yoğunlaşmayı ortaya çıkarma yeteneği ayrıca çarpışan çiftlerin farklı seveleri arasında elastik ve elastik olmayan (kayıp ve ısınma) oran sabitlerine bağlıdır. Biçimlenen Bose atom yoğunlaşmasının optiksel kaviteye benzer özellikler taşıdığına atomlar çarpışma boyunca etkileşirler. Bu çarpışmalar Bose-Einstein tuzak veya biçimlenen kavite ile amaçları çakışan herhangi bir atom lazerin koherenz uzunluğunu sınırlar [8]. Diğer önemli bir nokta optiksel kontrol ile ilgilidir. Saçılma mesafesinin işareti ve genliği, taban seviye potansiyellerin ayrıntılarına bağlıdır. Etkileşme potansiyelleri dış optiksel, manyetik veya radyo frekans alanları ile çarpışma oranlarını arttırmak için kuantum gazın özelliklerini taşır. Sonuç olarak seyreltik gazın özellikleri kayıp işlemlerini sınırlar.

2.1. Soğuk Saçılma Teorisinin Temel Kavramları

Öncelikle temel kavramların birkaç özelliği verilmeli ve bu amaçla iki taban seviye, atomların çarpışmasını tanımlamak için gerekir [8]. Başlangıç olarak iki ayırt edilemez parçacığın çarpışmasını düşünürüz. Bu parçacıklar a ve b ile etiketlenir ve ayrıca $V_g(R)$ etkileşme potansiyeline ve k bağlı momentuma sahip olsun. Burada R , a ve b'ye bağlı vektördür. Çarpışma enerjisi $E = \hbar^2 k^2 / 2\mu \ll 1$ ile verilir. Burada μ iki parçacığın indirgenmiş kütledir. Eğer parçacıklar arası etkileşme olmazsa $V_g = 0$, $|O_a\rangle$ ve $|O_b\rangle$ iç seviyeleri arasında iki parçacığın bağlı hareketini tanımlayan dalga fonksiyonu,

$$\Psi_g^+(R) = e^{ikR} |O_a O_b > \quad (2.1)$$

ile verilir. Eđer etkileşme potansiyeli sıfır deęilse parçacıklar arasında çarpışma, saçılma dalgası ile verilir ve geniş R’de potansiyel menzili dışında dalga fonksiyonu,

$$\Psi_g^+(R) \sim \left\{ e^{ikR} + \frac{e^{ikR}}{R} f(E, \hat{k}, \hat{k}_s) \right\} |O_a O_b > \quad (2.2)$$

denklemini ile temsil edilir. Burada $\hat{k}$, k yönünde birim vektördür ve $\hat{k}_s$, $f(E, \hat{k}, \hat{k}_s)$ genlięi ile saçılma dalga yönünde verilen birim vektördür. Çarpışmanın bütün etkileri tesir kesiti $\sigma(E)$ ile tanımlanır. Birim gaz hücresinde bütün yönler mümkündür. Tesir kesiti,

$$\sigma(E) = \int_{4\pi} \frac{d\hat{k}}{4\pi} \int_{4\pi} d\hat{k} |f(E, \hat{k}, \hat{k}_s)|^2, \quad (2.3)$$

bütün saçılma yönlerinde genlięin karesi toplanarak bulunur. Burada f uzunluk ve tesir kesiti ise “uzunluęun² =alan” birimine sahiptir. Eş. 2.3, küresel simetrik potansiyel için uygulanır. Genlięin f , $\hat{k}$ ve $\hat{k}_s$ arasında Θ açısında baęlı tesir kesiti,

$$\sigma(E) = 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin(\theta) |f(E, \theta)|^2 \quad (2.4)$$

ile verilir[8]. Soęuk saçılma teorisinde amaç, iki atom arasında etkileşme potansiyeli ile saçılma genlięini ve tesir kesitini hesaplamaktır. Pratik hesaplama için problemi ortaya koymadaki ilk adım düzlem dalğanın kısmı dalga ifadesini türetmek olacaktır:

$$e^{ikR} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l i^l Y_{lm}^*(\hat{k}) Y_{lm}(\hat{k}_s) j_l(kR). \quad (2.5)$$

Burada Y_{lm} küresel harmoniklerdir ve j_l bessel fonksiyonudur ve $R \rightarrow \infty$ iken

$$j_l(kR) \sim \frac{\sin[kR - (\pi/2)l]}{kR} \quad (2.6)$$

biçimine sahiptir. Geniş R’de toplam dalga fonksiyonu kısmı dalga serisinde verilir:

$$\psi_g^+(R) = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l i^l Y_{lm}^*(\hat{k}) Y_{lm}(\hat{k}_s) x \frac{F_l^+(E, R)}{R} |O_a O_b\rangle. \quad (2.7)$$

Burada $F_l^+(E, R)$ Schrödinger denklemin çözümlerinden elde edilir,

$$\frac{d^2 F_l^+(E, R)}{dR^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E - V_g(R) + \frac{\hbar l(l+1)}{2\mu R^2} \right) F_l^+(E, R) = 0. \quad (2.8)$$

$R \rightarrow \infty$ giderken $F_l^+(E, R)$ ’de sınır şartları yerine konularak asimptotik dalga fonksiyonu,

$$\frac{F_l^+(E, R)}{R} \sim \sin\left(kR - \frac{\pi}{2}l + \eta_l\right) \frac{e^{i\eta_l}}{kR} \quad (2.9)$$

$$\sim j_l(kR) + \frac{i}{2} \frac{e^{i[kR - (\pi/2)l]}}{kR} T_l(E) \quad (2.10)$$

ifadesine sahip olur. Burada η_l , etkileşme potansiyeli ile ortaya çıkan faz kaymasıdır ve $T_l(E) = 1 - e^{2i\eta_l}$ T-matris elementidir ve saçılan dalğanın genliğini tanımlar:

$$f(E, \hat{k}, \hat{k}_s) = \frac{2\pi i}{k} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l i^l Y_{lm}^*(\hat{k}) Y_{lm}(\hat{k}_s) T_l(E). \quad (2.11)$$

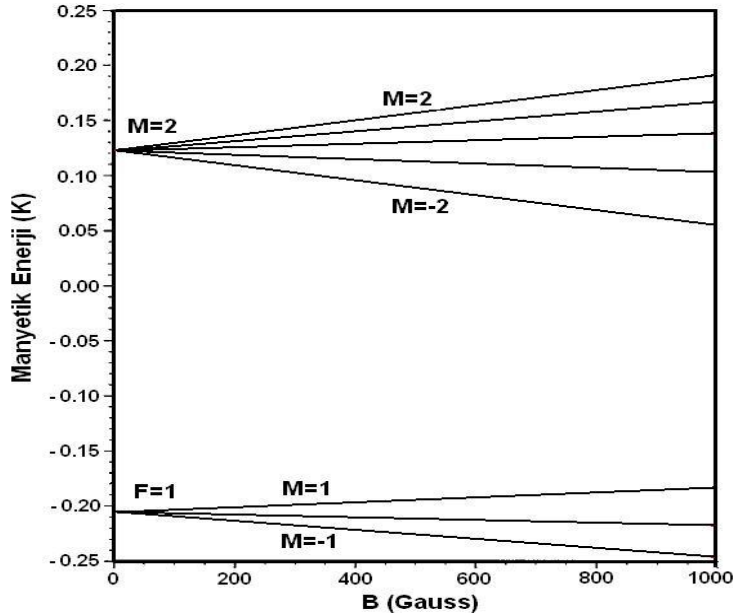
Eş. 2.4'ün en basit biçimi kullanarak tesir kesiti,

$$\sigma(E) = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |T_l(E)|^2 \quad (2.12)$$

$$= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \eta_l \quad (2.13)$$

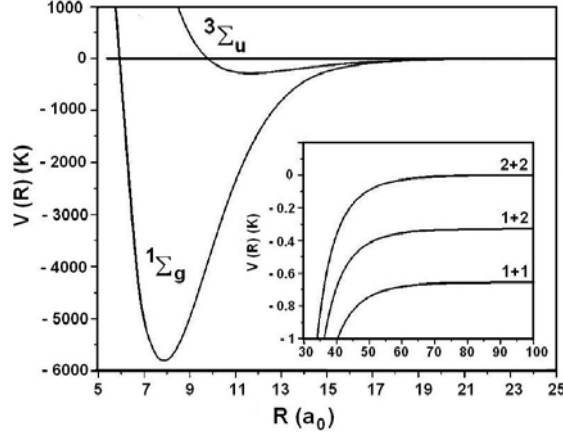
olur. Tesir kesiti benzer bir yarı-klasik yorumlanmaya sahiptir: Eğer etkileşme potansiyeli $V_g(R)$ sıfır olursa, parçacık yörüngesi $R \times p = bp$ bağlı açısal momentum ile düz bir hat çizer. Burada p doğrusal momentum ve b etki parametresidir. Eğer açısal momentum dikkate alınır $bp = \hbar \sqrt{l(l+1)} \approx \hbar(l+1/2)$ olur ve b , Eş. 2.8'de $\hbar^2 l(l+1)/(2\mu R^2)$ itici merkez potansiyelin klasik dönüm noktasıdır. Tesir kesitinin yarı-klasik formu Eş. 2.4'e kıyasla ve alan biriminde;

$$\sigma(E) = 2\pi \int_0^{\infty} b P(b, E) db \quad (2.14)$$



Şekil 2.2. Manyetik alanın büyüklüğüne bağlı ^{87}Rb atomun taban aşırı ince düzeyleri [8] ve her seviyenin Zeeman yarılması

ile verilir [8]. Burada $P(b, E) = |T_l(E)|^2$ dir. Soğuk çarpışmaların en önemli özelliği az sayıda kısmi-dalganın tesir kesitine katkıda bulunmasıdır.



Şekil 2.3. Rb_2 molekülün taban seviye potansiyel enerji eğrileri [8]. İç şekil $F_a + F_b = 1+1, 1+2$, ve $2+2$ aşırı ince düzeyli atomların uzun menzillerinin genişletilmesini gösterir

Eş. 2.13 ile tanımlanan tesir kesiti elastik saçılmayı temsil eder. Bu durumda parçacıkların iç enerjileri değişmez ve bağıl kinetik enerji (E) çarpışmadan önce ve sonra aynıdır. Genelde atomlar seyreltik gazda elektronik yapılarına ve aşırı ince yapılarına göre sıfır olmayan iç açısal momentumlara sahip olur. Serbest parçacık durumunda bu iç seviyeler toplam açısal momentum ve kuantize uzayda M projeksiyon operatörü ile karakterize edilir. Çoğu zaman dış bir alan (örneğin manyetik, radyo veya optiksel elektromanyetik alan) soğuk çarpışma deneylerinde uygulanır ve iç F M seviyeleri bu dış uygulanan alanlar ile değiştirilebilir. Taban seviyede ve sıfır olmayan çekirdek spinine (I) sahip hidrojen alkali atomlar gibi türler $F = I + 1/2$ ve $F = I - 1/2$ ile iki aşırı bileşene sahip olur. Şekil 2.2, taban sevide ^{87}Rb ($I=3/2$) atomun iki $F = 1$ ve $F = 2$ aşırı ince bileşenlerinin Zeeman yarılmalarını göstermektedir. Şekil 2.3 ise iki etkileşen Rb atomun için taban sevide etkileşme potansiyelini gösterir. Atomik seviyeler $i = a, b$ atomları için $|\alpha_i\rangle$ ile temsil edilirse çarpışma işlemleri $|\alpha_a\rangle|\alpha_b\rangle$ seviyesinden $|\alpha'_a\rangle|\alpha'_b\rangle$ seviyesine geçişi temsil eder bu durumda geçiş genliği $f(E, \hat{k}, \hat{k}_s \alpha_a \alpha_b \rightarrow \alpha'_a \alpha'_b)$ ve T-matris elementi

$T(E, \alpha_a \alpha_b \rightarrow \alpha'_a \alpha'_b)$ olur. T-matris ayrıca ilk ve son kısmı dalga ile belirlenir: $T(E, \alpha_a \alpha_b l m \rightarrow \alpha'_a \alpha'_b l' m')$. Üç ayrı fiziksel eksen vardır ve bu eksenler sayesinde saçılma genlikleri tanımlanır. Uzayda yerleşmiş eksenler M_a ve M_b uzay projeksiyon sayıları ve yaklaşık $\hat{k}$ nın ve $\hat{k}_s$ 'nin asimptotik yönlerini belirler. Lazer deneylerinde bu üç eksen kontrol edilir. Soğuk atom çarpışma deneyleri homojen gazda yönetilir. Burada $\hat{k}$ ve $\hat{k}_s$ seçilir ve daha sonra $T(E, \alpha_a \alpha_b \rightarrow \alpha'_a \alpha'_b)$ için Eş. 2.12'deki gibi tanımlanan tesir kesiti ifadesi kullanılır. Özellikle BEC'de iyi tanımlanan yerel uzay yerleşimli eksene sahip ve M_a ve M_b 'nin özel değerleri seçilir. Fakat çalışmaların çoğu M_a ve M_b ye bağlı polarize olmayan gazlar için tanımlanır [17].

Tesir kesitlerinin yerine çoğu zaman çarpışma işlemleri için oran sabiti verilir [8]. Oran sabiti doğrudan birim hacimde birim zamanda oluşan çarpışma olayların sayısı olarak tanımlanır. Oran sabiti için $\alpha_a + \alpha_b \rightarrow \alpha'_a + \alpha'_b$ reaksiyonu düşünelim. Burada kuantum sayılarının tamamının farklı olması gerekir. Eğer hücredeki α_i türlerin yoğunluğu n_{α_i} ise çarpışma olayına göre değişik türlerin yoğunluğunun değişme oranı,

$$\frac{dn_{\alpha_a}}{dt} + \frac{dn_{\alpha_b}}{dt} = -\frac{dn_{\alpha'_a}}{dt} - \frac{dn_{\alpha'_b}}{dt} = K(T, \alpha_a \alpha_b \rightarrow \alpha'_a \alpha'_b) n_{\alpha_a} n_{\alpha_b} \quad (2.15)$$

eşitliği ile verilir. Bu eşitlikte Oran sabiti $K(T, \alpha_a \alpha_b \rightarrow \alpha'_a \alpha'_b)$,

$$K(T, \alpha_a \alpha_b \rightarrow \alpha'_a \alpha'_b) = \langle \sigma(E, \alpha_a \alpha_b \rightarrow \alpha'_a \alpha'_b) v \rangle \quad (2.16)$$

tesir kesiti eşitliğine bağlıdır. Burada parantezler bağlı çarpışma hızlarının v ortalama dağılımı gösterir.

Elastik ve elastik olmayan çarpışmaları gözlemek BEC için önemlidir. Yukarıda bahsedildiği gibi elastik çarpışma her bir atomun kuantum seviyeleri α_a, α_b değişmeden kalmasına karşın yalnız bu atomların momentumları değişir. Bu çarpışmalara BEC durumunda termalizasyon işlemi yardım eder. Bu çarpışmalar yoğun olmasından dolayı iyi çarpışmalar olarak adlandırılır. Bu şekilde tuzaklanan seviyeler bozulmaz ve ayrıca buharlaştırarak soğutma için gereklidir. Elastik olmayan çarpışma durumunda bu iki kuantum sayısı bir veya daha fazla çarpışma ile değişir. Çoğu soğuk çarpışma çalışmaları elastik çarpışmalar yerine elastik olmayan durumla ilgilidir. Bunun sonucu olarak sıcak atom, tuzaklanmayan türler veya iyonik türler ortaya çıkar. Elastik ve elastik olmayan çarpışmaların eşik özellikleri çok farklıdır.

Farklı ve özdeş atomik türlerin çarpışmaları arasındaki temel farklılık, özdeş parçacıkların değişebilirliği ile orantılı olarak dalga fonksiyonunun simetrik olmasıdır. Farklı atomik türleri için bu simetrikleştirme etkisi gözlenmez. Simetrikleştirmenin, teoride değişik noktalarda faktör çarpanların belirlenmesi ve belirli seviyelerin dışarılanması (bu seviyeler simetrikleştirmeye karşı durur) gibi etkileri vardır. Bu şekilde sınırlamalar iki atom spektroskopisinde iyi bilinir [18]. Özdeş atomların çarpışmalarında iki kuantum sayısı eşit ise $\alpha_a = \alpha_b$ çift kısmi dalgalar saçılmaya katkıda bulunur ve bu parçacıklar boson olarak bilinir. Eğer tek kısmi dalgalar saçılmaya katkıda bulunuyorsa parçacıklar fermiyondur. Eğer iki kuantum sayısı özdeş değil ise $\alpha_a \neq \alpha_b$ her iki durumda tek ve çift kısmi dalgalar saçılmaya katkıda bulunur. Bu simetrikleştirmenin etkisi son zamanlarda soğuk atom ve molekülleri araştırmak için geliştirilen Foto-birleşim spektromeride gözlemlenir. Örneğin ölçülen çizgi sayısının yarısı çift spin polarize gazda gözlenmesi bütün atomların aynı kuantum seviyesinde olduğunu söyler. Spin polarize olmayan durumda farklı kuantum sayıların dağılımları gözlemlenir [18].

Stoof özdeş parçacıkların değiş tokuş simetrisini dikkate alan teoremin nasıl değişeceğinin iyi bir tartışmasını verdi [8]. Onlar temelde ayrı atomları belirleyen seviyeleri parçacık değişimi ile orantılı simetrikleştirerek tanımladılar. Bu seviyeler

saçılma mesafesinin sözde kanal sevipleri denilmektedir. T-matris elementi ve sonuç oran sabiti geleneksel olarak böyle simetrik seviyelerini arasında geçişler için hesaplanır. Sonuç oran sabitleri [8],

$$K(\{\gamma\delta\} \rightarrow \{\alpha\gamma\}) = \left\langle \frac{\pi\hbar}{\mu k} \sum_{l'm'} \sum_{lm} |T(E, \{\gamma\delta\}l'm', \{\alpha\beta\}lm)|^2 \right\rangle \quad (2.17)$$

ile verilir. Burada parantez $\{..\}$ simetrikleştirme sevipleri işaret eder ve T-matris elementi üniter S matrisi ile $T=1-S$ bağıntısı ile birbirine bağlıdır. Buna göre çarpışma oranları;

$$\frac{dn_\alpha}{dt} = \sum_\beta \sum_{\{\gamma\delta\}} (1 + \delta_{\alpha\beta}) x [K(\gamma\delta \rightarrow \alpha\beta) n_\gamma n_\delta - K(\alpha\beta \rightarrow \delta\gamma) n_\alpha n_\beta] \quad (2.18)$$

denklemini ile verilir [8]. Bu denklem ayrıca özdeş kuantum seviplerde özdeş parçacıkların elastik saçılma durumları için de geçerlidir. Ayrıca Gao, 1997 de soğuk atom çarpışmalarını dikkate alan formal bir teori tanımladı [19].

2.2. $E \rightarrow 0$ Limitinde Kuantum Özellikler

Soğuk ve aşırı soğuk çarpışmalar oda sıcaklığındaki çarpışmalardan oldukça farklı özelliklere sahiptir. Bunun nedeni zaman ve uzaklığı içeren farklı skalalardan kaynaklanmaktadır. Uzun çarpışma zamanının etkileri bilinen faz geçişlerine sebep olur. Fakat BEC kısa zaman etkisi olarak ortaya çıkar. Bethe, 1995’de soğuk nötral saçılması için de Broglie dalga boyunun potansiyel menziline daha büyük olduğu durumda çarpışma tesir kesitinin temel değişimleri tanımladı [20]. Böyle eşik etkileri çok düşük ($\ll 1K$) sıcaklıklarda nötral atom çarpışmalarında açıkça görülür [21, 22]. Bu durumda bu etkiler lazer soğutma ve buharlaştırarak soğutmada önemli rol oynar. Şekil 1.1’de de-Broglie dalga boyunun (λ) sıcaklığa bağlı değişimi görülmektedir. Lazer soğutma menziline sonucunda yüksek sıcaklıklarda λ ’nın $100 a_0$ mertebeye sahip olurken buharlaştırarak soğumanın sonunda $\lambda > 1 \mu m$ ($20\,000 a_0$) olur. Bu

uzunluklar kimyasal bağ uzunluklarından çok geniştir. Dalga fonksiyonu soğuk çarpışmanın karakteristik davranışını belirler. Burada çarpışma özellikleri R^{-n} uzun menzilli potansiyelin ters kuvvet derecesine(n) bağlı olarak $k \rightarrow 0$ limitinde çarpışma momentumuna $k = \sqrt{2\mu E} = 2\pi / \lambda$ göre skala edilir.

Elastik saçılma durumunda Eş. 2.9 ve Eş. 2.13'deki faz kaymaları $k \rightarrow 0$ limitinde aşağıdaki özelliklere sahiptir [23]: Eğer $2l < n-3$ ise;

$$\lim_{k \rightarrow 0} k^{2l+1} \cot \eta_l = -\frac{1}{a_l} \quad (2.19)$$

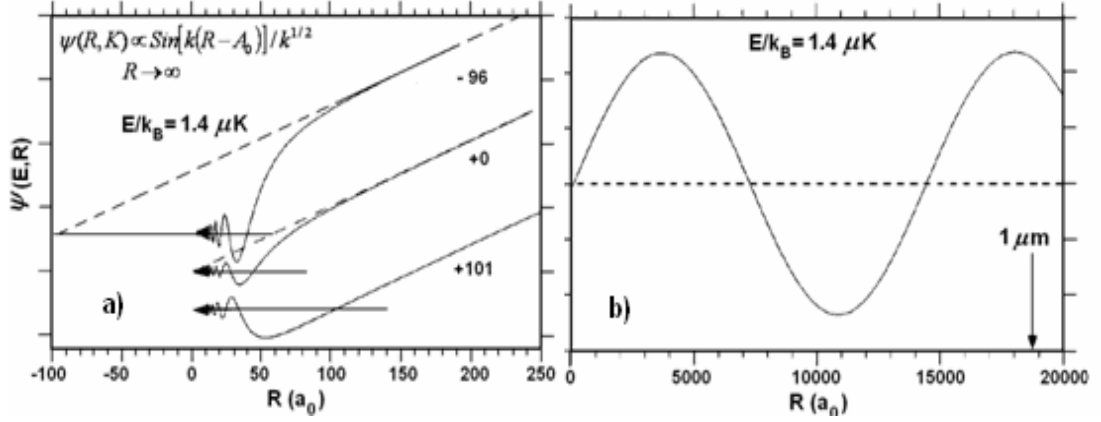
olur. Burada a_l sabittir. Halbuki $2l > n-3$ ise;

$$\lim_{k \rightarrow 0} k^{n-2} \cot \eta_l = sbt \quad (2.20)$$

olur. Taban seviyedeki nötral atomlar için faz kayması bütün $l \geq 1$ için k^3 'den daha hızlı sıfır olur. Tesir kesitine bütün katkılar $l=0$ ve s-dalgasından gelen katkılar hariç k yeterince küçük olduğu zaman sıfır olur. $k \rightarrow 0$ limitinde faz kayması $-kA_0$ olarak değiştiğinde özdeş parçacıklar için Eş. 2.13'den elastik saçılma tesir kesiti:

$$\sigma(E) \rightarrow 8\pi a_0^2 \quad (2.21)$$

olur. Burada "8" faktörü yerine özdeş parçacık simetrisine göre "4" olur. Bu yüzden elastik saçılma için tesir kesiti düşük enerji limitinde sabit olur. a_0 niceliği saçılma mesafesi olarak tanımlanır ve BEC için çok önemli parametredir. Ayrıca elastik saçılma için oran sabiti $K = \langle \sigma v \rangle$ düşük sıcaklık mertebesinde $T^{1/2}$ olarak sıfıra yaklaşır.



Şekil 2. 4. a) Pozitif, sıfır ve negatif üç farklı potansiyel için kısa menzilli dalga fonksiyonunun genişletilmesini gösterir. b) $1\mu\text{m}$ 'lik skala da uzun menzilde geniş de Broglie dalga fonksiyonunu (Potansiyellere karşılık elde edilen saçılma mesafeleri şekil üzerinde verilir)

Şekil 2.4, sodyum atom çarpışmaların kütle ve van der Waals sabiti C_6 bağlı model potansiyel için çok düşük çarpışma enerjisinde dalga fonksiyonunun özelliklerini açıklar [8]. Sol panel negatif, sıfır ve pozitif üç farklı potansiyel için kısa-menzilli dalga fonksiyonunun genişlemesini gösterir. Sağ panel $1\mu\text{m}$ skalada geniş menzilde dalga fonksiyonunu gösterir. $R = a_0$ 'da uzun dalga boyu asimptotik sinüs dalgasının kaynağının etki noktası olarak saçılma mesafesinin fiziksel yorumlanmasını gösterir. Burada uzun menzilli dalga fonksiyonu, $\sin[k(R - a_0)]$ 'ra orantılıdır.

Elastik olmayan çarpışmalar elastik çarpışmalardan ziyade çok farklı eşik özelliklere sahip. Çıkış kanalda ayrı atomların iç enerjisi giriş kanalından çok daha düşüktür. Böylece çarpışma sonucu enerji açığa çıkar. Geçiş matris elementi,

$$T(E) \propto k^{l+1/2} \quad (2.22)$$

olarak değişir [20, 24, 21]. Burada l giriş kanalının kısmi dalga sayısıdır. Eş. 2.12'deki eşitlik kullanılarak tesir kesiti bütün $l > 0$ için k kadar hızlı sifıra gider fakat s-dalgalar için $1/k$ olarak değişir. Bu değişim Bethe denklemi olarak bilinir ve çekirdek fiziğinde iyi bilinir [20]. Ortaya çıkan enerji elastik olmayan çarpışma için

tesir kesiti $k \rightarrow 0$ limitinde yeterince geniş olmasına rağmen, oran sabiti sınırlı kalır ve sıfır olmayan bir sabite gider. Cote ve arkadaşları 1996'da soğuk elastik olmayan çarpışmaların kuantum suppression'u ileri sürdüler ve bağıl olarak yarı-klasik işleme dayalı fiziksel bir işlemdir. Aşırı düşük sıcaklıklarda atom asla çekici kuyu içine giremez yerine bir etkileşme sonucu atom uzun menzile yansıtılır ve atom yüzey çarpışmasının olmasında olumsuz bir etkisi vardır. Bu durum da tam olarak oran sabiti şaşırtıcı olarak sıfıra yakın sıcaklıkta geniş bir değere eşit olur [25].

2.3. Taban Seviye Çarpışmaları

Bu bölümde lazer alanında tuzaklanmış soğuk atom çarpışmaları özetlendi [8]. Böyle çarpışmalar optiksel metotlarla tuzaklanan atomlar için önemli bir konu ve tarihsel olarak lazer soğutma gruplarının çoğunun dikkatini çekti ancak lazer alanının yokluğunda soğuk nötral atomlar taban seviye çarpışmaları ile ilgi çekicidir. Açıkçası bu alandaki ilginin çoğu çift spin polarize hidrojenin tuzaklanarak BEC'sinin başarılması konusudur. Son zamanlarda çok daha ilgi çekici alkali sistemlerde BEC'nin başarılması veya atomik saatte basınç kaymaları örnekleri olarak yeni bir alana kaydı. ^{87}Rb [28], ^{25}Na [29] ve ^7Li [30] alkali atomların BEC'sini gerçekleştirilmesinde soğuk bölgede çarpışmaları literatürde verildi. Çarpışmalar yoğunlaşmaların ve yoğunlaşma dinamiğinin bütün gösterimleri için önemlidir. Buharlaştırarak soğutma atomların termalize edilebilmesi için elastik çarpışmalara bağlı yoğunlaşmanın biçimlenmesine yol açar. Yoğunlaşmanın yüksek derecede başarılması için ortalama alan teorisi, atom etkileşme enerjisini parametrize etmek için s-dalga saçılma mesafesinin genliğine ve işaretine bağlıdır. Bu etkileşme enerjisi ortalama alan dalga fonksiyonunu tanımlar. Buharlaştırarak soğutma başarısı ve yoğunlaşmanın uzun ömürlü olması elastik olmayan çarpışma oranlarının azaltılmasına bağlıdır. Bu çarpışma oranları, yoğunlaşmanın bozulma esnasında tuzaktan atomların kaçması olayıdır. Bu yüzden taban seviye elastik ve elastik olmayan oranlar ve manyetik veya elektromanyetik alanlara bağımlılığı önemli derecede güncel bir konudur.

Taban seviye çarpışmaları literatürde geniş bir özet olacak kadar ayrıntıya sahiptir. Taban seviye çarpışmalarını önemini anlatmak için kısaca sonraki paragraflarda değinildi. İlk olarak lazer alanında hidrojen atomu için bir inceleme yapıldı. İkinci olarak ise BEC’de çarpışmaların rolü araştırıldı.

Atomik çarpışmaların kuantum özellikleri iyi bilinir. Burada atomların de-Broglie dalga boyu potansiyel menzili ile karşılaştırıldığında geniş olur. Bu kısımda 1K’dan daha az sıcaklıklarda iki nötral atomun çarpışmasının özel durumuna dikkat çekeceğiz. Bu konudaki ilk çalışmalar 1980’lerde spin-polarize hidrojenin manyetik olarak tuzaklanması ile BEC yoğunlaşmalarının başarımla olasılığı [31] ve cryojenik hidrojen mazerin paralel olmayan frekans kararlılığın önerileri [32] üzerine olmuştur. Taban seviye hidrojen atomu ^2S elektronik seviyeye ve çekirdek spini $1/2$ kuantum sayısına sahip olur. Elektron ve çekirdek spin çiftlenimleri, taban seviyenin iyi bilinen $F=0$ ve $F=1$ aşırı ince düzeylerine geçişine izin verir. Bu iki düzey arasında geçiş hidrojen mazer geçişidir ve çift polarize düzeyi $F=1$, $M=1$ aynı eksen boyunca maksimum projeksiyonu sahip her iki elektron ve çekirdek spini ile mümkün ve bunun için BEC manyetik atom tuzağında mümkündür. Her iki hidrojen mazer ve BEC konusu ağır bir şekilde taban seviye hidrojen atomlarının çarpışmaları ile etkilenir. Çarpışmalar mazer geçiş frekansında basınca bağlı frekans kaymalarına sebep olur. Deneylerde bu mazer geçiş frekansının bilinmesi ve kontrol edilmesi gerekir [33]. Bu olaylar spin-polarize hidrojen atomlarının bozulmasına “rahatlamalarına” sebep olur. Bu durum BEC’nin gerçekleşmesini engeller [34].

Bu gelişmeler atomik hidrojen ve izotopların düşük-sıcaklık çarpışma özellikleri için 1980’lerin teorik hesaplamaları ile başladı. Önceki çalışmalar [35] elastik olmayan değiş tokuş çarpışmaların anlaşılması için temel bir çalışmayla başladı. Bu çalışma iki hidrojen atomunun $F=1$ seviyelerine geçişleridir. Daha sonra bir veya iki atom arasında $F=0$ seviyesinde çarpışmaları verildi. Berlinsky, 1980’de spin değiş tokuş tesir kesiti ve aşırı ince geçişin çarpışma frekans kayması düşük sıcaklık limitine genişletti [36]. Bu önceki hesaplamalar yüksek sıcaklık teorisinin genişletilmesine dayanmaktadır. Bu teori aynı atomların aşırı ince yapıyı içermeyen yalnız taban

seviye moleküllerin $^1\Sigma_g$ ve $^3\Sigma_u$ potansiyellerin faz kayması olarak bilinir. Bu seviyelerde atomik çarpışmalar için uygulanan kuantum mekanik teori, aşırı ince yapı ile çift-kanallı Schrödinger denklemin nümeriksel çözüme dayanır. Eindhoven grubu tarafından ortaya atılan bu çözüme çifttenim metodu olarak bilinir ve hidrojen mazerde frekans kaymaları [37] ve manyetik tuzakta çift spin polarize hidrojenin rahatlamasını [38] kapsar. Kapalı çiftlenim metodu güçlü bir nümeriksel metottur ve taban seviye çarpışmalarda kuantize hesaplamalar ve karışık türler için kullanılır. Gao tarafından 1997'de soğuk çarpışmaların çoklu kanal saçılma teorisi elde etti [19].

Hidrojenin atomunun dışında diğer türlerin çarpışmaları araştırıldı. Uang ve Stwalley 1980'de soğuk spin-polarize atom gazında döteryum rolünü belirlemek için soğuk manyetik tuzaklarda hidrojen ve döteryumun çarpışmalarını incelediler [39]. Tiesinga 1990'da ve Tiesinga ve Crampton 1993'de cryojenik döteryum maserde frekans kaymalarını incelediler [40]. Jamieson 1996'da hidrojen 1S-2S seviyelerinde iki foton geçişi için çarpışma frekans kaymaları hesapladı [41]. Tiesinga 1991'de çift spin-polarize Na için rahatlama oranı sabitinin, spin-polarize hidrojenen yaklaşık olarak on kat daha büyük olduğunu hesapladı [42]. Gibble ve Chu 1992'de yüksek-hassas atomik saatlerde nötral atomların kullanımı tartışılar ve daha sonraları 1993'de bir sezyum kaynağında geniş çarpışma frekans kaymasını ölçtüler [43]. Verhaar 1993'de diğer soğuk çarpışma özellikleri bu saat kayma ölçümlerinden bulunabileceğini araştırdı [44]. Bu çalışmalar çift spin polarize ^{133}Cs atomunun büyük bir olasılıkla geniş negatif saçılma mesafesine sahip olduğunu ortaya koydu. Kokkelmans ve arkadaşları 1997'de sezyumdan ziyade en iyi performansı sağlayan rubidyum atomik saat olabileceğini önerisi için iki rubidyumun izotopu için kesin çarpışma hesaplarını kullandılar [45]. Gibble, Chang ve Legere 1995'de s- dalga saçılma tesir kesitini ve $T = 0.89\mu\text{K}$ sıcaklığında bir atomik kaynak deneyinde sezyum çarpışmalarında açısal dağılımı doğrudan ölçmeyi başardılar [46].

2.3.1. Bose-Einstein yoğuşması

Soğuk atom çarpışmalarını, çoğu zaman motive faktörlerinden biri BEC'nin başarılması olmuştur. BEC, faz uzay yoğunluğu yeterince geniş olduğu zaman veya de Broglie dalga boyu parçacıklar arası mesafeye genişletildiği zaman, özdeş boson gazında faz geçişi olmasıdır. Yoğuşma için [47]

$$n \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mKT} \right)^{3/2} > 2,612 \quad (2.23)$$

özel kriteri verilir. Burada n atom yoğunluğunu gösterir. Yoğuşmada çok cisimli sistemlerin singlet taban seviyeli atomların geniş bir sayısından oluşan makroskobik bir oluşumdur. Halbuki normal termal gazda çoğu momentum seviye çok küçük bir olasılıkla oluşur. BEC'nin başarılmasında yoğunluğunun yeterince geniş yapılması veya sıcaklığın Eş. 2.23'ü sağlayacak kadar düşük olması gerekir. Spin polarize hidrojen ile önceki çalışmalar geleneksel soğutma teknikleriyle yoğunluğu yeterince yüksek tutma amacı taşımaktadır. Maalesef bu şekilde yoğunluk arttığı zaman çarpışma ve yüzey oluşumları ile sebep olan kayıpların önüne geçilemedi. Alternatif bir yaklaşım duvarsız manyetik tuzaklar [48] ve buharlaştırarak soğutma kullanılarak çok daha düşük sıcaklıklara erişildi. Bu düşünce zararlı çarpışmaları önlemek için yoğunluğu yeterince düşük tutacaktı. İlk gösterimde alkali atomların tuzaklaşmasından 3 yıl sonra atomik hidrojen için BEC'nin başarılması 1998'de gerçekleştirildi [49].

Alkali atomlar için lazer ile soğutması bu atomlar için BEC'yi başarma hevesini ortaya koydu. Bu atomların hidrojene benzemesi çekirdek spinlerine göre iki aşırı ince seviye ile ^2S taban elektronik seviyeye sahiptir. Bütün alkali türler boson özelliği taşıyan tek çekirdek spini ile bir izotopa sahip hidrojenin aksine alkali alaşım $^3\Sigma_u$ seviyesine bağlı seviyeleri destekler. Ancak orta kararlı yoğuşma, düşük yoğunlukta üç boyutlu yeniden oluşma ile alaşım bağ seviyeleri yapmak için gerekli uzun zaman skalasına göre mümkündür. Geleneksel lazer soğutma metotları Eş.

2.23'den faz-uzay yoğunluk kriterinin sağlanmasından uzak genliğin çok büyük olduğunda yoğunluk ve sıcaklık şartlarını üretir. Buharlaştırarak soğutma BEC'ye erişmek için rutin işlem olarak görüldü. Bu yaklaşım özel bir başarıydı. 1995'de birkaç ay içerisinde üç grup tarafından BEC için gereken kuantum dejenere bölgeye eriştiler. Buharlaştırarak soğutulan gazda BEC'nin kesin bir gösterimini çift spin polarize ^{87}Rb için NIST/JILA grup tarafından bildirildi [28]. Daha sonra Rice üniversitesinde bir grup tarafından çift spin-polarize ^7Li için BEC gerçekleştirildi [30]. Takip eden deneylerde BEC, ^{23}Na için $F=1$, $M=-1$ aşırı ince seviyesinde MIT'de gösterildi [29]. ^7Li sistemi için BEC'nin çok daha açık gösterimi daha sonra Bradley [30] tarafından verildi. 1997'nin ortalarında en az üç grup ^{87}Rb ve ^{23}Na 'un BEC'leri başarmak için benzer buharlaştırarak soğutma ve tuzaklama düzenekleri kullandılar. BEC'yi başarmada geniş bir literatür ortaya çıktı. BEC'nin farklı konularında birkaç literatür özeti Burnett (1996), Cornell (1996) ve Townsend, Ketterle ve Stringari(1997) tarafından verildi [50].

Taban seviye çarpışmalar özelliklerin tanımlanmasında ve yoğunlaşmanın biçimlenmesinde kritik bir rol oynar. Yoğunlaşmanın biçimlenmesinde kritik bir adım buharlaştırarak soğutma işlemi ile kritik yoğunluk ve sıcaklığın başarılmasıdır. Bu işlemler ile sıcak atomlar çarpışmadan sonra tuzaktan çıkarken geriye kalanlar yeniden gazın termalize için daha düşük sıcaklıklara gider [51]. Elastik çarpışmalar buharlaştırarak soğutma için gereklidir. Yoğunlaşmanın kararlılığı ve özellikleri elastik saçılma mesafesinin işaretini ve genliğine bağlıdır. İki ve üç boyutlu elastik olmayan çarpışmalar parçalanma işlemine sebep olur. Bu işlem yoğunlaşmanın biçimlenme zamanını belirler. Bu yüzden bu çarpışmalar hidrojen atomu gibi alkali türler için çok ilginç olmakta ve çoğu deneysel ve teoriksel çalışmalara konu olmuştur.

Öncelikle buharlaştırma işleminde tuzaklama potansiyeli azalırken tuzaklanan atom gazları termalize etmek için elastik çarpışmalara ihtiyaç duyulur. Bu çarpışmalar iyi çarpışmalar olarak bilinir. Hidrojenden ziyade alkali türler için çok daha geniş mertebede tesir kesitlerine sahiptir. Buharlaştırma boyunca elastik olmayan çarpışmalar, tuzaklanan aşırı ince düzeyleri bozar. Sözde “kötü” çarpışmalar, elastik çarpışmaların oranından çok az oranda olur. İki tür çarpışmanın rolünü literatürde iyi

bilinen bir özet ile Ketterle ve Van Druten tarafından 1996'da buharlaştırarak soğutma üzerine verdi [52]. Alkali atomların buharlaştırarak soğutulması uzun zaman önce başarıldı. Tiesinga, Moerdijk, ve Verhaar, ve Stoof (1992) 1000 mertebede bir değere sahip “iyi” çarpışmaların “kötü” çarpışmalara oranı $F=4$, $M=4$ ve $F=3$, $M=-3$ seviyelerinde tuzaklanabilir olduğunu gösterdi [53]. Kesin hesaplamalar potansiyeldeki belirsizliliğe göre mümkün değil. Monroe 1993'de 30 ve 250 μK arasında bağımsız sıcaklıkta ve büyük bir değer için 30 μK 'ye yakın $F=3$, $M=-3$ seviyede elastik tesir kesitleri ölçmek için tuzaklanan atomların zamana bağlı rahatlamasını (relaxation) kullanarak saçılma mesafesi $46(12)a.u$ 'a karşılık gelen s-dalga çarpışmaları dikkate alarak $1,5(4) \times 10^{-12} \text{cm}^2$ olarak hesapladı [54]. Newbury, Myatt ve Wieman 1995'de benzer olarak $F=1$, $M=-1$ seviyeli ^{87}Rb için $88(21) a.u$ saçılma mesafesine karşılık tesir kesitleri $5,4(1,3) \times 10^{-12} \text{cm}^2$ olarak ölçtü [55]. Davis, Mewes ve soffe tarafından 1995'de $F=1$, $M=-1$ seviyeli ^{23}Na 'da termalizasyon üzerine deneysel ölçüm ile saçılma mesafesini $92(25) a.u$ olarak hesapladı [56]. 1997'lerde Arndt çift spin-polarize ^{133}Cs 'un $F=4$, $M=4$ seviyesinde termalizasyon deneyini ile saçılma mesafesini $>260 a.u$ geniş bir değer olarak elde etti [26]. Bunun yanında elastik tesir kesiti 5 ve 50 μK arasında s-dalga birim limiti $8\pi/k^2$ ile verilen daha üst bağ seviyesine yakındır. Bu deneysel çalışmaların tümü tesir kesiti konusu için yapıldı. Bu yüzden saçılma mesafesinin işaretini tanımlamak mümkün değildir. Velaar 1993'de ancak ^{133}Cs 'un $F=4$, $M=4$ için saçılması negatif olacağını hesapladı [44].

Yoğuşmayı derinden etkileyen çok cisimli hamiltoniyen denkleminde atom-atom etkileşmesinin etkisi, $T \rightarrow 0$ limitinde iki-boyutlu saçılma mesafesi terimlerinde parametrize edilir [57]. Enerji ifadesinde iki boyutlu T matrisin kullanımı tamamıyla geçerli bir yaklaşımdır [58]. Tam yoğuşmaların temel özelliklerini karakterize edilmesinde çok daha başarılı bulunan basit bir teori ortalama veya Hartree-Fock teorisine dayanır. Bu teoriye göre yoğuşma dalga fonksiyonu,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{tuzak}} + N U_0 |\Psi|^2 \right) \Psi = \mu \Psi \quad (2.24)$$

denkleminde tanımlanır [59]. Burada V_{tuzak} tuzaklama yoğunlaşmayı biçimler ve

$$U_0 = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a_0 \quad (2.25)$$

potansiyeli atom-atom etkileşme enerjisini temsil eder. Potansiyel s-dalga saçılma mesafesi ile orantılıdır. Ayrıca Eş. 2.24'te verilen μ kimyasal potansiyel, N atoma sahip yoğunlaşmaya daha fazla parçacık eklemek için ihtiyaç duyulan enerji olarak tarif edilir. Gross-Pitaevski denklemi veya doğrusal olmayan Schrödinger denklemi çok cisimli dalga fonksiyonu ($\Phi(1...N) = \prod_{i=1}^N \psi(i)$), her bir boson tarafından doldurulan singlet taban-seviye orbitalleri ile temsil edilir. Ayrıca dalga fonksiyonu, yoğunlaşmayı üreten faz geçişi için düzen parametresi olarak yorumlanır [59].

Atom etkileşmesinin etkisi, yoğunlaşma yoğunluğunu ve s-saçılma mesafesine bağlı olarak doğrusal olmayan Schrödinger denklemi ile verilir. Atom etkileşmesini içermeyen ideal bir gazda saçılma mesafesi ($a_0 = 0$) sıfır olur. Böyle bir ideal gazda, Eş. 2.24'te yoğunlaşma dalga fonksiyonu tam olarak tuzaklama potansiyelin taban seviyesinde olduğunu gösterir ve sıfır nokta hareketi olarak bilinir. İyi bir yaklaşım olan tipik alkali tuzaklar için sıfır nokta hareketi tipik olarak 50 den 1000Hz kadar bir frekanda ve $100 \mu m$ den birkaç μm 'ye kadar bir menzile sahip olur. Karşılaştırma için $T = 1 \mu K$ sıcaklıkta frekansın değeri $k_B T / \hbar = 20 kHz$ olarak hesaplanır. Denklemden atomlar yoğunlaşmaya eklendiğinde atomik etkileşme terimi yoğunlaşma dalga fonksiyonunu etkileyen baskın bir terim olur. Yoğunlaşmanın şekli ağır bir şekilde saçılma mesafesine, parçacık sayısına ve U_0 terimin büyüklüğüne bağlıdır.

Saçılma mesafesinin işareti burada kritiktir. Eğer a_0 pozitif ise çok daha fazla atomun yoğunlaşmaya eklendiğinde etkileşme enerjisi artar ve yoğunlaşma kararlıdır ve daha büyük genişleme olur. Thomas-Fermi yaklaşımı Eş. 2.24'te kinetik enerjiyi ihmal ederek yoğunlaşma yoğunluğunu verir,

$$n = N|\Psi|^2 = \frac{\mu_{kim} - V_{tuzak}}{U_0}. \quad (2.26)$$

Bu denklem tuzağın kenar etkileri haricinde kesin bir doğruluğu vardır. Burada $\mu_{kim} - V_{tuzak}$ sıfıra yaklaşır ve negatif olur. Bu denklem ayrıca ^{87}Rb 'un $F=2$, $M=2$ ve $F=1$, $M=-1$ ve ^{23}Na 'un $F=1$, $M=-1$ seviyesinde yoğunlaşmaları tanımlar. Bunların hepsi pozitif saçılma mesafesine eşit olur. Böyle türlerin yoğunlaşmaları 10^6 atomdan daha fazlası için yapılabilir. Diğer ifade ile saçılma mesafesi negatif ise ^7Li daki gibi tuzaktaki parçacık sayısı arttırıldığında Eş. 2.24'te etkileşme enerji terimi geniş bir değerde negatif olur. Dalga fonksiyonun sonucu olarak daha fazla atom yoğunlaşmaya eklendiğinde örneğin ^7Li yoğunlaşmasına yaklaşık 1000 atom katıldığında yoğunlaşma kararlılığını korur. Daha fazla atom yoğunlaşmaya eklendiğinde yoğunlaşma kararsız olur [60]. Negatif saçılma mesafesi ile bir yoğunlaşma düzgün olmayan homojen gazda mümkün değildir.

Gaz termalizasyon çalışması, saçılma mesafesinin işaretini tanımlayan elastik saçılma tesir kesitini ölçer bu işaret foto-birleşim spektroskopisinden tanımlanır. Bu spektroskopi taban seviye çarpışma dalga fonksiyonun şekline ve fazına duyarlıdır. Çoğu zaman foto-birleşim spektroskopisi saçılma mesafesinin genliğine odaklanır. Yoğunlaşma özelliklerinin gözlenmesi aynı zamanda saçılmanın işaretini tanımlar hatta saçılma mesafesinin genliği tuzaklanma potansiyeli kaldırıldığında yoğunlaşma denklemi belirlenerek bulunur. Bu yolla hem ^{87}Rb [61] ve ^{23}Na [62] yoğunlaşmaları için yapıldı. Bu şekilde saçılma mesafesinin genliği belirlenir. Foto-birleşim spektroskopisi tanımlanmasından önce saçılma mesafesinin genliği ve işareti spektroskopik olarak türetilen potansiyel kuyular ve uzun menzilli Van der Waals potansiyele dayalı potansiyeller tanımlanarak tahmin edilir. Alkali türler bu tahmin örneğin ^7Li [63] ve ^{23}Na [64] için sık yapılır. Ancak saçılma mesafesinin hassasiyeti foto-birleşim spektroskopisi ile belirlenmesi kadar çok kesin değildir. Boesten 1996'da ^{39}K ve ^{41}K 'ın eşik özelliklerini hesaplamak için sıcaklığa bağlı spektroskopi datayı kullandı [64].

BEC’de elastik olmayan çarpışmalar önemli bir rol oynar ve tuzaklanmış türlerin seviyesini değiştirir. Bu işlem tuzaklanmamış seviyeleri ortaya çıkarır. Aynı zaman da elastik olmayan işlemde kinetik enerji ortaya çıkararak ısınmasına sebep olur. Örneğin iki çift spin-polarize atom çarpışsrsa ve daha düşük aşırı ince seviyede bir ve iki atom üretilirse daha sonra aralarında eşit olarak paylaşacak atomlara taban seviye bir iki birim aşırı ince enerji verilir. Bu enerji ayrımı tipik olarak 100’lerce mK olduğunda atomlar birkaç mK veya daha azında atomları tutmak için dizayn edilen tuzaklardan kolayca kaçır. İyi çarpışmaların kötü çarpışmalara oranı birçok olayı motive edebilir. Böylece buharlaştırma iyi çalışır ve BEC’ye sonuç verir. Kötü çarpışmaların ortaya çıktığı bir durum çift spin polarize ^{133}Cs dir. Birkaç deneyde çift spin polarize ^{133}Cs atomunun bozulması için elastik olmayan oran sabiti Tiesinga, Moerdijk, Verhaar ve Stoof (1992) tarafından tahmin edilen değerden üç kat büyük bir genlikte bulundu [53, 65]. Dolayısı ile bu düzeyin buharlaştırarak soğutma imkansız olur. Leo 1998’de bu geniş elastik olmayan çarpışma oranını etkin spin-dipolar çift terimin ikinci mertebe spin artırımına göre olduğunu açıklar [27].

Üç boyutlu yeniden oluşumu içeren elastik olmayan çarpışmalar, yoğunlaşma ve yoğunlaşma biçimi için önemlidir. Çünkü bunlar ısınmaya sebep verdiği gibi kötü çarpışmalar buharlaştırarak soğutmayı etkileyebilir. Yoğunlaşmanın ömrü çarpışma işlemlerini tanımlar. Eğer vakum yeterince düşük değilse geri zemindeki sıcak gaz atom türleri tuzaklanan veya yoğunlaşan atomlar ile çarpışabilir. Bu yüzden atomlara momentum transfer edilir. Geri zemindeki gaz atomları tipik olarak 300K mertebesinde enerjilere sahip olduklarında soğuk atomlar tuzaktan atılması için yeterince enerji alır. Ayrıca birkaç tane atom yollanarak çarpışma çok az miktarda momentum transferi yapabilir. Fakat hala bu durum tuzaklanmış atomlar üretir. Bu ısınma kaynağın bilinmeyen işlemi olabilir. Bu sorun manyetik atom tuzaklarında gözlenmiştir [54]. Hatta vakum yeterince iyi bir seviyede ise tuzaklanmış türlerin arasında elastik olmayan çarpışmalar tuzaklanmış gaz veya yoğunlaşmaların ömrünü sınırlayabilir. Bozulma işlemi için Oran sabiti (k boyutlu çarpışmalarda) K_{in}^k ise tuzak ömrü $(K_{in}^k n^k)^{-1}$ olur. Bir yoğunlaşmada normal 10^{14}cm^{-3} atom yoğunluğu için

ikinci bir ömür iki boyutlu oran sabiti ($10^{-14} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$) veya üç boyutlu oran sabiti ($10^{-28} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$)’den kaynaklanır. Bu oran sabitler atomik türlere ve tuzaklanacak olan aşırı ince düzeyle çok bağlıdır. Tuzaklanma ve yoğunlaşma olduğunda aşırı ince seviyeleri görmek mümkün fakat bu durumda elastik olmayan oran sabitleri yeterince düşük olur.

3. METOT

3.1. Atomik Özellikler ve Etkileşme Potansiyeli

3.1.1. Atomik yapı

Bose parçacıkların toplam spini tam sayı olmalıdır ve bu yüzden fermiyonlar ile birlikte bulunan bir boson bu tam sayı değerlerin çiftlerini içerir. Nötral atomlar eşit sayıda elektron ve proton içerir. Atomların uyduğu istatistik yalnız nötronların sayısı (N) ile belirlenir. Eğer N çift ise atomlar boson veya N tek ise fermiyondur.

Çizelge 3. 1. Alkali atomlar için proton sayısı Z , nötron sayısı N, çekirdek spini I ve çekirdek manyetik moment μ_m ($\mu_N = e\hbar / 2m_p$ çekirdek magneton biriminde) değerleri

Izotope	Z	N	I	μ_m / μ_N
^1H	1	0	1/2	2,793
^6Li	3	3	1	0,822
^7Li	3	4	3/2	3,256
^{23}Na	11	12	3/2	2,218
^{39}K	19	20	3/2	0,391
^{40}K	19	21	4	-1,298
^{41}K	19	22	3/2	0,215
^{85}Rb	37	48	5/2	1,353
^{87}Rb	37	50	3/2	2,751
^{133}Cs	55	78	7/2	2,579

Çizelge 3.1’de, alkali atom ve hidrojen için N, Z ve çekirdek spini (I) değerleri verildi. Ayrıca bu çizelgede $m_I \hbar$ ile verilen çekirdek spininin z bileşenli seviyede manyetik moment operatörün z bileşeninin beklenen değeri ile tanımlanan çekirdek manyetik moment: μ ile verildi. $\mu = \langle I, m_I = I | \mu_z | I, m_I = I \rangle$ maksimum değere sahip olur. Temel olarak BEC üzerine bütün deneyler 1/2 toplam elektronik spin değerine ayarlanır ve onların çoğu $I = 3/2$ (^{87}Rb , ^{23}Na , ve ^7Li) çekirdek spinine sahiptir. Başarılı ilk deneyler daha önce bahsedildiği gibi $\text{H}(I=1/2)$ ve $^{85}\text{Rb}(I=5/2)$

atomları için yönetildi. Daha sonraları $S=1$ ile orta kararlı elektronik seviyede $I=0$ çekirdek spini ile ^4He atomları için başarıldı. Alkali atomların taban seviyeli elektronik yapıları basittir. Biri hariç diğer bütün elektronlar kapalı kabuğu doldurur. Geri kalan bir elektron en yüksek s-orbitalinde bulunur. Çekirdek spini, aşırı ince etkileşmeleri ile elektronik spin ile çiftlenir. Elektronlar, yörünge açısal momentuma sahip olmadığında ($L=0$) yörünge hareketine göre çekirdekte manyetik alan yoktur ve çiftlenin yalnız elektronik spini ile üretilen manyetik alana göre doğar. Peryodik cetvelin I-A grubu atomları için elektronik spini $S=1/2$ ve çekirdek spini I çiftlenimi $F = I \pm 1/2$ ile verilir. Burada F toplam spin için kuantum sayısıdır [66].

3.1.2. Etkileşme potansiyeli

Teoriksel olarak alkali atom buharının özellikleri belirlenmiştir. Bu özelliklerden en önemlisi tipik $1000\text{\AA}$ olan parçacık ayrımı, atomların etkileşme uzunluğunu tanımlayan saçılma mesafesinden oldukça geniştir. Alkali atomlar için saçılma mesafesi tipik olarak 100 a.u. 'dır. Bu yüzden alkali atom buharı seyrek. Bu özellikte etkileşmenin baskın etkisi, iki boyutlu çarpışma sayacının olmasıdır. Düşük enerjilerde, iki boyutlu saçılma bilgisinden gazın özelliklerini hesaplamak mümkün olur. Bu sayede atomik saçılma bilgisi BEC hakkındaki bilgiyi artırır derecede önemli bir rol oynamaktadır.

Elektronik taban seviyede bulunan alkali atom birkaç farklı aşırı ince seviyeye sahip olur. Atomlar arası etkileşmeler bu seviyeler arasında geçişlere sebep verir. Böyle işlemler tuzaklaşmış atom kayıplarının ana mekanizmasıdır. Başlangıç ve son seviyeler arasında parçacıkların iç seviye spini, atomik türler ve uyarılmış seviyeleri gibi kuantum sayıların setleri ile tanımlanır. Burada kuantum sayıların seçimine kanal olarak isimlendirilir. BEC'ye sahip sıcaklıklarda atomlar elektronik taban seviyelerde ve iç seviyeler aşırı ince seviyelerde bulunur. Tek atom için birkaç aşırı ince seviyelerin varlığına göre soğuk alkali atom saçılması çoklu kanal problemidir.

Tuzak kayıplarıyla sonuçlanan elastik olmayan işlemlere karşın kanallar arası çifttenim Feshbach rezonanslarına sebep verir. Bu durum tek kanalda düşük enerjili

bağ seviyesi ağır bir şekilde diğer bir kanaldaki saçılmayı değiştirir. Feshbach rezonansları etkili atom-atom etkileşmesinin genliği ve işaretini ayarlamayı sağlar ve manyetik alanın varlığında soğuk atom çarpışmaların araştırılmasında bir yoldur.

Fakat çok daha hafif atomlar haricindeki soğuk atomların saçılma özelliklerini teorik olarak araştırmak zordur. Çünkü atom-atom etkileşme potansiyelleri yeterli doğrulukta hesaplanamaz. Soğuk atom çalışmaları ile ilgili çoğu özellik deneyden elde edilemez. Sonuç olarak iki boyutlu saçılma hakkında bilginin türetilmesi ölçüm esnasında etkileşme hakkında bilgiyi elde etmek ve teoride saçılma özellikleri tahmin etmek için çoğu zaman gereklidir. Lazer soğutmanın gelişmesi düşük enerjide atomik çarpışmaların anlaşılmasını aşırı derecede arttırmıştır. Özellikle foto-birleşim spektroskopisi ve Feshbach rezonansların çalışması saçılma mesafesindeki ayrıntılı bilgiyi ortaya çıkarmayı mümkün kıldı [66].

Van der Waals etkileşmesinden dolayı alkali atomlar için saçılma mesafeleri atomun boyutlarından oldukça geniştir. Uzun menzili potansiyeller atomik saçılmada çok etkin olmasına karşın kısa menzilli potansiyel kısa menzildeki kararsızlıkları kontrol etmede kullanılır.

Kısa menzilli etkileşmeler

Yüklü iki atomlu parçacıkların hareketi farklı iki zaman skalası ile verilir. Elektronlar çekirdeklere göre daha enerjiktir. Bu yüzden elektronlar daha büyük hızlarda hareket eder. Tüm sistemi tanımlayan hamiltoniyen çekirdek ve elektron hareketi ile tanımlanır ($H = H_N + H_e$). Bu durum Bohr-Oppenheimer limiti olarak bilinir. Bohr-Oppenheimer potansiyel eğrileri, verilen R değerinde atomlar arası mesafe korunarak elde edilir. Daha sonra H_e 'nin sonuç elektronik öz fonksiyonların enerjileri hesaplanır. Bu enerjiler R ile değişir ve potansiyel enerji eğrilerin setini oluşturur. Bu potansiyelin sahip olduğu fizik, kısa ve geniş çekirdekler arası mesafelerde farklıdır. Bu iki bölgenin ayrımı atomik elektronik bulutun üst üste binmesi ile tanımlanır ve alkali atomlarda $R \sim 20a.u.$ ötesinde üstel olarak azalır. Bu

iki bölgenin dataları farklı kaynaklardan toplanır ve $R \sim 20a.u.$ yakın geçiş bölgesi boyunca düzgünce bir birine bağlanır [67].

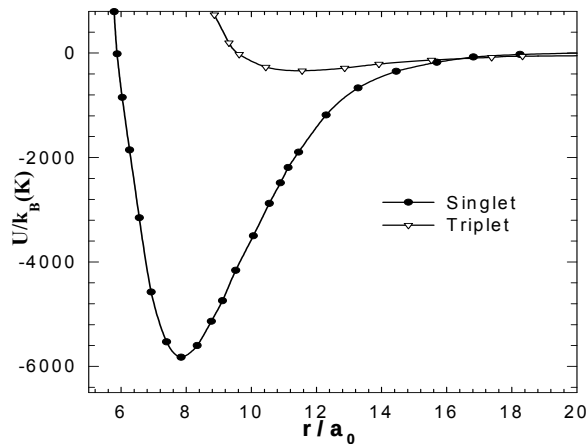
Kısa R bölge, elektronik bulutun üst üste binmesi ile tanımlanır; burada çarpışan çiftin etkileşmesini tanımlayan molekül kavramı kullanılmalıdır. Alkali atom taban seviye çarpışması durumunda potansiyel enerji yalnız çekirdekler arası ayrıma R ve iki atomun valence elektronik spinin ($s_i = 1/2$) yörüngesine bağlıdır. $S = s_a + s_b$ göre S nin değeri 0 (singlet) veya 1 (triplet) olabilir. Bu seviyelerin hund kuralına göre isimlendirilmesi singlet ve triplet seviyeler için sırasıyla $X^1 \Sigma_g^+$ ve $a^3 \Sigma_u^+$ şeklinde verilir. Potansiyel enerjinin spine bağlılığı Pauli dışarlama ilkesinin sonucudur. Çoklu elektronlu alkali atomların etkileşmelerini tanımlamak için *ab-initio* hesaplamaları karmaşık hesapları gerektirir. Molekül spektroskopu çalışanlar döngü ve titreşim spektral ortaya çıkarmak için çok büyük çapa gösterdiler. Bu sayede bu spektral standart teknikler kullanılarak uygun bir potansiyel tanımlamak için kullanıldı.

Kısa menzilli potansiyel değiş tokuş terimi, $V^{ex} = \pm AR^\alpha \exp(-\beta R)$ ile tanımlanır. Burada “+” triplet seviye için ve “-” singlet seviye için tanımlanır. Bu eşitlikte A , α ve β değerleri sabittir [68].

Van der Waals etkileşmeleri

Polarize alkali atomlar arasında etkileşmeler polarize olmayan atomlara göre çok farklıdır. Bunun nedeni kapalı kabuğun dışındaki elektronlara sahip atomların arasındaki etkileşmeler çekici katkılara sahip olmasıdır. Çünkü zıt spinli iki elektron aynı orbitali doldurabilir. Bu etki kovalent bağdan kaynaklanmaktadır. Ancak iki elektron aynı spin seviyede ise bu spinler aynı kısmı dalga fonksiyonuna sahip olmaz ve bu yüzden aynı orbitali paylaşan iki elektrona göre enerjide azalma olmaz. Bunu açıklamak için Şekil 3.1’de taban seviyede iki rubidyum atomun etkileşmesi iki valence elektronun singlet ve triplet seviye için verilir. Atomların küçük ayrımları için etkileşmeler elektron bulutunun üst üste binmesine göre ağır itici etkileşme ile

baskındır. Fakat daha büyük ayrımlarda çekici kuyu triplet seviyede bulunmasından dolayı singlet seviye için daha fazla derindir. Singlet potansiyel, atomlar $8 a.u$ 'lık denge uzunluğunda yaklaşık 6000 K derinliğinde bir minimuma sahip olur. Aksine atomik ayrımı yaklaşık $12 a.u$ olan triplet potansiyelin minimum derinliği yalnız birkaç yüz Kelvin'dir. Geniş atomik ayrımlar için Van der Waals etkileşmelerine göre çekicidir. Fakat kovalent bağa göre çekici etkileşme ile karşılaştırıldığında oldukça zayıftır.



Şekil 3. 1. Singlet ve triplet seviye bulunan elektronlar ile iki taban seviye rubidyum atomu için atomik ayrımın fonksiyonu olarak etkileşme potansiyeli

Van der Waals etkileşme, kovalent bağ'a göre bağıl olarak zayıf olmasına karşın triplet potansiyelin bir çok moleküler bağ verecek kadar kuvvetlidir. Tanımlanan aşırı ince seviyede atomik çiftler için elektronik spin seviye genel olarak elektronik triplet ve singlet katkıların toplamlarıdır sonuç olarak etkileşme hem triplet hem de singlet terimleri içerir.

Düşük enerjilerde iki boyutlu etkileşme atomların saçılma mesafesi ile karakterize edilir ve polarize alkali atomlar için bir atomun boyutlarından yaklaşık iki kat daha büyüktür. Bu saçılma mesafelerin sebebi olarak Van der Waals etkileşmesi gösterilir ve bu etkileşme atomlar arası elektriksel dipole-dipole etkileşmeden kaynaklanır. Genel olarak C_6 Van der Waals sabiti ile $-C_6/r^6$ ile verilir [69, 70, 71]. C_6 'nın geniş değerleri saçılma skalasının genliğinde daha fazla bir artış verir.

Potansiyeye $1/r^6$ katkısı r 'nin ters kuvvetinde iki boyutlu etkileşmenin uzun menzilli kısmında ağırlıklı katkısını verir. Uzun menzilli terim atomik birimde çok daha fazla Van der Waals terimi ile ifade edilebilir [67].

$$V(r) = -\sum_{n \geq 6} \frac{C_n}{r^n} \quad (3.1)$$

Daha yüksek C_8 ve C_{10} sabitleri tipik olarak $10^2 C_6$ ve $10^4 C_6$ mertebesinde ve bu yüzden geniş uzaklıklarda sadece $1/r^6$ potansiyeli iyi bir yaklaşımdır. Hatta birçok teorik yaklaşım sadece bu potansiyel için çözülür.

3.2. Yarı-Klasik Çözüm

3.2.1. Saçılma mesafesi

δ_l faz kaymaları, radyal Schrödinger denkleminin WKB metoduna dayalı yarı-klasik çözümden yararlanarak saçılma mesafesinin bulunmasında kullanılır [4]. Ayrıca düşük enerjilerde faz kayması ve saçılma mesafesi birbirine Bethe denklemi ile bağlıdır [74].

Burada potansiyel kuyu içerisindeki yarı klasik dalga fonksiyonu ile asimptotik bölgedeki çözümün çakıştırılması durumundaki saçılma mesafesi elde edilecektir. Saçılma mesafesinin gerçek değeri, atom içi etkileşmenin potansiyel eğrisi $V_L(r)$ ile belirlenir. Burada $V_L(r)$,

$$V_L \cong -\frac{\alpha}{r^n} \quad (3.2)$$

şeklinde ters-kuvvet potansiyeli alınır. Atom-atom etkileşmesi için potansiyel eğrisi $V_L(r)$ Şekil 3.2’de gösterilmektedir. Saçılma mesafesini (a) bulmak için sıfır enerjide s-dalgaları için

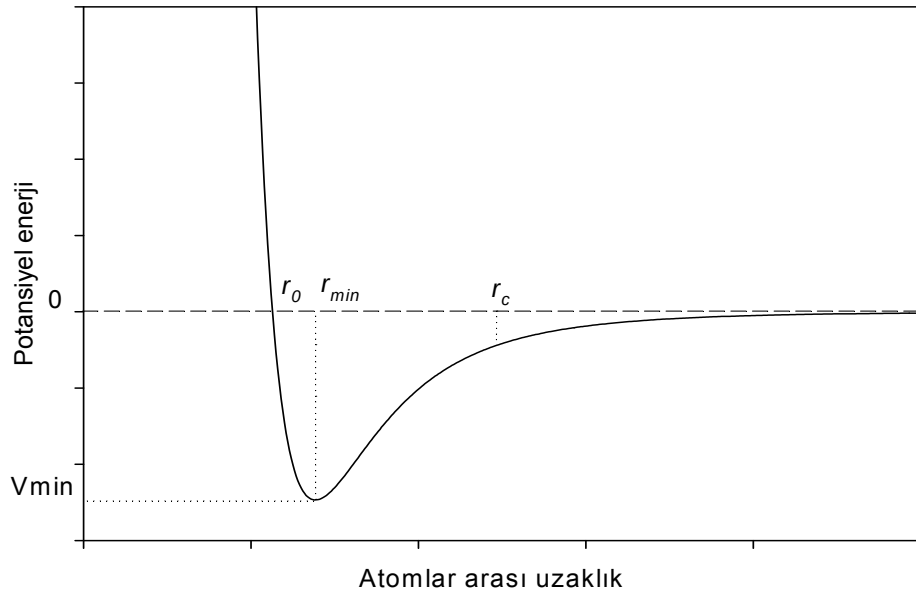
$$\frac{d^2 u_l(r)}{dr^2} - \frac{2m}{\hbar^2} V_L(r) u_l(r) = 0 \quad (3.3)$$

radyal Schrödinger denkleminin çözülmesi gerekir. a_l , uzun mesafelerde $V_L(r)$ nin asimtotik davranışından bulunabilir.

$$u_l(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\approx} C_1 r + C_2 \quad (3.4)$$

olmak üzere,

$$a_l = -\frac{C_2}{C_1} \quad (3.5)$$



Şekil 3. 2. Tipik atomlar arası potansiyel ve r 'nin karakteristik değeri

olur [72]. Potansiyel kuyu içinde yarı-klasik yaklaşımının (WKB) geçerli olabilmesi için

$$\left| \frac{d\lambda}{dR} \right| \ll 2\pi \text{ veya } \frac{mk|F|}{p^3} \ll 1 \quad (3.6)$$

şartları sağlanmalıdır [4]. Burada λ de Broglie dalga boyu, sıfır enerjideki parçacığın yerel momentumu p ve üzerinde etkin olan kuvvettir F , Eş. 3.3 denklemi ile verilen Schrödinger denklemi,

$$u_l''(r) + p^2(r)u_l(r) = 0 \quad (3.7)$$

şeklinde yazılabilir. Burada

$$p = \sqrt{2m[-V_L(r)]} \quad (3.8)$$

dir. ($\hbar = 1$). Bu durumda klasik dönüm noktası r_0 'ın sağındaki WKB çözüm

$$u_l(r) = \frac{C}{\sqrt{p}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_{r_c}^r p dr - \frac{\pi}{4}\right) \quad r > r_0 \quad (3.9)$$

şeklindedir [73]. r_0 'ın solunda ise $u_l(r)$ exponansiyel olarak azalır. Geniş mesafelerde potansiyel $-\alpha/r^n$ şeklinde azalır ve

$$r \ll \left(\frac{2\gamma}{n}\right)^{2/n-2} \quad (3.10)$$

olur. Burada,

$$\gamma = \frac{\sqrt{2m\alpha}}{\hbar} \quad (3.11)$$

alınır. $r \rightarrow \infty$ için

$$u_l(r) \propto \frac{1}{\sqrt{p}} \cos(\text{sabit}) \propto r^{n/4} \quad (3.12)$$

şeklinde olur. Eş. 3.3 ifadesi

$$\frac{d^2 u_l(r)}{dr^2} + \frac{\gamma^2}{r^n} u_l(r) = 0 \quad (3.13)$$

denkleminde dönüştürülebilir. $u_l(r) = R\sqrt{r}$ dönüşümü altında Eş. 3.13

$$\frac{d^2 R}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{dR}{dx} + \left[1 - \frac{1}{(n-2)^2 x^2} \right] R = 0 \quad (3.14)$$

şeklinde Bessel denkleminde dönüşür. Burada

$$x = \left(\frac{2\gamma}{n-2} r^{n-2/2} \right) \quad (3.15)$$

dir. Eş. 3.14'ün çözümü Bessel $J_{1/n-2}(x)$ ve Neuman fonksiyonları $Y_{1/n-2}(x)$ ile verilir. $r > r_c$ için Eş. 3.3'ün çözümü

$$u_{>}(r) = \sqrt{r} \left[A J_{\frac{1}{n-2}} \left(\frac{2\gamma}{n-2} r^{\frac{n-2}{2}} \right) - B Y_{\frac{1}{n-2}} \left(\frac{2\gamma}{n-2} r^{\frac{n-2}{2}} \right) \right] \quad (3.16)$$

şeklinde olur. $x \ll 1 (r \rightarrow \infty)$ için Bessel ve Neumann fonksiyonlarına yönelik açılımları kullanılarak ve düşük mertebeli terimler alınarak

$$\left. \begin{aligned} J_\mu(x) &\cong \frac{x^\mu}{2^\mu \Gamma(1+\mu)} \\ \text{ve} \\ Y_\mu(x) &\cong \cot(\pi\mu) \frac{x^\mu}{2^\mu \Gamma(1+\mu)} - \frac{1}{\sin(\pi\mu)} \frac{x^{-\mu}}{2^{-\mu} \Gamma(1-\mu)} \end{aligned} \right\} \quad (3.17)$$

ifedeleri yazılabilir. Eş. 3.17’de verilen ifadeler Eş. 3.16’ da kullanıldığında

$$u_>(r) = \left[\frac{\left(\frac{2\gamma}{n-2} \right)^{1/n-2}}{2^{\frac{1}{n-2}} \Gamma\left(\frac{n-1}{n-2}\right)} \right] \left[A - b \cot\left(\frac{\pi}{n-2}\right) + \frac{B.r}{\sin \frac{\pi}{n-2}} \left(\frac{2\gamma}{n-2} \right)^{-2/n-2} 2^{\frac{2}{n-2}} \frac{\Gamma\left(\frac{n-1}{n-2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n-3}{n-2}\right)} \right] \quad (3.18)$$

olur. Eş. 3.3, Eş. 3.18’e dönüştüğüne göre Eş. 3.4’den yararlanılarak saçılma mesafesi;

$$\alpha_l = \left(1 - \frac{A}{B} \tan \frac{\pi}{n-2} \right) \left[\cos\left(\frac{\pi}{n-2}\right) \left(\frac{\gamma}{n-2} \right)^{2/n-2} \frac{\Gamma\left(\frac{n-3}{n-2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n-1}{n-2}\right)} \right] \quad (3.19)$$

olur. A ve B sabitleri $r = r_c$ de Eş. 3.16’da verilen analitik çözümün Eş. 3.9’daki WKB dalga fonksiyonu ile karşılaştırılması ile elde edilir. r_c , Eş. 3.10’daki koşulun sağlanması durumunda seçildiğinde r_c noktasına karşılık x ’in değeri büyüktür ve Eş. 3.15’den

$$x = \left(\frac{2\gamma}{n-2} r_c^{-\frac{n-2}{2}} \right) \quad (3.20)$$

yazılabilir. $x \gg$ ise $J_\mu(x)$ ve $Y_\mu(x)$ için asimtotik formülleri

$$\left. \begin{aligned} J_\mu(x) &\approx \left(\frac{2}{\pi x}\right)^{1/2} \cos\left\{x - \left(\mu + \frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{2}\right\} \\ \text{ve} \\ Y_\mu(x) &\approx \cot \pi \mu J_\mu(x) - \frac{J_{-\mu}(x)}{\sin \mu \pi} \end{aligned} \right\} \quad (3.21)$$

olarak verilir. Buradan

$$Y_\mu(x) \approx \cot \pi \mu \left(\frac{2}{\pi x}\right)^{1/2} \cos\left\{x - \left(\mu + \frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{2}\right\} - \frac{1}{\sin \mu \pi} \left(\frac{2}{\pi x}\right)^{1/2} \cos\left\{x - \left(-\mu + \frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{2}\right\} \quad (3.22)$$

olarak alınır. Eş. 3.16'da, Eş. 3.20, Eş. 3.21 ve Eş. 3.22 kullanılarak

$$\begin{aligned} u_{l>}(r) = & \sqrt{\frac{n-2}{\pi \gamma}} r^{n/4} \left\{ \left(A - B \cot \frac{\pi}{n-2} \right) \cos \left(\frac{2\gamma}{n-2} r^{\frac{n-2}{2}} - \frac{\pi}{2(n-2)} - \frac{\pi}{4} \right) \right. \\ & \left. + \frac{B}{\sin \frac{\pi}{n-2}} \cos \left(\frac{2\gamma}{n-2} r^{\frac{n-2}{2}} + \frac{\pi}{2(n-2)} - \frac{\pi}{4} \right) \right\} \quad (r \approx r_c) \end{aligned} \quad (3.23)$$

sonucu elde edilir. Eş. 3.23 ve Eş. 3.9'daki ifadeler için $\frac{1}{u_l(r)} \frac{du_l(r)}{dr}$ şeklindeki

logaritmik türevleri hesaplanarak $r \rightarrow r_c$ için A/B oranı (A ve B sabitleri, $r = r_c$ için Eş. 3.23 ve Eş. 3.9'daki ifadelerin eşitlenmesi ile)

$$\frac{A}{B} = \tan \left(\Phi - \frac{\pi}{2(n-2)} \right) \quad (3.24)$$

olur. Burada $\Phi = \Phi_{<} + \Phi_{>}$,

$$\Phi_{<} = \frac{1}{\hbar} \int_{r_0}^{r_c} p dr \quad (3.25)$$

ve

$$\Phi_{>} = \frac{1}{\hbar} \int_{r_c}^r p dr = \frac{2\gamma}{n-2} r_c^{\frac{n-2}{2}} \quad (3.26)$$

dir. Φ toplamı, klasik dönüm noktasından r 'ye sıfır enerjide hesaplanmış olan yarı klasik fazdır.

Eş. 3.24, Eş. 3.19'daki denklemde kullanıldığında saçılma mesafesi [4]

$$a = \left[\cos \frac{\pi}{n-2} \left(\frac{\gamma}{n-2} \right)^{\frac{2}{n-2}} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{n-3}{n-2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n-1}{n-2}\right)} \right] \left[1 - \tan \frac{\pi}{n-2} \tan \left(\Phi - \frac{\pi}{2(n-2)} \right) \right] \quad (3.27)$$

olur. Burada,

$$\Phi = \frac{1}{\hbar} \int_{r_c}^r \sqrt{2m[-V_L(r)]} dr \quad (3.28)$$

dir. Saçılma mesafesinin gerçek şiddetini veya büyüklüğünü, Eş. 3.28'de verilen yarı-klasik fazı Φ belirler. Sonlu bir üst limit olan r ile Eş. 3.28 integrali hesaplanarak Eş. 3.27'den saçılma mesafesi bulunur. Saçılma mesafesi için önemli menzil uzunluklarında faz kayması bize bilgi verir. Saçılmanın kararlı durumunda

$$R_{\max} \gg \bar{a} \sim \left(\frac{\gamma}{n-2} \right)^{\frac{2}{n-2}} \text{ şartı sağlamalıdır. Eğer}$$

$$\Phi - \frac{\pi}{2(n-2)} = \frac{\pi}{2} + \pi N, \quad N = 1, 2, 3, \dots, \quad (3.29)$$

şartı sağlanırsa tanjant fonksiyonu ve Eş. 3.27'deki saçılma mesafesi sonsuza gider. Ayrıca $\bar{a}$ ile gösterilen nicelik tipik (ortalama) saçılma mesafesi olmak üzere

$$\bar{a} = \cos \frac{\pi}{n-2} \left(\frac{\gamma}{n-2} \right)^{2/n-2} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{n-3}{n-2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n-1}{n-2}\right)} \quad (3.30)$$

ile gösterilir. Saçılma mesafesi çekici potansiyel için negatif, itici potansiyel için de pozitif olur [75].

3.2.2. Etki menzili teorisi

Düşük enerji limitlerinde etki mesafesini bulmak için radyal denkleme ihtiyaç duyulur,

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - l(l+1) - U(r) \right] u_l(k, r) = 0 \quad (3.31)$$

Burada yalnızca s-dalga saçılmasını analiz edilecek. Çünkü düşük sıcaklık limitlerinde etki mesafesine yalnız s-dalga saçılmasından katkı gelir. Bu denklemin çözümü $l = 0$ ve $k \rightarrow 0$ için $u^0(r)$ olsun

$$u^0(r) = \lim_{k \rightarrow 0} u_0(k, r) \quad (3.32)$$

Bu şartlara göre radyal denklem

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - u(r) \right] u^0(r) = 0 \quad (3.33)$$

haline dönüşür. $r \gg a$ potansiyel menzili dışında potansiyel ihmal edilir ve

$$\frac{d^2}{dr^2} u^0(r) = 0 \quad (3.34)$$

olur ve çözümü

$$u^0(r) \cong Br + C \quad (3.35)$$

olur. Bu çözümü,

$$u_l(k, r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A_l(k) \sin \left[kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l(k) \right] \quad (3.36)$$

denklemini yardımıyla $u^0(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A(r - \alpha)$ halinde yazabiliriz. Burada α düşük enerjide faz kaymasının davranışı olan saçılma uzunluğudur. Bölüm 2’de

$$\alpha = -\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan \delta_0(k)}{k} \quad (3.37)$$

olarak verilmişti. Bu eşitliğin yardımıyla

$$\lim_{k \rightarrow 0} k \cot \delta_0(k) = -\frac{1}{\alpha} \quad (3.38)$$

şeklinde yazabiliriz. Etki mesafesini tanımlamak için yine radyal denkleme dönmemiz gerekir. Farklı iki keyfi enerji değeri düşünelim,

$$E_1 = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} \quad \text{ve} \quad E_2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (3.39)$$

bu enerji değerlerine bağlı dalga fonksiyonları

$$u^{(1)}(r) \equiv u_0(k, r) \text{ ve } u^{(2)}(r) \equiv u_0(k, r) \quad (3.40)$$

olur. Bu fonksiyonlara bağılı radyal denklemler yazılır ve düzenlenirse

$$\frac{d}{dr} \left(u^{(1)} u^{(2)} - u^{(2)} u^{(1)} \right) = (k_1^2 - k_2^2) u^{(1)} u^{(2)} \quad (3.41)$$

elde edilir. Aynı işlemi $r \gg a$ potansiyel menzili dışında, potansiyelin sıfır olduğu durumda

$$\frac{d}{dr} \left(v^{(1)} v^{(2)} - v^{(2)} v^{(1)} \right) = (k_1^2 - k_2^2) v^{(1)} v^{(2)} \quad (3.42)$$

olur. Burada

$$\lim_{r \rightarrow \infty} u^{(1)}(r) = v^{(1)}(r) \quad (3.43)$$

$$v^{(1)}(r) = \frac{\sin(k_1 r + \delta_0)}{\sin \delta_0}, \quad v^{(1)}(0) = 1 (i = 1, 2) \quad (3.44)$$

dır. Eş. 3.41' den Eş. 3.42'yi çıkarır ve $[0, \infty]$ aralığında integralini alındığında

$$\left[u^{(1)} u^{(2)'} - u^{(2)} u^{(1)'} - v^{(1)} v^{(2)'} + v^{(2)} v^{(1)'} \right]_0^\infty = (k_1^2 - k_2^2) \int_0^\infty (u^{(1)} u^{(2)} - v^{(1)} v^{(2)}) dr \quad (3.45)$$

olur. Eş. 3.44'den ve çözüm fonksiyonlarının orijinde sonsuzdaki davranışlarından Eş. 3.45,

$$k_1 \cot \delta_0(k_1) - k_2 \cot \delta_0(k_2) = (k_1^2 - k_2^2) \int_0^\infty (u^{(1)} u^{(2)} - v^{(1)} v^{(2)}) dr \quad (3.46)$$

haline dönüşür. $k_1 = k$ ve $k_2 \rightarrow 0$ iken Eş. 3.46

$$k \cot \delta_0(k) = -\frac{1}{\alpha} + k^2 \int_0^\infty (u^{(1)} u^{(2)} - v^{(1)} v^{(2)}) dr \quad (3.47)$$

olur. Burada

$$v^0(r) = 1 - \frac{r}{\alpha} \quad (3.48)$$

dır. $v^k \equiv v^1, u^k \equiv u^1$ ve $k_1 = k$ için

$$b(k) = 2 \int_0^\infty (v^k v^0 - u^k u^0) dr \quad (3.49)$$

olur. Bu sabitle birlikte Eş. 3.47

$$k \cot \delta_0(k) = -\frac{1}{\alpha} + \frac{1}{2} r_e k^2 \quad (3.50)$$

olur. Bu formül Bethe formülü [74] olarak bilinir. Burada etki menzili, u^k ile u^0 ve v^k ile v^0 yer değiştirilme ile

$$r_e = 2 \int_0^\infty [(v^0)^2 - (u^0)^2] dr \quad (3.51)$$

şeklinde tanımlanmış olur. Eş. 3.50 ile saçılma mesafesi, faz kayması ve etki mesafesi arasında bir bağıntı yazılmış olur. Düşük enerjide bu eşitliği genelleştirilmesi gerekir. Bunun için yarı klasik metot olan WKB metot kullanılır.

3.2.3. WKB metoduna dayalı etki menzilin hesaplanması

Eş. 3.50'deki etki menzilin Eş. 3.51 ile bulunacağını söylenmişti. Bu eşitliği şu nütasyonlarda yeniden yazalım

$$r_e = 2 \int_0^{\infty} [\chi_0^2(r) - \chi^2(r)] dr \quad (3.52)$$

Burada $\chi(r)$ fonksiyonu sıfır enerjide s-kısmı dalga için Radyal Schrödinger denkleminin çözümüdür ve

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 \chi}{dr^2} + U(r) \chi(r) = 0 \quad (3.53)$$

olur. Sınır şartları $\chi(0) = 0$ ve $r \rightarrow \infty$ normalize dalga fonksiyonu

$$\chi(r) \cong 1 - \frac{r}{\alpha} \quad (3.54)$$

olur. χ_0 , $[U(r) = 0]$ serbest hareket için Schrödinger denkleminin sıfır enerji çözümü her yerde asimptotik forma eşit $\chi_0(r) = 1 - r/\alpha$. Eş. 3.52'deki integral χ 'in $r \rightarrow \infty$ giderken yeterince hızlı χ_0 'a yaklaşırken çakışır. $U(r)$ potansiyeli Eş. 3.2'de görüldüğü gibi r^{-6} ile orantılı terim içermektedir. Bu nedenle büyük mesafelerde potansiyel $U(r) = -\alpha/r^n$ biçimiyle verilmektedir. Bu potansiyel için dalga denklemin Bessel ve Neumann fonksiyonlar cinsinden çözüm vermektedir. Potansiyel ayrıca

$$\frac{m\hbar|F|}{p^3} \ll 1 \quad (3.55)$$

yarıklasik sınır şartlarını sağlar. Ayrıca $E=0$ 'da bu eşitliği $F = -\frac{dU(r)}{dr}$ ve

$p = \sqrt{2\mu(E - U(r))}$ eşitliklerin kullanılması ile Eş. 3.55

$$r \ll \left(\frac{2\gamma}{n}\right)^{2/(n-2)} \quad (3.56)$$

eşitsizliğine dönüşür. Bu eşitsizliğe göre Eş. 3.56'nın sağ tarafı atom yarı çapından oldukça büyüktür. Örneğin Cs için $r \ll 117a.u.$, Na için $r \ll 51,2a.u.$ ve Li için $r \ll 37,5a.u.$ olur [73]. $U(r)$, kısa mesafelerde $U(r) = -\alpha/r^n$ nin basit formuna sahip değil. Ancak arada yarı klasik yaklaşım geçerli kalır. Bu yüzden $U(r) = -\alpha/r^n$ potansiyel ve hem Eş. 3.53 analitik çözümü hemde Eş. 3.56'yı sağlayan daima r^* menzil uzaklığı vardır. Bunların bir sonucu olarak $E=0$ 'da dalga fonksiyonlarını yazabiliriz.

$$\chi(r) = \frac{C}{\sqrt{p}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{r_0}^r p dr + \frac{\pi}{4}\right), \quad r_0 < r \leq r^* \quad (3.57)$$

$$\chi(r) = \sqrt{r} \left[A J_{1/(n-2)}\left(\frac{2\gamma}{n-2} r^{-(n-2)/2}\right) - B N_{1/(n-2)}\left(\frac{2\gamma}{n-2} r^{-(n-2)/2}\right) \right], \quad r^* \leq r \leq \infty \quad (3.58)$$

Burada r_0 yarı klasik dönüm noktası ve $p = \sqrt{-2mU(r)}$ klasik momentumdur. $r < r_0$ için dalga fonksiyonu üstel azalır. Eş. 3.54 ile $r \rightarrow \infty$ da Eş. 3.58'in asimptotik formunun karşılaştırılması ve r^* 'da Eş. 3.57 ile Eş. 3.58 χ ve $d\chi/dr$ dalga fonksiyonları ve türevleri karşılaştırarak A, B ve C sabitleri bulunur.

$$B = -\frac{1}{\alpha} \sin \frac{\pi}{n-2} \Gamma\left(\frac{n-3}{n-2}\right) \left(\frac{\gamma}{n-2}\right)^{1/(n-2)} \quad (3.59)$$

$$A = B \tan\left(\Phi - \frac{\pi}{2(n-2)}\right) \quad (3.60)$$

$$C = \sqrt{\frac{n-2}{\pi}} \cdot \frac{B}{\cos\left(\Phi - \frac{\pi}{2(n-2)}\right)} \quad (3.61)$$

χ ve χ_0 fonksiyonlarındaki A, B ve C sabitleri bilindiğine göre Eş. 3.52'den etki mesafesini analitik hesaplanır. Burada $r > r^*$ büyük uzunluklarda $\int \chi^2 dr$ integrali daha baskındır. Bu integrali $r \sim r^*$ da yarı klasik çözümü kullanarak çözelim, Eş. 3.57 kullanılarak

$$\int \chi dr = \frac{C^2}{2} \int \frac{r^{n/2}}{\sqrt{2m\alpha}} = \frac{C^2 r^{n/2+1}}{\hbar\gamma(n+2)} \quad (3.62)$$

olur. Bu çözüm yarı klasik dalga fonksiyonun katkılarını gösterir. Küçük mesafelerde bu katkılar ihmal edilebilir. Analitik fonksiyon Eş. 3.58, bütün r 'ler için geçerlidir.

$\int_0^r \chi_0^2 dr$ ve $\int_0^r \chi^2 dr$, r sonsuza giderken farklıdır. Bu farklılık sınırlı bir r_e 'yi elde etmek için ihmal edilmesi gerekir. İlk bulunan integral (Eş. 3.62) önemsizdir.

$$\int_0^r \chi_0^2 dr = \int_0^r \left(1 - \frac{r}{\alpha}\right) dr = r - \frac{r^2}{\alpha} + \frac{r^3}{3\alpha^2} \quad (3.63)$$

$r \rightarrow \infty$ giderken analitik fonksiyonun(Eş. 3.58) integralini hesaplamalıyız. Neumann fonksiyonunu

$$N_\nu(x) = \frac{1}{\sin \nu\pi} [\cos \nu\pi J_\nu(x) - J_{-\nu}(x)] \quad (3.64)$$

ve A ve B sabitlerini kullanarak Bölüm 3.1’de bulduğumuz saçılma mesafesini göz önünde bulundurarak

$$\begin{aligned} \int \chi^2 dr = -\nu 2^{4\nu+1} (\gamma\nu)^{2\nu} & \left\{ [\Gamma(1+\nu)]^2 \int x^{-(4\nu+1)} [J_\nu(x)]^2 dx - \frac{2(\gamma\nu)^{2\nu}}{\alpha} \Gamma(1-\nu) \right. \\ & \left. \times \Gamma(1+\nu) \int x^{-(4\nu+1)} J_\nu(x) J_{-\nu}(x) dx + \frac{(\gamma\nu)^{4\nu}}{\alpha^2} [\Gamma(1-\nu)]^2 \int x^{-(4\nu+1)} [J_{-\nu}(x)]^2 dx \right\} \end{aligned} \quad (3.65)$$

yazılabilir. Burada $\nu = 1/(n-2)$ ve $x = 2\gamma\nu r^{-1/2\nu}$ değerleri yeni integrasyon değerleridir. Daha düşük limitlerde $J_{\pm\nu} \propto x^{\pm\nu}$ olur. $\int \chi_0^2 dr$ ve $\int \chi^2 dr$ integralleri $r \rightarrow \infty$ giderken aynı değerlere sahip olacağından yukarıdaki integralin her birini hesaplayarak Eş. 3.63’e eşitleriz. Bu durumda bulacağımız her fonksiyon etki mesafesinin katsayılarını oluşturur. Örnek olarak ilk integral ele alınır, matematiksel işlemler yardımıyla

$$\int x^{-(4\nu+1)} [J_\nu(x)]^2 dx = -\frac{1}{2\nu} [x^{-2\nu} J_\nu(x)]^2 - \frac{1}{\nu} \int x^{-4\nu} J_\nu(x) J_{\nu+1}(x) dx \quad (3.66)$$

eşitliğine dönüşür. Burada hesaplanan integral $x=0$ da iyi davranışlı ve 0 ve ∞ arasında hesaplandığı zaman sınırlı bir değere sahip olur. Eş. 3.63’deki değeri

$$\int \chi^2 dr = 2^{4\nu} (\gamma\nu)^{2\nu} [\Gamma(1+\nu)]^2 \left\{ [x^{-2\nu} J_\nu(x)]^2 + 2 \int x^{-4\nu} J_\nu(x) J_{\nu+1}(x) dx \right\} + \dots \quad (3.67)$$

olur. Burada $J_\nu, (r \rightarrow \infty) \quad x \ll 1$ için

$$J_\nu(x) \cong \frac{x^\nu}{2^\nu \Gamma(1+\nu)} \quad (3.68)$$

ile verilir ve sonuçta $(2\gamma\nu)x^{-2\nu} = r$ yi gözeterek Eş. 3.63'de birinci ifade ile yer değiştiririz. Ortaya çıkan sonuç

$$r_e = F_n - \frac{G_n}{\alpha} + \frac{H_n}{\alpha^2} \quad (3.69)$$

eşitliğinin ilk kısmını oluşturur. Aynı şekilde G_n , H_n fonksiyonları da belirlenir. Bu fonksiyonlar yalnız γ ve $\nu = 1/(n-2)$ asimptotik parametrelere bağlıdır. Bu fonksiyonlar

$$F_n = \frac{2}{3} \frac{\pi}{\sin \nu\pi} (\gamma\nu)^{2\nu} \frac{\Gamma(\nu)}{[\Gamma(2\nu)]^2 \Gamma(3\nu)} \quad (3.70)$$

$$G_n = \frac{4}{3} \frac{\pi}{\sin \nu\pi} (\gamma\nu)^{4\nu} \frac{\Gamma(1-3\nu)\Gamma(4\nu)}{\Gamma(2\nu)\Gamma(3\nu)} \quad (3.71)$$

$$H_n = \frac{2}{3} \frac{\pi}{\sin \nu\pi} (\gamma\nu)^{6\nu} \frac{\Gamma(1-3\nu)\Gamma(1-\nu)\Gamma(4\nu)}{\nu^2 [\Gamma(\nu)]^2 [\Gamma(2\nu)]^2} \quad (3.72)$$

dir. Bu fonksiyonları tipik saçılma mesafesi ile orantılı olarak da verilebilir, $F_n \sim \bar{a}$, $G_n \sim \bar{a}^2$ ve $H_n \sim \bar{a}^3$. Bundan dolayı etki mesafesi bağımsız bir parametre değildir Fakat saçılma mesafesine bağlı ortalama (tipik) saçılma mesafesinin basit bir fonksiyonu olur. r_e nin tipik değeri $U(r)$ nin γ 'ya bağlı uzun menzilli davranışı ile tanımlanır. Sıfır Enerjide yarı klasik faz Φ nin gerçek genliğini tanımlayan potansiyel eğrisinin kısa menzilli kısmından r_e nin özel değerleri ve saçılma mesafesi bulunur.

F_n , G_n ve H_n fonksiyonları Eş. 3.69'da yerleştirilmesi dahilinde

$$r_e = \frac{\sqrt{2\gamma}}{3} \left[\frac{\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{4}\right)} - 2 \frac{\sqrt{2\gamma}}{\alpha} + \frac{\Gamma\left(\frac{3}{4}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)} \frac{4\gamma}{\alpha^2} \right] \quad (3.73)$$

veya

$$r_e = \frac{\bar{a}}{3} \left[\frac{\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{4}\right)} \right]^2 \left[1 - 2 \frac{\bar{a}}{\alpha} + 2 \left(\frac{\bar{a}}{\alpha} \right)^2 \right] \quad (3.74)$$

olur.

3.3. Szmytkowski Tarafından Elde Edilen Analitik Saçılma Mesafeleri

Szmytkowski atom fiziğinde kullanılan birkaç potansiyel için saçılma mesafelerine analitik uzun menzilli katkılarını geliştirmek için bir metot tanımladı [5]. Bu metot da göre çarpışan parçacıklar arasında etkileşme potansiyeli iki kısımdan oluşur. Orijinden (çekirdek yarıçapından) biraz uzakta sıfır olan kısa menzil potansiyel bileşeni ve bu kısa menzilli potansiyel burada kullanılmaz. Fakat yerine kısa menzilede nümerik saçılma mesafesi verilmektedir. Potansiyelin uzun menzilli kısım ters kuvvet potansiyeli olarak seçilir. Bu potansiyel için sıfır enerjide radyal Schrödinger denklem Bessel, Whittaker ve Legendre fonksiyonların teriminde analitik olarak çözülür. Bunun için saçılma mesafeleri için analitik formül üretilir. Bu formüller etkileşmenin uzun menzilli kısmını karakterize eden sabitlere, çekirdek yarıçapına ve kısa menzilli saçılma mesafesine bağlıdır. Bu metodun uygulamaları çarpışan nötral hedeflerden yüklü parçacıkların saçılması ve iki alkali atom çarpışma için çalışılmaktadır.

Atom fiziğinde çarpışma problemlerini çözmek için kullanılan birçok yaklaşımda yarıçapın ρ küresel kabuk (çekirdek sınırı) ile iki kısma bölünür. İç bölgede ($r < \rho$), iki çarpışan parçacıklar arasında kısa menzilli etkileşme çok karmaşık ve saçılma denklemi parçacıkların her bir için bağımsız olarak çözülmelidir. Aksine ρ yeterince

geniş seçilirse dış bölgede $r > \rho$ saçılma problemi basit analitik ifade ile uzun menzilli potansiyel saçılmaya indirgenir. Bu bölgede nümerik çözüm kolayca yapılır.

Bu metot uzun menzilli potansiyeller için saçılma mesafesi hesap edilir. Uzun menzilli potansiyeller için saçılma mesafesi farklı metotlar ile de son zamanları yoğun olarak araştırılmaktadır [4, 76]. Biz bu yaklaşımı, alkali atomların birkaçı için (K+K, Rb+Rb ve Rb+K) uygulamasını tartışmaktayız.

Saçılma mesafesinin değişik tanımlamaları vardır. Bu metot, l . kısmi dalga saçılma mesafesini a_l

$$a_l = -(2l-1)!!(2l+1)!! \lim_{k \rightarrow 0} [k^{2l+1} \cot \delta_l(k)]^{-1} \quad (3.75)$$

tanımlanması ile verilir. Bu denklemde $\delta_l(k)$, saçılma potansiyeline göre l . kısmi faz kaymasıdır ve k saçılan parçacığın dalga sayısıdır. Birkaç yazar bu ifadenin zıt işareti ile $(2l-1)!!(2l+1)!!$ faktörün kısaltılmasını kullanmaktadır. $l=0$ için bu tanımlama Fano ve Rau tarafından elde edilen saçılma ifadesi ile iyi uyuşmaktadır [77]. a_l ,

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r^{2l+3} V_L(r) = 0 \quad (3.76)$$

şartını sağlayan uzun menzilli potansiyeller için geçerlidir. Saçılma mesafesinin hesaplanması genellikle sıfır enerjide Schrödinger denklemin nümeriksel integrasyonuna dayalıdır [4, 76].

Saçılma mesafesi sıfır enerjide radyal Schrödinger denklemin çözümünden elde edilir:

$$\frac{d^2 u_l(r)}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} u_l(r) - \frac{2m}{\hbar^2} V_L(r) u_l(r) = 0 \quad r \geq \rho. \quad (3.77)$$

Potansiyel Eş. 3.76'daki şartı sağlar. Çözüm asimptotik

$$u_l(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} sbt. \times (r^{l+1} - a_l r^{-l}) \quad (3.78)$$

olarak davranır. Son iki denklemden a_l ,

$$a_l = \lim_{r \rightarrow \infty} a_l(r) \quad (3.79)$$

limitinde verilir. Burada $a_l(r)$ fonksiyonu

$$a_l = r^{2l+1} \frac{rL_l(r) - (l+1)}{rL_l(r) + l} \quad (3.80)$$

olarak tanımlanır. Bu fonksiyonda $L_l(r)$,

$$L_l(r) = \frac{1}{u_l(r)} \frac{du_l(r)}{dr} \quad (3.81)$$

sıfır enerji dalga fonksiyonunun $u_l(r)$ logaritmik türevidir. İki atomun çarpışmasında etkileşme potansiyeli iki kısımdan oluşur. Kısa menzilli potansiyel çekirdek yarıçapının ρ ötesinde sıfır kabul edilir. Bunun yerine kısa menzilli saçılma mesafeleri a_{ls} hesap edilir. $r \geq \rho$ için genel çözüm,

$$u_l(r) = A_l f_l(r) + B_l g_l(r) \quad r \geq \rho \quad (3.82)$$

ile verilir. Daha sonra logaritmik türev L_l

$$L_l(r) = \frac{f_l'(r) + D_l g_l'(r)}{f_l(r) + D_l g_l(r)} \quad (3.83)$$

şeklinde verilmektedir. Burada $D_l = B_l / A_l$ tanımlanması gerekir. Bu sabitler Eş. 3.80 ve Eş. 3.83'den kolayca bulunur ve $r = \rho$ 'da ve $a_{ls} = a_l(\rho)$ ile

$$D_l = -\frac{(\rho^{2l+1} - a_{ls})\rho f'_l(\rho) - [(l+1)\rho^{2l+1} + la_{ls}]f_l(\rho)}{(\rho^{2l+1} - a_{ls})\rho g'_l(\rho) - [(l+1)\rho^{2l+1} + la_{ls}]g_l(\rho)} \quad (3.84)$$

eşitliği ile verilir.

3.3.1. Ters kuvvet potansiyelleri

Çarpışma probleminde atom-atom etkileşmelerde çekici etkileşmeyi tarif eden ters kuvvet potansiyeli,

$$V_L(r) = -\frac{\hbar^2 b^2}{2\mu r^n} \quad b > 0 \quad r \geq \rho \quad (3.85)$$

şeklinde tanımlanır [5]. Bu potansiyel fonksiyonu için Schrödinger denklemi,

$$\frac{d^2 u_l(r)}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} u_l(r) + \frac{b^2}{r^n} u_l(r) = 0 \quad r \geq \rho, \quad (3.86)$$

dur ve genel çözümleri,

$$u_l(r) = A_l r^{1/2} J_\mu(x) + B_l r^{1/2} Y_\mu(x) \quad r \geq \rho \quad (3.87)$$

Bessel ve Neumann fonksiyonları ile ifade edilir. Bu çözümde sabitler

$$\mu = \frac{2l+1}{n-2} \quad (3.88)$$

ve

$$x \equiv x(r) = \frac{2b}{n-2} r^{-(n-2)/2} \quad (3.89)$$

ile verilir. Eş. 3.76'daki şart $n > 2l + 3$ (veya $0 < \mu < 1$) gerektirir. Aksine a_l tanımlamaz. Metodun denklemleri Bessel ve Neumann fonksiyonlarının standart özellikleri kullanılarak saçılma mesafesi

$$a_l = \pi \left(\frac{b}{n-2} \right)^{2\mu} \frac{\Phi_l + \cos(\pi\mu)}{\Gamma(\mu)\Gamma(\mu+1)} \quad (3.90)$$

ile tanımlanır. Burada

$$\Phi_l = - \frac{2\mu\rho^{2l+1}Y_\mu(x_s) - (\rho^{2l+1} - a_{ls})x_s Y_{\mu+1}(x_s)}{2\mu\rho^{2l+1}J_\mu(x_s) - (\rho^{2l+1} - a_{ls})x_s J_{\mu+1}(x_s)} \quad (3.91)$$

ve bu denklemde $x_s = x(\rho)$ ile tanımlanır. Benzer sonuçlar Gribakin [4] ve Fabrikant [78] tarafından bulunmuştur.

Eş. 3.90 ve Eş. 3.91, n ve l kombinasyonlarında oldukça basittir. Bunun için $\mu = 1/2$ olur. Daha sonra Bessel ve Neumann fonksiyonları trigonometrik fonksiyonların terimlerinde ifade edilir ve saçılma mesafesi,

$$a_l = \frac{b}{2l+1} \frac{1 + (x_s - y_{ls}) \tan(x_s)}{\tan(x_s) - (x_s - y_{ls})} \quad (3.92)$$

olur. Burada eşitlikte

$$y_{ls} = \frac{b}{(2l+1)a_{ls}} \quad (3.93)$$

olur. Birçok uygulamada uzun menzilli potansiyel kısa menzilli etkileşmenin pertürbasyonu olarak çözülür. Bu daima ρ 'nun yeterince geniş olmasını sağlar.

Böyle bir durumda b^2 'nin teriminde bir düzeltme dikkate alınır:

$$a_l \cong a_{ls} - b^2 \theta_l^{(n)}. \quad (3.94)$$

Burada

$$\theta_l^{(n)} = \frac{1}{2l+1} \rho^{-n-2l+1} \left(\frac{\rho^{2(2l+1)}}{n-2l-3} - \frac{2a_{ls}\rho^{2l+1}}{n-2} + \frac{a_{ls}^2}{n+2l-1} \right) \quad (3.95)$$

eşitliği b 'den bağımsızdır. Eş. 3.94'te düzeltme terimi oldukça küçüktür:

$$b^2 |\theta_l^{(n)}| \ll |a_{ls}|. \quad (3.96)$$

3.3.2. İki ters kuvvet potansiyelin süper pozisyonu

Açısal yörüngelerden gelen katkıyı içeren etkileşimleri tarif eden

$$V_L(r) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{b^2}{r^n} + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{c^2}{r^{2n-2}} \quad b > 0 \quad r \geq \rho \quad (3.97)$$

olarak tanımlanır ve $n > 2l+3$ sınırlamaya sahiptir [5]. Uygulamalarda c^2 hem pozitif hem de negatif olabilir. Bu potansiyel için radyal Schrödinger denklemi,

$$\frac{d^2 u_l(r)}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} u_l(r) + \frac{b^2}{r^n} u_l(r) - \frac{c^2}{r^{2n-2}} u_l(r) = 0 \quad r \geq \rho \quad (3.98)$$

dur ve genel çözümü,

$$u_l(r) = A_l' r^{(n-1)/2} M_{\kappa, \mu/2}(z) + B_l' r^{(n-1)/2} M_{\kappa, -\mu/2}(z) \quad (3.99)$$

Whittaker fonksiyonların cinsinden ifade edilir [79]. Bu çözümde sabitler,

$$\mu = \frac{2l+1}{n-2} \quad \kappa = \frac{b^2}{2(n-2)c} \quad (3.100)$$

ve

$$z \equiv z(r) = \frac{2c}{n-2} r^{-(n-2)} \quad (3.101)$$

ile verilir. $c^2 < 0$ için κ indeksi ve z değişkeni imajenerdir. Whittaker fonksiyonların özellikleri kullanılarak [79] saçılma mesafesi,

$$\begin{aligned} a_l = & \left(\frac{2c}{n-2} \right)^\mu [(\rho^{2l+1} a_{ls})(2\kappa - \mu + 1)M_{\kappa+1, -\mu/2}(z_s) + [\rho^{2l+1}(z_s - 2\kappa + \mu - 1) \\ & - a_{ls}(z_s - 2\kappa + \mu - 1)]M_{\kappa, -\mu/2}(z_s)] / (\rho^{2l+1} a_{ls})(2\kappa - \mu + 1)M_{\kappa+1, \mu/2}(z_s) \\ & + [\rho^{2l+1}(z_s - 2\kappa + \mu - 1) - a_{ls}(z_s - 2\kappa + \mu - 1)]M_{\kappa, \mu/2}(z_s)] \end{aligned} \quad (3.102)$$

olarak bulunur. Burada $z_s = (\rho)$ olur. Uygulamalarda $V_L(r)$ 'ye katkıda bulunan potansiyelin ikinci terim(c^2 ye orantılı) ilk terimden çok daha küçük olabilir. Bu yüzden ikinci terimin pertürbasyonu alınabilir. Bunun için

$$u_l(r) = \xi^{-(n-1)/(2n-4)} v_\lambda(\xi) \quad (3.103)$$

dönüşümü ve

$$\xi \equiv \xi(r) = r^{-(n-2)} \quad \lambda = \frac{1}{2}(\mu - 1), \quad (3.104)$$

fonksiyonları ile Schrödinger denklemi,

$$\frac{d^2 v_\lambda(\xi)}{d\xi^2} - \frac{\lambda(\lambda+1)}{\xi^2} v_\lambda(\xi) + \frac{\tilde{b}^2}{\xi} v_\lambda(\xi) - \tilde{c}^2 v_\lambda(\xi) = 0 \quad \zeta \leq \rho^{-(n-2)} \quad (3.105)$$

iyi bilinen Coulomb denkleminde dönüşür. Bu denklemde sabitler

$$\tilde{b} = \frac{b}{n-2} \quad \tilde{c} = \frac{c}{n-2} \quad (3.106)$$

şeklinde verilir. Düzenli(regular) ve düzenli(irregular) olmayan çözümler Bessel ve Neumann fonksiyonların serisinde ayrılır ve $\tilde{c}^2$ nin ilk mertebesinde,

$$\nu_{\lambda reg}(\xi) \cong x J_{\mu}(x) + \frac{\tilde{c}^2}{24\tilde{b}^4} x^3 [x J_{\mu+1}(x) - (1-\mu) J_{\mu+2}(x)] \quad (3.107)$$

ve

$$\nu_{\lambda irr}(\xi) \cong x J_{\mu}(x) + \frac{\tilde{c}^2}{24\tilde{b}^4} x^3 [x J_{\mu+1}(x) - (1-\mu) J_{\mu+2}(x)] \quad (3.108)$$

olur. Burada

$$x \equiv x(r) = \frac{2b}{n-2} r^{-(n-2)/2} = 2\tilde{b} \xi^{1/2} \quad (3.109)$$

olur. Sonuç olarak Eş. 3.98'in genel çözüm yaklaşık olarak

$$\begin{aligned} u_l(r) \cong A_l r^{1/2} \left\{ J_{\mu}(x) + c^2 \frac{(n-2)^2}{24b^4} x^2 [x J_{\mu+1}(x) - (1-\mu) J_{\mu+2}(x)] \right\} \\ + B_l r^{1/2} \left\{ Y_{\mu}(x) + c^2 \frac{(n-2)^2}{24b^4} x^2 [x Y_{\mu+1}(x) - (1-\mu) Y_{\mu+2}(x)] \right\} \quad r \geq \rho \end{aligned} \quad (3.110)$$

olarak verilir ve saçılma mesafesi,

$$a_l \cong \pi \left(\frac{b}{n-2} \right)^{2\mu} \frac{\Phi_l + \cot(\pi\mu)}{\Gamma(\mu)\Gamma(\mu+1)} \left[1 + c^2 \frac{(n-2)^2}{24b^4} \left(4\mu(1-\mu^2) \frac{\phi_l}{\Phi_l + \cot(\pi\mu)} \right) \right] \quad (3.111)$$

c^2 nin ilk mertebesinde bulunur. Φ_l , Eş. 3.91'de tanımlandı ve ϕ_l

$$\begin{aligned}
\phi_l = & -\Phi_l [x_s^2 [\rho^{2l+1} x_s^2 - a_{ls} (2\mu^2 - 2\mu + x_s^2)] J_\mu(x_s) \\
& + x_s [\rho^{2l+1} (1 + \mu) x_s^2 - a_{ls} (1 - \mu) (4\mu^2 - 4\mu + x_s^2)] J_{\mu+1}(x_s)] / 2\mu \rho^{2l+1} J_\mu(x_s) \\
& - (\rho^{2l+1} - a_{ls}) x_s J_{\mu+1}(x_s) - [x_s^2 [\rho^{2l+1} x_s^2 - a_{ls} (2\mu^2 - 2\mu + x_s^2)] Y_\mu(x_s) \\
& + x_s [\rho^{2l+1} (1 + \mu) x_s^2 - a_{ls} (1 - \mu) (4\mu^2 - 4\mu + x_s^2)] Y_{\mu+1}(x_s)] / 2\mu \rho^{2l+1} J_\mu(x_s) \\
& - (\rho^{2l+1} - a_{ls}) x_s J_{\mu+1}(x_s)]
\end{aligned} \tag{3.112}$$

ile verilir. Burada $x_s = x(\rho)$ olur. Eş. 3.111'deki saçılma mesafesi,

$$\left| c^2 \left| \frac{(n-2)^2}{24b^2} \right| 4\mu(1-\mu^2) + \frac{\phi_l}{\Phi_l + \cot(\pi\mu)} \right| \ll 1 \tag{3.113}$$

için geçerlidir. Daha fazla bir sadeleştirme için n ve l kombinasyonunda verilir ve $\mu = 1/2$ alınır. Bu durumda saçılma mesafesi,

$$a_l \cong \frac{b}{2l+1} \frac{1 + (x_s - y_{ls}) \tan(x_s)}{\tan(x_s) - (x_s - y_{ls})} \left[1 + c^2 \frac{(2l+1)^2}{12b^4} \left(3 + 2 \frac{\phi_l}{\Phi_l} \right) \right] \tag{3.114}$$

ile verilir ve burada

$$\begin{aligned}
\frac{\phi_l}{\Phi_l} = & \frac{1}{2} \frac{(2x_s^4 - 2x_s^3 y_{ls} - 3x_s y_{ls} + 3) \tan(x_s) - x_s (x_s^2 - 3x_s y_{ls} + 3)}{\tan(x_s) - (x_s - y_s)} \\
& - \frac{1}{2} \frac{(2x_s^4 - 2x_s^3 y_{ls} - 3x_s y_{ls} + 3) + x_s (x_s^2 - 3x_s y_{ls} + 3) \tan(x_s)}{1 + (x_s - y_s) \tan(x_s)}
\end{aligned} \tag{3.115}$$

ile verilir ve y_{ls} Eş. 3.93'de tanımlanır.

Sonuç olarak geniş ρ değerleri ve potansiyel Eş. 3.97 için kısa menzilli etkileşmenin pertürbasyonu olarak çözülür ve Eş. 3.102 b^2 ve c^2 nin mertebesinde yaklaşık bir formül ile yer değiştirilir:

$$a_l \cong a_{ls} - b^2 \theta_l^{(n)} + c^2 \theta_l^{(2n-2)}. \quad (3.116)$$

Bu eşitlikte $\theta_l^{(k)}$ Eş. 3.95 ile tanımlanır. Eş. 3.116'daki saçılma mesafesi,

$$\left| b^2 \theta_l^{(n)} - c^2 \theta_l^{(2n-2)} \right| \ll |a_{ls}| \quad (3.117)$$

için geçerlidir.

3.3.3. Atomik saçılmalar

Bu bölümde saçılma mesafesi için edilen analitik çözüm fonksiyonları atomik çarpışma problemine indirgenecektir. İki atomun çarpışması durumunda etkileşme potansiyelin uzun menzilli kısmı,

$$V(r) \cong -\frac{C_6}{r^6} - \frac{C_8}{r^8} - \frac{C_{10}}{r^{10}} + O(r^{-12}) \quad (3.118)$$

eşitliği ile verilir [80]. Potansiyel ifadesinde baskın terim $-C_6 r^{-6}$ 'dır. Baskın terimi dikkate analitik çözümü kolaylaştırılır. Diğer terimler bu terimin yanında oldukça küçük kalır. Bu yüzden potansiyel yaklaşık olarak

$$V_L = -\frac{\hbar^2 b^2}{2m r^6} \quad (3.119)$$

şeklinde alınabilir. Burada $b^2 = 2mC_6 / \hbar^2$ olur. s ve p kısmı dalgalar için saçılma mesafesi Eş. 3.90 ve Eş. 3.91'den

$$a_0 = \frac{2\pi b^{1/2}}{[\Gamma(1/4)]^2} \left[1 - \frac{\rho Y_{1/4}(b/2\rho^2) - (b/\rho^2)(\rho - a_{0s}) Y_{5/4}(b/2\rho^2)}{\rho J_{1/4}(b/2\rho^2) - (b/\rho^2)(\rho - a_{0s}) J_{5/4}(b/2\rho^2)} \right] \quad (3.120)$$

$$a_1 = -\frac{\pi b^{3/2}}{6[\Gamma(3/4)]^2} \left[1 - \frac{3\rho^3 Y_{3/4}(b/2\rho^2) - (b/\rho^2)(\rho^3 - a_{1s}) Y_{7/4}(b/2\rho^2)}{3\rho^3 J_{3/4}(b/2\rho^2) - (b/\rho^2)(\rho^3 - a_{1s}) J_{7/4}(b/2\rho^2)} \right] \quad (3.121)$$

bulunur. b^2 mertebesinde düzeltme dikkate alınabilir:

$$a_0 \cong a_{0s} - \frac{b^2}{3\rho^2} \left(1 - \frac{3a_{0s}}{2\rho} + \frac{3a_{0s}^2}{5\rho^2} \right) \quad (3.122)$$

$$a_1 \cong a_{1s} - \frac{b^2}{3\rho^2} \left(1 - \frac{a_{1s}}{2\rho^3} + \frac{a_{1s}^2}{7\rho^2} \right). \quad (3.123)$$

Potansiyelde diğer olasılık dikkate alınabilir:

$$V_L(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{b^2}{r^6} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{c^2}{r^{10}}. \quad (3.124)$$

Bu potansiyelde $b^2 = 2mC_6/\hbar^2$ ve $c^2 = -2mC_{10}/\hbar^2$ olur. Bu potansiyel için s ve p kısmı dalgalar için saçılma mesafelerin tam ifadesi,

$$a_0 = \frac{(c/2)^{1/4}[(\rho - a_{0s})(b^2/c + 3)M_{\kappa+1,-1/8}(c/2\rho^4) + [\rho(2c/\rho^4 - b^2/c - 3) - a_{0s}(2c/\rho^4 - b^2/c - 5)]M_{\kappa,-1/8}(c/2\rho^4)]}{[(\rho - a_{0s})(b^2/c + 5)M_{\kappa+1,1/8}(c/2\rho^4) + [\rho(2c/\rho^4 - b^2/c - 3) - a_{0s}(2c/\rho^4 - b^2/c - 5)]M_{\kappa,1/8}(c/2\rho^4)]} \quad (3.125)$$

$$a_1 = \frac{(c/2)^{3/4}[(\rho^3 - a_{1s})(b^2/c + 1)M_{\kappa+1,-3/8}(c/2\rho^4) + [\rho^3(2c/\rho^4 - b^2/c - 1) - a_{1s}(2c/\rho^4 - b^2/c - 7)]M_{\kappa,-3/8}(c/2\rho^4)]}{[(\rho^3 - a_{1s})(b^2/c + 7)M_{\kappa+1,3/8}(c/2\rho^4) + [\rho^3(2c/\rho^4 - b^2/c - 1) - a_{1s}(2c/\rho^4 - b^2/c - 7)]M_{\kappa,3/8}(c/2\rho^4)]} \quad (3.126)$$

olur. Burada $\kappa = b^2 / 8c$ ile verilir. Potansiyel katkıda bulunan ikinci terimin pertürbasyon olarak çözülürse c^2 mertebesinde bir düzeltme ile s kısmı dalgası için saçılma mesafesi,

$$a_0 \cong \frac{2\pi b^2}{[\Gamma(1/4)]^2} (\Phi_0 + 1) \left[1 + \frac{2c^2}{3b^4} \left(\frac{15}{16} - \frac{\phi_0}{\Phi_0 + 1} \right) \right] \quad (3.127)$$

olur. Burada

$$\Phi_0 = - \frac{\rho Y_{1/4}(b/2\rho^2) - (b/\rho^2)(\rho - a_{0s})Y_{5/4}(b/2\rho^2)}{\rho J_{1/4}(b/2\rho^2) - (b/\rho^2)(\rho - a_{0s})J_{5/4}(b/2\rho^2)} \quad (3.128)$$

ve

$$\begin{aligned} \varphi_0 = & -\frac{1}{16} \Phi_0 [(b^2 / \rho^4) [2b^2 / \rho^3 - a_{0s} (2b^2 / \rho^4 - 3)] J_{1/4}(b/2\rho^2) \\ & + (b/\rho^2) [5b^2 / \rho^3 - 3a_{0s} (b^2 / \rho^4 + 5)] J_{5/4}(b/2\rho^2)] / [\rho J_{1/4}(b/2\rho^2) \\ & - (b/\rho^2)(\rho - a_{0s}) J_{5/4}(b/2\rho^2)] \\ & - \frac{1}{16} [(b^2 / \rho^4) [2b^2 / \rho^3 - a_{0s} (2b^2 / \rho^4 - 3)] Y_{1/4}(b/2\rho^2) \\ & + (b/\rho^2) [5b^2 / \rho^3 - 3a_{0s} (b^2 / \rho^4 + 5)] Y_{5/4}(b/2\rho^2)] / [\rho Y_{1/4}(b/2\rho^2) \\ & - (b/\rho^2)(\rho - a_{0s}) Y_{5/4}(b/2\rho^2)] \end{aligned} \quad (3.129)$$

olur. p-kısmı dalgası için saçılma mesafesi,

$$a_1 \cong \frac{\pi b^{3/2}}{6[\Gamma(1/4)]^2} (\Phi_1 - 1) \left[1 + \frac{2c^2}{3b^4} \left(\frac{21}{16} - \frac{\phi_1}{\Phi_1 + 1} \right) \right] \quad (3.130)$$

olur. Burada

$$\Phi_1 = -\frac{3\rho^3 Y_{3/4}(b/2\rho^2) - (b/\rho^2)(\rho^3 - a_{1s})Y_{7/4}(b/2\rho^2)}{3\rho^3 J_{3/4}(b/2\rho^2) - (b/\rho^2)(\rho^3 - a_{1s})J_{7/4}(b/2\rho^2)} \quad (3.131)$$

ve

$$\begin{aligned} \varphi_1 = & -\frac{1}{16} \Phi_1 [(b^2/\rho^4)[2b^2/\rho - a_{1s}(2b^2/\rho^4 - 3)]J_{3/4}(b/2\rho^2) \\ & + (b/\rho^2)[7b^2/\rho - a_{1s}(b^2/\rho^4 + 21)]J_{7/4}(b/2\rho^2)] / [3\rho^3 J_{3/4}(b/2\rho^2) \\ & - (b/\rho^2)(\rho^3 - a_{1s})J_{7/4}(b/2\rho^2)] \\ & -\frac{1}{16} [(b^2/\rho^4)[2b^2/\rho - a_{1s}(2b^2/\rho^4 - 3)]Y_{3/4}(b/2\rho^2) \\ & + (b/\rho^2)[7b^2/\rho - a_{1s}(b^2/\rho^4 + 21)]Y_{7/4}(b/2\rho^2)] / [3\rho^3 J_{3/4}(b/2\rho^2) \\ & - (b/\rho^2)(\rho^3 - a_{1s})J_{7/4}(b/2\rho^2)] \end{aligned} \quad (3.132)$$

olur. Sonuç olarak b^2 ve c^2 mertebelerinde düzeltme formülleri,

$$a_0 \cong a_{0s} - \frac{b^2}{3\rho^2} \left(1 - \frac{3a_{0s}}{2\rho} + \frac{3a_{0s}^2}{5\rho^2} \right) + \frac{c^2}{7\rho^7} \left(1 - \frac{7a_{0s}}{4\rho} + \frac{7a_{0s}^2}{9\rho} \right) \quad (3.133)$$

ve

$$a_1 \cong a_{1s} - \frac{b^2}{3\rho^2} \left(1 - \frac{3a_{1s}}{2\rho^3} + \frac{a_{1s}^2}{7\rho^6} \right) + \frac{c^2}{15\rho^5} \left(1 - \frac{7a_{1s}}{4\rho^3} + \frac{5a_{1s}^2}{11\rho^6} \right) \quad (3.134)$$

ile verilir.

3.4. Kuantum Kusur Teorisi

Soğuk atomik buharında BEC'nin gerçekleştirilmesi ve Lazer ve Buharlaştırarak soğutmadaki gelişmeler, soğuk atom çarpışmalarında teoriksel ilgiyi motive etmiştir. Özellikle alkali-metal atom sistemindeki önemli gelişmelere rağmen, çalışmaların çoğu nümeriksel veya spesifik teoriksel çözümlere yönelmektedir. Bu teorilerden bir tanesi olan Atomik çarpışmaların Kuantum Kusur teorisi Bo Gao tarafından ortaya

konmuştur [81, 82, 83] Çekici $1/r^6$ potansiyeli için Schrödinger denkleminin tam çözümü temelinde teori moleküler bağ seviyelerin ve atom-atom saçılma özelliklerin sistematik yorumlanmasını sağlar. Çekici $1/r^6$ potansiyeli için Schrödinger denklemin tam çözümü kaynak [6]'da ayrıntılı olarak tartışılmıştır. Bu bölümde Gao tarafından QDT teorisinin genel yapısı ve sonuçlarını ayrıntıya girmeden tartışıldı. Bununla ilgili sonuçlarımızı alkali atomlar (K+K, Rb+Rb ve K+Rb) için sonuç bölümünde vereceğiz. QDT asimptotik olarak çekici $1/r^6$ potansiyeli ile etkileşen bütün iki atomlu sistemlerin genel karakteristik özelliklerini sunar. Tek kanal durumunda, uzun menzilde Çekici $1/r^6$ potansiyeli içeren herhangi bir potansiyelin bağ enerji düzeyleri, skala edilen enerjinin evrensel fonksiyonu ve kısa- menzilli etkileşmelerle tanımlanan enerjinin analitik fonksiyonları arasında çakışık noktalar ile formüle edilir. Eşik yukarısında (uzun menzilli potansiyel bölgesinde) saçılma teorisi, saçılma mesafesi ve etki menzili teriminde geleneksel parametrelerden çok yararlı saçılma faz kayması ve tesir kesitlerin enerji parametresini sağlar. Metot tam olarak uzun menzilli potansiyelin etkisi ile ortaya çıkan enerji bağımlılığını içerir. Ayrıca metot s-dalgaların dışında daha yüksek kısmı dalgaları da içerir. Fakat daha yüksek kısmı dalgalar için saçılma mesafesi ve etki mesafesi tanımlanamaz. Bunun yanında teori bağlı ve sürekli özellikler arasında bir bağ kurar ve saçılma parametrelerinden deneysel bağ enerjisi ve C_6 sabitlerine bağlı saçılma mesafesi ve etki mesafesini hesaplamak mümkün olur [6].

İki atom sisteminde belirli bir r_0 uzaklığının ötesinde etkileşme tam olarak çekici $1/r^6$ potansiyeli ile temsil edilir(r_0 atomlara bağlı ve tipik olarak $10-20a.u.$ arasındadır). $r \gg r_0$ da çekici $1/r^6$ potansiyeli için Schrödinger denklemin tam çözümün dalga fonksiyonu,

$$u_{el}(r) = A_{el} [f_{el}^0(r) - K_l^0 g_{el}^0(r)] \quad (3.135)$$

ile yazılır. Burada f^0 ve g^0 fonksiyonları, $1/r^6$ potansiyeli için merkeze yakın normalize lineer bağımsız çözüm çiftidir [84]. Referans çift fonksiyonlar için r_0 'da

ve ötesinde dalga fonksiyonların logaritmik türevlerine bağlı sözde kısa menzilli K matrisi (K^0), enerjinin analitik fonksiyonu ve kısa menzilli etkileşeme ile tanımlanır [6].

Eşğin altında f^0 ve g^0 , in asimptotik formları,

$$\begin{aligned} f_{\varepsilon l}^0(r) &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} (2\pi\kappa)^{-1/2} [W_{f-} e^{\kappa r} + W_{f+} e^{\kappa r}] \\ g_{\varepsilon l}^0(r) &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} (2\pi\kappa)^{-1/2} [W_{g-} e^{\kappa r} + W_{g+} e^{\kappa r}] \end{aligned} \quad (3.136)$$

analitik fonksiyonlar olarak hesaplanır. Burada $\kappa = (2\mu|\varepsilon|/\hbar^2)^{1/2}$ ve W fonksiyonları,

$$\begin{aligned} W_{f-} &= [(X_{\varepsilon l}^2 + Y_{\varepsilon l}^2) \sin(\pi\nu)]^{-1} \{[\alpha_{\varepsilon l} \sin(\pi\nu) - \beta_{\varepsilon l} \sin(\pi\nu)] G_{\varepsilon l}(-\nu) + \beta_{\varepsilon l} G_{\varepsilon l}(\nu)\}, \\ W_{f+} &= [(X_{\varepsilon l}^2 + Y_{\varepsilon l}^2)]^{-1} 2[\alpha_{\varepsilon l} \sin(2\pi\nu) - \beta_{\varepsilon l} \sin(2\pi\nu) - \beta_{\varepsilon l}] G_{\varepsilon l}(-\nu), \\ W_{g-} &= [(X_{\varepsilon l}^2 + Y_{\varepsilon l}^2) \sin(\pi\nu)]^{-1} \{[\alpha_{\varepsilon l} \sin(\pi\nu) + \beta_{\varepsilon l} \sin(\pi\nu)] G_{\varepsilon l}(-\nu) - \beta_{\varepsilon l} G_{\varepsilon l}(\nu)\}, \\ W_{g+} &= [(X_{\varepsilon l}^2 + Y_{\varepsilon l}^2)]^{-1} 2[\alpha_{\varepsilon l} \sin(2\pi\nu) + \beta_{\varepsilon l} \sin(2\pi\nu) + \beta_{\varepsilon l}] G_{\varepsilon l}(-\nu), \end{aligned} \quad (3.137)$$

ile tanımlanır. $u_{\varepsilon l}(r \rightarrow \infty) \rightarrow 0$ için bağ sevilerin sınır şartı,

$$X_l(\Delta) = K_l^0(\varepsilon) \quad (3.138)$$

olarak verilir. Belirli kuantum sayıları için (l) $\chi(\Delta) = W_{f-}/W_{g-}$ fonksiyonu, skala enerjisinin $\Delta \equiv (1/16(\varepsilon/(\hbar^2/2\mu)(1/\beta_6)^2))$ evrensel fonksiyonudur. Burada β_6 asimptotik $1/r^6$ potansiyeline bağlı uzunluk skalasıdır ve $\beta_6 = (2\mu C_6/\hbar^2)^{1/4}$ ile C_6 teriminde tanımlanır. χ_l fonksiyonu, kısa menzilli veya C_6 sabitlerin davranışlarına rağmen uzun menzilde çekici $1/r^6$ potansiyeli için aynı duyarlılıkta evrensel bir özellik taşır.

Eşik yukarısında saçılma faz kayması,

$$K_l \equiv \tan \delta_l = (K_l^0 Z_{gg} - Z_{fg})(Z_{ff} - K_l^0 Z_{gf})^{-1} \quad (3.139)$$

olarak yazılır. Burada Z fonksiyonu skala enerjisinin (Δ) fonksiyonunda evrensel fonksiyon olarak ayarlanmıştır ve eşik yukarısında f^0 ve g^0 fonksiyonların asimptotik davranışlarını karakterize eder [6].

QDT formülasyonu Eş. 3.138 ve Eş. 3.139’da verilir. Bu formülasyon hem bağlı seviye spektrumu hem de sürekli saçılma özelliklerinde kısa ve uzun menzilli etkileşmelerin rollerini ayırır. Bu ayrım birkaç neden için yararlıdır. Öncelikle yeteri derece geniş açısal momentum için saçılma faz kayması ağırlıklı olarak uzun-menzilli etkileşme ile tanımlanır. Bu durum, Eş. 3.139’da Z fonksiyonlarının bağlı genliğe yansır. İkinci olarak bu ayrım ile K^0 enerjinin analitik fonksiyonu ve eşığe göre türetilerek kolayca parametrize edilir. Bu yüzden K^0 , bağ spektrumu ve sürekli özellikleri arasında bir bağlantı kurar. Eşik yanında χ ve Z fonksiyonları $(\hbar^2/2\mu)(1/r_0)^2$ skalasında K^0 enerjisi ile değişirken $(\hbar^2/2\mu)(1/\beta_0)^2$ skalasında enerji ile değişir. QDT formülasyonu ve K^0 parametresi uzun menzilli etkileşme ağır olduğu zaman ($\beta_0 \gg r_0$) özellikle yararlıdır. Bu durumda eşik değere yakın enerji bağımlılığı bütün l ’ler için uzun menzilli etkileşme ile baskındır. Aynı şartlarda bütün alkali metal atomları için $-C_6/r^6$ bileşeni ve merkez potansiyel ($l > 0$) geniş uzunluklarda bir potansiyel engelini oluşturur ve kısa menzilli etkileşme ihmal edilir. Bu engelin şekli yalnızca uzun menzilli etkileşme ile tanımlandığında o doğrultuda dalga fonksiyonu ‘şekil’ rezonansı görünümünün de tamamıyla Z fonksiyonuna dahil olur. Bu durum çekici $1/r^6$ potansiyeli için tam çözümden kaynaklanır. Hatta Z fonksiyonu [6] tam olarak hesaplanmasına rağmen Eş. 3.139’un küçük Δ ifadesini görmek mümkün olur. Δ_l soğuk atom çarpışmaların enerji bağımlılığının basit analitik bağımlılığını verir ve geleneksel saçılma mesafesi ve etki mesafesi parametreleri ile bağlantı kurar. Küçük Δ için faz kaymaları,

$$\begin{aligned}
(k\beta_6)\cot\delta_{l=0} = & -\{K_{l=0}^0 + (1/3)(k\beta_6)^2 + (1/900)[K_{l=0}^0 - (30\pi/11)](k\beta_6)^4 - (2\pi^2/15) \\
& [\Gamma(1/4)]^2(K_{l=0}^0 - 1)(k\beta_6)^5 + (\pi/90)[K_{l=0}^0 - (181/70\pi)](k\beta_6)^6\} \{2\pi[\Gamma(1/4)]^2 \\
& \{1 - (4/15)(k\beta_6)^4 \ln(k\beta_6) + (2/15)[(22/5) + \ln 2 - \gamma] \times (k\beta_6)^4\} \{ (K_{l=0}^0 - 1) + (1/3) \\
& (K_{l=0}^0 + 1)(k\beta_6)^2 + (1/900)[(K_{l=0}^0 - 1) + (30\pi/11)(K_{l=0}^0 + 1)](k\beta_6)^4 - (\pi/90) \\
& [(K_{l=0}^0 - 1) + (181/70\pi)(K_{l=0}^0 + 1)](k\beta_6)^6\} - (\pi/15)[K_{l=0}^0 + (1/3)(k\beta_6)^2](k\beta_6)^3\}^{-1}
\end{aligned} \tag{3.140}$$

$$\begin{aligned}
(k\beta_6)^3 \cot\delta_{l=1} = & [K_{l=0}^0 + (1/5)(k\beta_6)^2] \{(\pi/18)[\Gamma(3/4)]^2[K_{l=0}^0 + 1] + (1/5)(K_{l=0}^0 - 1)(k\beta_6)^2\} \\
& - (\pi/35)K_{l=0}^0(k\beta_6)\}^{-1},
\end{aligned} \tag{3.141}$$

$$\tan \delta_{l \geq 2} = (3\pi/32) \{(l+1/2)^2 - 4\} [(l+1/2)^2 - 1]^{-1} (k\beta_6)^4, \tag{3.142}$$

ile verilir. Bu denklemde γ euler sabitidir ve K_l^0 kısa menzilli K matrisidir. Faz kayması için bu ifadeler tesir kesitlerin k^6 mertebeye kadar tutarlı olduğunu verir. Bu ifadeler bütün kısmi dalgalar için verilir. $l \geq 2$ için bu sonuç Levy ve Keller sonucu ile uyumludur [85]. Soğuk çarpışmalara en büyük katkısı yapan $l = 0$ ve $l = 1$ 'nin faz kaymaları Eş. 3.142 kapalı denklemde verilmez.

Sırasıyla Eş. 3.140 ve Eş. 3.141, standart etki menzili ifadesi ile karşılaştırılarak $1/r^6$ potansiyeli için saçılma mesafesi s ve p dalgaları için bir tanımlamaya sahip olur. Etki menzili yalnız s -dalgaları için tanımlamaya sahip olur. Aksine K_l^0 ve Eş. 3.139 bütün l 'ler için iyi bir tanımlanır. s ve p dalga saçılma mesafeleri $\varepsilon = 0$ ' da $K_l^0(\varepsilon)$ için

$$a_{l=0} = \frac{2\pi}{[\Gamma(1/4)]^2} \frac{K_{l=0}^0(0) - 1}{K_{l=0}^0(0)} \beta_6 \tag{3.143}$$

$$a_{l=1} = -\frac{\pi}{18[\Gamma(3/4)]^2} \frac{K_{l=0}^0(0) + 1}{K_{l=0}^0(0)} \beta_6^3 \tag{3.144}$$

elde edilir. $\varepsilon = 0$ 'da $K_{l=0}^0$ için s - dalga etki menzili,

$$r_{el=0} = \frac{[\Gamma(1/4)]^2}{3\pi} \frac{[K_{l=0}^0(0)]^2 + 1}{[K_{l=0}^0(0) - 1]^2} \beta_6 + \frac{[\Gamma(1/4)]^2}{\pi} \frac{[K_{l=0}^0(0)](\hbar^2/2\mu)(1/\beta_6)^2}{[K_{l=0}^0(0) - 1]^2} \beta_6, \quad (3.145)$$

ifadesi ile bulunur. $\beta \gg r_0$ şartı altında (alkali atomlar için geçerlidir $(\hbar^2/2\mu)(1/\beta_6)^2$ enerji menziline göre $K_{l=0}^0$ değişimi küçük ve Eş. 3.145’de ikinci terim ihmal edilir. Bu durumda saçılma mesafesi ve etki menzili bağımsızdır. Fakat Eş. 3.143 ve Eş. 3.145’e göre bu parametreler birbirine bağlıdır. Bu bağlantı $^7\text{Li}_2$ ve $^{23}\text{Na}_2$ ’ün singlet ve triplet durumları için Cote’nin nümeriksel hesaplarından kontrol edilmekte ve mükemmel uyumları görülmekte [63]. Örneğin $a^3\Sigma_u^+$ seviyede $^{23}\text{Na}_2$ [75] için Cote ve Dalgarno tarafından hesaplanılan 77,2860a.u. saçılma mesafesi kullanarak Eş. 3.143 ve Eş. 3.145’den $r_e = 62,378a.u.$ olarak bulunur ve 62,0a.u. sonucu ile oldukça iyi tutarlıdır [75]. Bu sonuç yalnız r_e ’nin QDT teori ile kontrolüdür.

3.5. Nümerik Yöntem

3.5.1. Saçılma problemin formülasyonu

Saçılma problemi için Schrödinger denklemin çözümü rölativistik olmayan kuantum mekaniğinin merkez problemidir. Basit bir durum dış potansiyelde spinsiz bir parçacığın hareketi çalışılmasıdır [7, 87]. Bu durumda zamandan bağımsız Schrödinger denklemi,

$$H\Psi(r) = E\Psi(r) \quad (3.146)$$

ile verilir. Burada hamilton operatörü,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(r) \quad (3.147)$$

denklemleri ile verilir. Parçacık potansiyel ile saçılırsa enerji E herhangi pozitif değeri ile verilir. Parçacık potansiyel ile bağlı ise E negatif olur ve yalnız kesikli değerler alır.

Ayrıca iki soğuk parçacığın doğal saçılma denklemi Schrödinger denklemi (Eş. 3.146) ile verilir. Bu durumda r iki parçacığın vektör ayrımı, μ indirgenmiş kütle ve E kütle sisteminin merkezinde enerjidir.

Eş. 3.146'nın analitik çözümü yalnız birkaç potansiyel için bilinir. Genelde denklem nümerik olarak çözülmekte ve küresel simetrik potansiyel için bu çözümü yapmak oldukça kolaydır. Merkez potansiyele sınırlama küresel koordinatlara (r, θ, φ) uygun olur. Schrödinger denklemi daha sonra ayrılabilir ve radyal Schrödinger denklemi elde edilir.

Açısal hareket için diferansiyel denklem potansiyeli $V(r)$ içermez. Çözümü küresel harmoniklerdir $Y_{lm}(\theta, \varphi)$. Radyal hareket için diferansiyel denklemi,

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} u_l(r) + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{r^2} u_l + V(r)u_l(r) = Eu_l(r) \quad (3.148)$$

ile verilir. Küresel harmonikler $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ ve radyal denklem u_l kullanarak Schrödinger denklemin genel çözümü kısmi dalgaların toplamaları olarak ifade edilir:

$$\psi(r) = \sum_{l,m} c_{l,m} \frac{1}{r} u_l(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi). \quad (3.149)$$

Schrödinger denklemi her bir kısmi dalga ile sağlanır ve sonuç olarak onların toplamalarıdır. Eş. 3.148 ve Eş. 3.149'da oluşan l niceliği açısal momentum kuantum sayısıdır. Eş. 3.149'daki m manyetik kuantum sayısıdır.

Açısal momentum kuantum sayısında toplam dalga fonksiyonunun çözümlenmesi kesin avantajlar getirir. Bağlı seviyeler yalnız birkaç kısmı dalgayı içerir. Saçılma seviyeleri için birkaç kısmı dalgadan daha fazlası dikkate alınır. Fakat düşük enerjilerde seyreltik gazdaki atomik saçılma için bir kaç tane kısmı dalga saçılmaya katkıda bulunur. Coulomb potansiyelden hariç çoğu fiziksel potansiyel kısa menzillidir. Sınırlı enerjide ve geniş açısal momentumda parçacıklar etkileşme bölgesinde bulunmazlar. Radyal denklemde bu ikinci terimde ifade edilir. Bu terim merkez $\hbar^2 l(l+1)/(2\mu r^2)$ engelini içerir. Merkez engel l 'nin geniş değerleri için ağır bir potansiyel gibi davranır. $V(r)$ bu karşılaştırmada ihmal edilebilir olur. $V(r)$ ihmal edildiği zaman radyal denklem serbest Schrödinger denklemi olur ve analitik çözümü bilinir.

Radyal Schrödinger denklemi ikinci mertebe diferansiyel denklemdir. Dolayısıyla çözüm için iki sınır şartına ihtiyacımız vardır. Bu şartlardan biri olasılık yoğunluğunun $|\psi|^2$ koordinat sistemin merkezinde sınırlı kalması zorunluluğu ile bulunur. Olasılık yoğunluğu,

$$|\psi(r)|^2 = \left| \sum_{l,m} \frac{u_l}{r} c_{l,m} Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) \right|^2 \quad (3.150)$$

ile verilir. Olasılık yoğunluğu gelişigüzel bir sabit için $c_{l,m}$ merkezde sınırlı olur.

Birinci sınır şartı,

$$u_l(0) = 0 \quad (3.151)$$

şeklinde verilir. İkinci sınır şartı dalga fonksiyonun $u_l(r)$ normalizasyonundan doğar. Burada bağlı seviye çözümleri ($E < 0$) ve saçılma çözümleri ($E > 0$) arasında bir ayırım yapılmalı.

Bağlı seviyede parçacığın hareketi(veya iki parçacığın bağıl hareketi) sonlu uzayda sınırlanır. Örneğin dalga fonksiyonu bire göre normalize edilmeli. İkinci sınır şartı olarak herhangi bir seçilen sayıya eşit dalga fonksiyonuna set edilebilir $r_0 (\neq 0)$,

$$u_l(r_0 + h) = (r_0 + h)^{l+1} \quad (3.152)$$

Radyal denklemin çözümünü bu sınır şartı aracılığı ile nümerik olarak çözülür. Potansiyelin menzilinden daha büyük r değerleri için dalga fonksiyonu,

$$u_l(r) \rightarrow a_l e^{-\kappa r} + b_l e^{+\kappa r} \quad (3.153)$$

forma sahip olur. Burada

$$\kappa = \left(\frac{2\mu(-E)}{\hbar^2} \right)^{1/2} \quad (3.154)$$

Normalizasyon şartı,

$$\int_0^{\infty} |u_l(r)|^2 dr = \text{sonlu} \quad (3.155)$$

b_l 'nin sıfır olması durumunda geçerlidir. Aksi taktirde dalga fonksiyonu $u_l(r)$, r 'nin büyük değerleri için geniş bir değerde olur. b_l sabiti, radyal denklemde enerjinin fonksiyonudur. Bağ enerjisi (E_l) için, b_l , E 'nin fonksiyonu olarak sıfır değerini alabilir:

$$b_l(E_l) = 0 \quad (3.156)$$

R 'nin geniş değerleri için dalga fonksiyonu, enerjideki önemli değişimler için negatif ve pozitif değerler arasında değişir. Değişimin olduğu bağ enerji değerlerinden

birisidir E_i . $E = E_i$ için dalga fonksiyonu $u_l(E, r)$ normalize olur. Pratiksel hesaplama için integral Eş. 3.155'de üst integral sınırını R değeri ile yer değiştirilmeli. Bu R değeri aşırı derece geniş değildir. Çünkü çözüm geniş r ' ler için nümeriksel olarak kararsız olur. Gelişi güzel ikinci sınır şartından dolayı elde edilen bağlı seviye fonksiyonu $u_l(E_i, r)$ normalize edilir. Fakat bire normalize edilmez. Asimptotik dalga fonksiyonun katsayısı N düşünülerek dalga fonksiyonu,

$$\int_0^R |u_l(E_i, r)|^2 dr = N^2 \quad (3.157)$$

integrali ile

$$\hat{u}_l(E_i, r) = \frac{1}{N} u_l(E_i, r) \quad (3.158)$$

şeklinde normalize edilir. Schrödinger denklemin doğrusallığından dolayı ayrıca $\hat{u}_l(E_i, r)$ denklemini sağlar.

Saçılma çözümleri için enerji E , verilen enerjinin fiziksel önemine sahip ve herhangi bir pozitif değer alır. Sınır şartları Eş. 3.150 ve Eş. 3.151 ile çözüm $u_l(E, r)$ elde edilir. Ancak asimptotik olarak sıfır olmaz. Potansiyel uzun menzilli bileşene sahip olmadığında dalga fonksiyonu,

$$u_l(E, r) \rightarrow N \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) \quad (3.159)$$

asimptotik forma sahip olur. Burada dalga sayısı;

$$k = \left(\frac{2\mu E}{\hbar^2}\right)^{1/2} \quad (3.160)$$

ile verilir. İkinci sınır şartı N sabitinin değerinin bulunmasına yardımcı olur. Daha sonra dalga fonksiyonu $1/N$ ile çarpılır. Dolayısıyla dalga fonksiyonu bire eşit asimptotik genliğe sahip olur. Dalga fonksiyonundaki δ_l niceliği saçılma faz olarak isimlendirilir. Saçılma fazı enerjinin fonksiyonudur. Ayrıca fonksiyonun argümanında $l\pi/2$ açısal momentum engeli ile üretilen faz kaymasıdır.

3.5.2. Fox-Goodwin (Numerov) Metodu

Radyal Schrödinger Eş. 3.148

$$u''(r) + w(r)u(r) = 0 \quad (3.161)$$

denklemine eşit olur. Burada

$$w(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \quad (3.162)$$

kısaltması kullanılır. Bu şekilde l indeksi kısaltma içine alınır. Eş. 3.161'in nümeriksel davranışı için dalga fonksiyonun ikinci türevi $u''(r)$ sonlu fark denklemi ile yer değiştirilir. Nümeriksel ikinci türev kullanılarak,

$$u''(r) = \frac{u(r+h) + u(r-h) - 2u(r)}{h^2} + O(h^2) \quad (3.163)$$

radyal denklem

$$\frac{u(r+h) + u(r-h) - 2u(r)}{h^2} + w(r)u(r) = 0 \quad (3.164)$$

veya

$$u(r+h) = 2u(r) - u(r-h) - h^2 w(r)u(r) \quad (3.165)$$

şekline dönüşür. Sınır şartları

$$u(0) = 0 \quad (3.166)$$

ve

$$u_l(r_0 + h) = (r_0 + h)^{l+1} \quad (3.167)$$

kullanılarak ve Eş. 3.165 ile bunların ilki $u(r_0 + 2h)$ şeklinde tanımlar. Bu şekilde $u(r_0 + h)$ ve $u(r_0 + 2h)$ 'dan $u(r_0 + 3h)$ ve devamı tekrar adımlarla tanımlanır. Bu yüzden $u(r)$ adımın h genişliği ile eşit nokta aralıklarda bulunur. Eş. 3.165'de,

$$O(h) = -\frac{h^2}{12} u^{(4)} \quad (3.168)$$

hata terimi ve Eş. 3.163'deki nümerik ikinci türev dikkate alınarak,

$$\frac{u(r+h) + u(r-h) - 2u(r)}{h^2} = u''(r) + \frac{h^2}{12} u^{(4)}(r) + O(h^4) \quad (3.169)$$

elde edilir. Bu denklemde, Eş. 3.161'deki u'' yer değiştirilir ve düzeltme terimi sağ tarafta bırakılırsa;

$$\frac{u(r+h) + u(r-h) - 2u(r)}{h^2} + w(r)u(r) = \frac{h^2}{12} u^{(4)}(r) + O(h^4) \quad (3.170)$$

sonucu elde edilir. Bu metodu elde etmede Eş. 3.161'e

$$1 + \frac{h^2}{12} \frac{d^2}{dr^2} \quad (3.171)$$

operatörü uygulanır. Buna göre

$$\left(1 + \frac{h^2}{12} \frac{d^2}{dr^2}\right) u''(r) + w(r)u(r) + \frac{h^2}{12} \frac{d^2}{dr^2} (w(r)u(r)) = 0 \quad (3.172)$$

olur. Daha sonra ilk terimde Eş. 3.170 kullanılır:

$$\frac{u(r+h) + u(r-h) - 2u(r)}{h^2} + O(h^4) + w(r)u(r) + \frac{h^2}{12} \frac{d^2}{dr^2} (w(r)u(r)) = 0 \quad (3.173)$$

Bu denklemde h^4 ve yukarıdaki terimler ihmal edilir. Bu denklemde $(u(r)w(r))$ 'nin ikinci türevi Eş. 3.158'in uygun bir tipi ile yer değiştirilir. Çünkü Eş. 3.173'deki $h^2/12$ faktörü h^4 mertebede ilk düzeltme terimi olur. Buna göre algoritma:

$$\begin{aligned} & \frac{u(r+h) + u(r-h) - 2u(r)}{h^2} + w(r)u(r) + \\ & \frac{w(r+h)u(r+h) + w(r-h)u(r-h) - 2w(r)u(r)}{12} = 0 \end{aligned} \quad (3.174)$$

veya

$$u(r+h) = \frac{2u(r) - u(r-h) - (h^2/12)(10w(r)u(r) + w(r-h)u(r-h))}{1 + (h^2/12)w(r+h)} \quad (3.175)$$

olur. Bu eşitlik, Eş. 3.165'in yerini alır ve h mesh genişliği ile eşit ızgara (grid) noktalarda $u(r)$ fonksiyonun hesaplanmasına izin verir. Bu algoritma literatürde diğer bir ismi ile nümerik olarak bilinir [87].

3.5.3. Faz kaymasının nümeriksel tanımlanması

Faz kaymasını bulmak için iki atomun bağıl hareketini iyi tanımlayan Schrödinger dalga denklemini yazmak gerekir,

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi(r) + V(r) = E\psi(r). \quad (3.176)$$

Burada r atomlar arası vektörel uzaklıktır ve μ iki atomun indirgenmiş kütledir. Etkileşme potansiyeli için denklem nümeriksel olarak çözülür. Küresel koordinatlarda açısal momentum kısmı dalgalara bağlı dalga fonksiyonu,

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = \sum_{l,m} c_{l,m} \frac{1}{r} u_l(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (3.177)$$

Radyal dalga fonksiyonu $u_l(r)$ nümerik olarak çözülür. $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ küresel harmoniklerdir.

Radyal dalga denklemi sınırlı $[0, b]$ aralığında çözülmektedir. Fakat $\psi(r)$ bütün uzayda çözülmesi gerekir. Bunun için $[b, \infty]$ aralığında radyal dalga denklemin çözümü belirlenir.

$V(r)$ potansiyeli geniş r değerleri için ağır bir şekilde azalır ve b değeri çok geniş seçilir. Böylece $r > b$ için potansiyel ihmal edilir. Potansiyelin sıfır olduğu $[b, \infty]$ aralıkta serbest radyal denklem,

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} \bar{u}_l(r) + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{r^2} \bar{u}_l(r) = E \bar{u}_l(r) \quad (3.178)$$

şeklinde yazılır. Bu denklemin çözümleri analitik olarak iyi bilinir. Ayrıca $[r_0, b]$ arasında $u_l(r)$ çözümleri nümerik olarak çözülür.

Çözümlerin katkısı $l = 0$ durumunda basit olarak bulunabilir. $[b, \infty]$ aralığında ve $l = 0$ için Eş. 3.178'in genel çözümü,

$$\bar{u}_0(r) = a_0 \sin(kr + \delta_0) = a_0 [\cos(\delta_0) \sin(kr) + \sin(\delta_0) \cos(kr)] \quad (3.179)$$

ile verilir. Burada

$$k = \frac{(2\mu E)^{1/2}}{\hbar} \quad (3.180)$$

dalga sayısıdır.

$r = b$ 'de radyal denklemin $u_0(r)$ çözümü, serbest $\bar{u}_0(r)$ 'ün dahilinde birinci türevi ile sürekli olmalı. Ancak $u_0(r)$ 'ın türevi bizim için bilinemez. Bunun yerine türev hesabından kaçınarak basit olarak $u_0(r)$ ve $\bar{u}_0(r)$ fonksiyonları $[0, b]$ aralığında son $b - h$ ve b iki adım noktasında eşitlenir:

$$u_0(b - h) = a_0 [\cos(\delta_0) \sin(k(b - h)) + \sin(\delta_0) \cos(k(b - h))], \quad (3.181)$$

$$u_0(b) = a_0 [\cos(\delta_0) \sin(kb) + \sin(\delta_0) \cos(kb)] \quad (3.182)$$

Bu iki denklemden a_0 ve δ_0 hesaplanır. $\delta_0 \pmod{\pi}$ için

$$\tan(\delta_0) = \frac{\sin(k(b - h))u_0(b) - \sin(kb)u_0(b - h)}{-\cos(k(b - h))u_0(b) + \cos(kb)u_0(b - h)} \quad (3.183)$$

denklemini elde edilir. δ_0 , $l = 0$ açısal momentumun saçılma faz kaymasıdır ve soğuk atomik çarpışmalarda özel bir öneme sahiptir. Orijinde fiziksel sınır şartı ile $l = 0$ için serbest radyal denklemin çözümü $a_0 \sin(kr)$ olur ve δ_0 asimptotik bölgede serbest parçacık ile karşılaştırılan saçılma çözümünün faz kaymasıdır. Faz kayması π modunda alınırsa $\sin(\delta_0)$ ve $\cos(\delta_0)$ işaretlerinden ayırt edilebilir. Daha sonra a_0 genliği Eş. 3.182'den hesaplanır. a_0 genliği $u_0(r)$ normalize durumuna bağlıdır.

Çözümü $l \neq 0$ için genişletilebilir ve Eş. 3.178'in genel çözümü

$$\bar{u}_l(r) = a_l k r [\cos(\delta_l) j_l(kr) - \sin(\delta_l) n_l(kr)] \quad (3.184)$$

ile verilir. Burada $j_l(kr)$ ve $n_l(kr)$ düzenli ve düzenli olmayan küresel Bessel fonksiyonlarıdır. $R_l(r) = (1/r)\bar{u}_l(r)$ tipinde radyal fonksiyonlarıdır. Burada düzenliden kasıt $j_l(kr)$ fonksiyonları koordinatların orijininde fiziksel sınır şartlarını sağlar. Halbuki $n_l(kr)$ fonksiyonları orijinde yakınsar ve asimptotik olarak düzenli çözümlere bağlı olarak $-\pi/2$ faz kaymalarına sahip olur.

Eş. 3.179, Eş. 3.184 ile yer değiştirilerek $l = 0$ 'da olduğu gibi $l \neq 0$ için $r > b$ bölgesinde u_l radyal çözümün elde edilir. δ_l ve a_l 'yi tanımlamak için $\sin(kr)$ ve $\cos(kr)$ fonksiyonları Eş. 3.181, Eş. 3.182 ve Eş. 3.183'de $kr j_l(kr)$ ve $kr n_l(kr)$ ile yer değiştirilir:

$$u_l(b-h) = a_l k(b-h) [\cos(\delta_l) j_l(k(b-h)) - \sin(\delta_l) n_l(k(b-h))], \quad (3.185)$$

$$u_l(b) = a_l k b [\cos(\delta_l) j_l(kb) - \sin(\delta_l) n_l(kb)] \quad (3.186)$$

ve

$$\tan(\delta_l) = \frac{(b-h) j_l(k(b-h)) u_l(b) - b j_l(kb) u_l(b-h)}{(b-h) n_l(k(b-h)) u_l(b) - b n_l(kb) u_l(b-h)}. \quad (3.187)$$

$l = 0$ için bu denklemler Eş. 3.181, Eş. 3.182 ve Eş. 3.183'e eşit olur. Bu denklemde küresel Bessel fonksiyonların asimptotik karşılıklarını bilmek gerek. $r \rightarrow \infty$ için Bessel fonksiyonları,

$$krj_l(kr) \rightarrow \sin \left(kr - l\frac{\pi}{2} \right), \quad (3.188)$$

$$krn_l(kr) \rightarrow -\cos \left(kr - l\frac{\pi}{2} \right) \quad (3.189)$$

ile verilir. $krj_l(kr)$ ve $krn_l(kr)$ fonksiyonların her ikisi serbest hareketin radyal denklemini sağlar. Potansiyelin sıfır olduğu asimptotik bölgede $krj_l(kr)$ ve $krn_l(kr)$ fonksiyonları Eş. 3.185 ve Eş. 3.186'nın formunda olmalı. Merkez potansiyelden kaynaklanan faz kayması $-l\pi/2$ 'dir. Eş. 3.185, Eş. 3.186'da b 'nin karşılaştırma değeri çok geniş seçilir ve daha sonra küresel Bessel fonksiyonlarının asimptotik formları Eş. 3.179'da yerine yazılırsa asimptotik çözüm,

$$\bar{u}_l(r) \rightarrow a_l \sin \left(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l \right) \quad (3.190)$$

elde edilir. δ_l , $V(r)$ potansiyeli, merkez potansiyeli ile Schrödinger radyal denklemin ve yalnız merkez potansiyel ile Schrödinger radyal denklemin çözümleri arasında asimptotik faz farkıdır.

4. HESAPLAMALAR

Bu bölümde, seyreltik gazda aşırı-soğuk K+K, Rb+Rb ve Rb+K alkali atomların çarpışmaları sonucu elde edilen saçılma özellikleri incelendi. Bu soğuk atomik etkileşmeler için elde edilen parametreleri daha iyi kıyaslamak için hesaplamalar aynı saçılma özelliği başlığı altında verildi. Bu doğrultuda sırasıyla potansiyel, saçılma mesafesi, etki mesafesi, faz kayması, tesir kesiti ve diğer özellikler verildi.

4.1. Potansiyel Denklemi ve Parametrelerinin Elde Edilmesi

Atomlar arasında etkileşme iki özelliğe sahiptir. İlk geniş uzunluklarda potansiyel atomlar arası uzaklığın ters kuvveti olarak davranır. Taban sevide küresel simetrik iki nötral atom için $n = 6$ olmak üzere $V = -\kappa / r^n$ ile verilir. Asimptotik parametre $\kappa \equiv c_6$ alkali metal atomları için oldukça iyi bilinir. İkinci olarak hidrojen ve helyumun dışında potansiyel eğri oldukça geniş ayrışma enerjisine sahiptir ayrıca atomik çiftlerin elektron değiş dokuş kısmı, alkali metallerin $^3\Sigma^+_u$ seviyesi için küçük mesafelerde iticidir. Ayrışma enerjisinin geniş olması atomik çiftlerin dalga fonksiyonu potansiyel kuyu içinde birçok kez osilasyon yapması anlamına gelir. Hatta çok düşük enerjilerde bu osilasyonlar devam eder. Bu sonraki özellik potansiyel kuyu içinde atomların hareketini tanımlamak için yarı-klasik yaklaşımı kullanmak için imkan sağlar [73].

Alkali-metal atomlar taban seviyede çiftleşmemiş elektron spin'ine $s = 1/2$ sahiptir. Bu yüzden atomların yoğunlaşması biçimlenmesi ile sonuç taban seviyede iki alkali atom arasında etkileşme, sistemin toplam spinine (0 veya 1) uygun iki terimle tanımlanır. $S_{ab} = 0$ ve 1 seviyeleri sırasıyla singlet ve triplet seviyeyi gösterir. Spin değiş-dokuş olasılığı çekirdekler arası uzaklık r ve singlet ve triplet terimler arasında ayırımına bağlı olarak tanımlanır.

Değiş-dokuş etkileşme spin-değişim tesir kesitinin elde edilmesinde kritik bir yol oynar. Değiş-dokuş etkileşme,

$$v_{exc.}(r) = \frac{1}{2}(v_u - v_g) = \frac{C}{2} r^\alpha \exp(-\beta r) \quad (4.1)$$

olarak asimptotik forma sahiptir [68]. Burada v_g ve v_u singlet ve triplet seviye potansiyelidir. Bu potansiyeller çok geniş mesafelerde sıfır olur. Bu ifadeler valence elektron bağ enerjileri (E_b) teriminde tanımlanır. Bağ enerjisi atomun iyonizasyon potansiyeline $E_b = \rho^2 / 2$ eşit olarak verilir. Özdeş atomlar için $\alpha = 7 / (2\sqrt{2E_b} - 1)$ ve $\beta = 2\alpha$ olur. $C(\rho_a, \rho_b, R)$ sabiti,

$$\begin{aligned} C(\rho_a, \rho_b, R) = & A^2 B^2 2^{-2-2/(\rho_a+\rho_b)} \Gamma\left(\frac{1}{\rho_a + \rho_b}\right) \left(\frac{2}{\rho_a + \rho_b}\right)^{2+1/(\rho_a+\rho_b)} \times \\ & \times \left\{ \left(\frac{\rho_a + \rho_b}{2\rho_b}\right)^{2/\rho_a-2/(\rho_a+\rho_b)} \int_0^1 e^{(y-1)/\rho_b+R(\rho_b-\rho_a)y} (1-y)^{2/\rho_b-1/(\rho_a+\rho_b)} \right. \\ & \times (1+y)^{2/\rho_a-2/\rho_b+1/(\rho_a+\rho_b)} \left[1 + \frac{\rho_b - \rho_a}{\rho_b + \rho_a} y \right]^{-2-1/(\rho_b+\rho_a)} dy \\ & + \left(\frac{\rho_a + \rho_b}{2\rho_a}\right)^{2/\rho_b-2/(\rho_a+\rho_b)} \int_0^1 e^{(y-1)/\rho_a+R(\rho_a-\rho_b)y} (1y)^{2/\rho_b-1/(\rho_a+\rho_b)} \\ & \left. \times (1+y)^{2/\rho_b-1/(\rho_a+\rho_b)} \left[1 + \frac{\rho_a - \rho_b}{\rho_a + \rho_b} y \right]^{-2-1/(\rho_a+\rho_b)} dy \right\} \quad (4.2) \end{aligned}$$

ile verilir. A ve B sabiti, geniş r için valence elektron dalga fonksiyonun genliğidir:

$$\phi_a = A r^{1/\rho_a-1} e^{-\rho_a r} \quad \text{ve} \quad \phi_b = B r^{1/\rho_b-1} e^{-\rho_b r}. \quad (4.3)$$

Sabitlerin değerleri tipik $R \sim 20a.u.$ mesafede geçiş bölgesine yakın $V_{S=1} - V_{S=0}$ farkı ile bulunur [88] veya atomik dalga fonksiyonu (Eş. 4.3) hartree-Fock metodu ile elde edilen dalga fonksiyonuna eşitlenerek bulunur [68]. Bu çalışmada K, Rb ve K+Rb atom veya izotop etkileşimleri için değişik dokuş parametreleri yukarıda verilen smirnov tarafından türetilen eşitlikler kullanıldı. Bu sonuçlar NIST laboratuvarından

alınan iyonizasyon enerji değerleri kullanılarak hesaplanan parametreler ile uyumlu olduğu Çizelge 4.1’de görülmektedir. Bütün değerler atomik birimde verilmiştir.

Çizelge 4.1. Atomik birimde Değiş dokuş potansiyel için valans elektron dalga fonksiyonun genliği (A ve B), C katsayısı ve elektronun iyonizasyon yarıçapı (ρ)

	$10^2 C$ ’nin değeri	K($\rho_a=0,5648^i, 0,567^{ii}$)	Rb($\rho_a=0,5541^i, 0,556^{ii}$)
K(A=0,533a.u)	C/A^4	7,31766 ⁱ , 7,43434 ⁱⁱ	7,28533 ⁱ , 7,30050 ⁱⁱ
Rb(B=0,491a.u)	C/B^4		7,22738 ⁱ , 7,29525 ⁱⁱ
ⁱ NIST laboratuvar tarafından yayınlanan iyonizasyon enerjileri kullanılarak elde edildi [89]			
ⁱⁱ Smirnov tarafından elde edilen değiş dokuş parametreleri [68]			

4.1.1. Potasyum için etkileşme potansiyeli

Potasyum atomu için etkileşme potansiyeli kısa ve uzun menzilde,

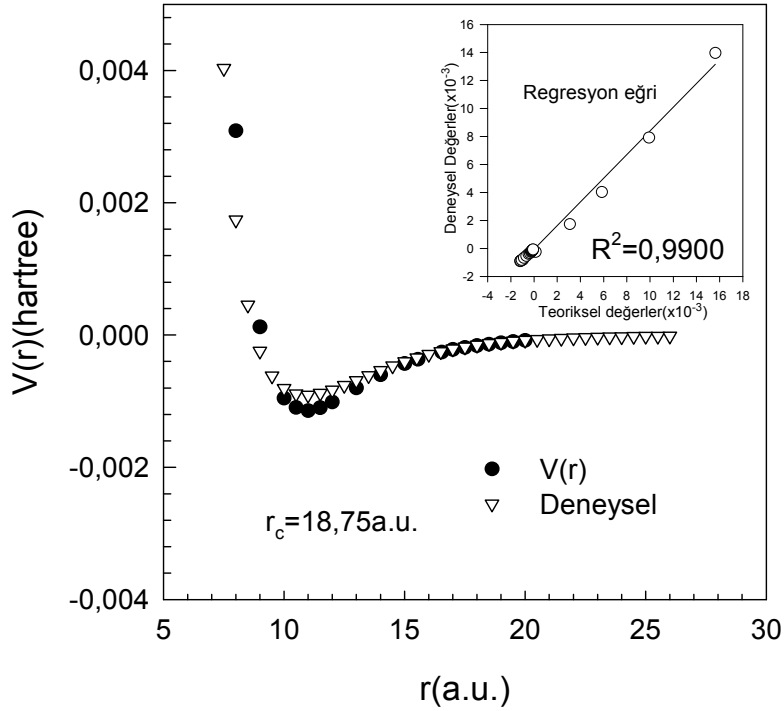
$$V = Ar^\alpha e^{(-\beta r)} - \sum_m^{\text{even}} \frac{C_m}{r^m} f_c(r) \quad (4.4)$$

ile verilir. Çekici terim Van der Waals terimlerin toplamına ve küçük mesafelerde $1/r^n$ yakınsaklığını iptal etmek için kesme fonksiyonlarına sahiptir. Van der Waals parametreleri C_6, C_8 ve C_{10} Kaynak [86]’dan alındı ve bu değerler Çizelge 4.2’nin son üç sütunda verilir. Burada tanımlanan Kesme fonksiyonu $H-H^3 \Sigma^+_{u-}$ potansiyeli’ne kıyastır [90];

$$f_c(r) = \xi(r - r_c) + \xi(r_c - r) e^{-\left(\frac{r_c}{r} - 1\right)^2}. \quad (4.5)$$

Burada, $r > (<) 0$ iken $\xi(z) = 1(0)$ step fonksiyonudur. Potansiyel toplamı için serbest parametre kesme yarıçapıdır ve $r < r_c$ için $f_c(r)$ fonksiyonunun azalmasını yöneltir. Kesme parametresinin genliği r_c , tanımlanan potansiyel formun $r = 6,5$ a.u.’den 20

a.u.'ye floresan spektroskopisi kullanılarak [91] elde edilen triplet seviyede deneysel eğri ile karşılaştırılarak bulunur.



Şekil 4.1. $^{39}\text{K}_2$ 'nin triplet seviyesinde deneysel verilerle birlikte seçilen kesme yarıçapı için potansiyel enerji eğrisi. İç yerleşim doğrusal Regresyon ve R^2 değerlerini gösterir

Regresyon eğrisine göre en iyi tanımlanılan kesme yarıçapı için potansiyel eğri, deneysel eğri ve regression eğrisi ile birlikte Şekil 4.1'de verilir. Bu şekilde gösterildiği gibi potansiyelin dönüm noktaları civarında iyi bir uyum vardır. Fakat eğrinin minimum bölgesinde değerlerimiz deneysel potansiyel ile zayıf bir uyuma sahiptir. Bu farkı dikkate alınarak beş farklı kesme yarıçapı ($r_c=18,75, 18,80, 18,85, 18,90$ ve $18,95\text{a.u.}$) için saçılma özellikleri hesaplandı.

Triplet seviyede potasyumun çarpışma karakteri tanımlanması için ikinci bir potansiyel tipik Lennard-Jones ($\text{LJ}_{12,6}$) potansiyeli kullanıldı:

$$u(r) = \frac{\lambda}{r^{12}} - \frac{\eta}{r^6} \quad (4.6)$$

Bu potansiyel Flambaum tarafından atom-atom etkileşmesi için uyarlandı [73]. Sabitler;

$$\eta = c_6$$

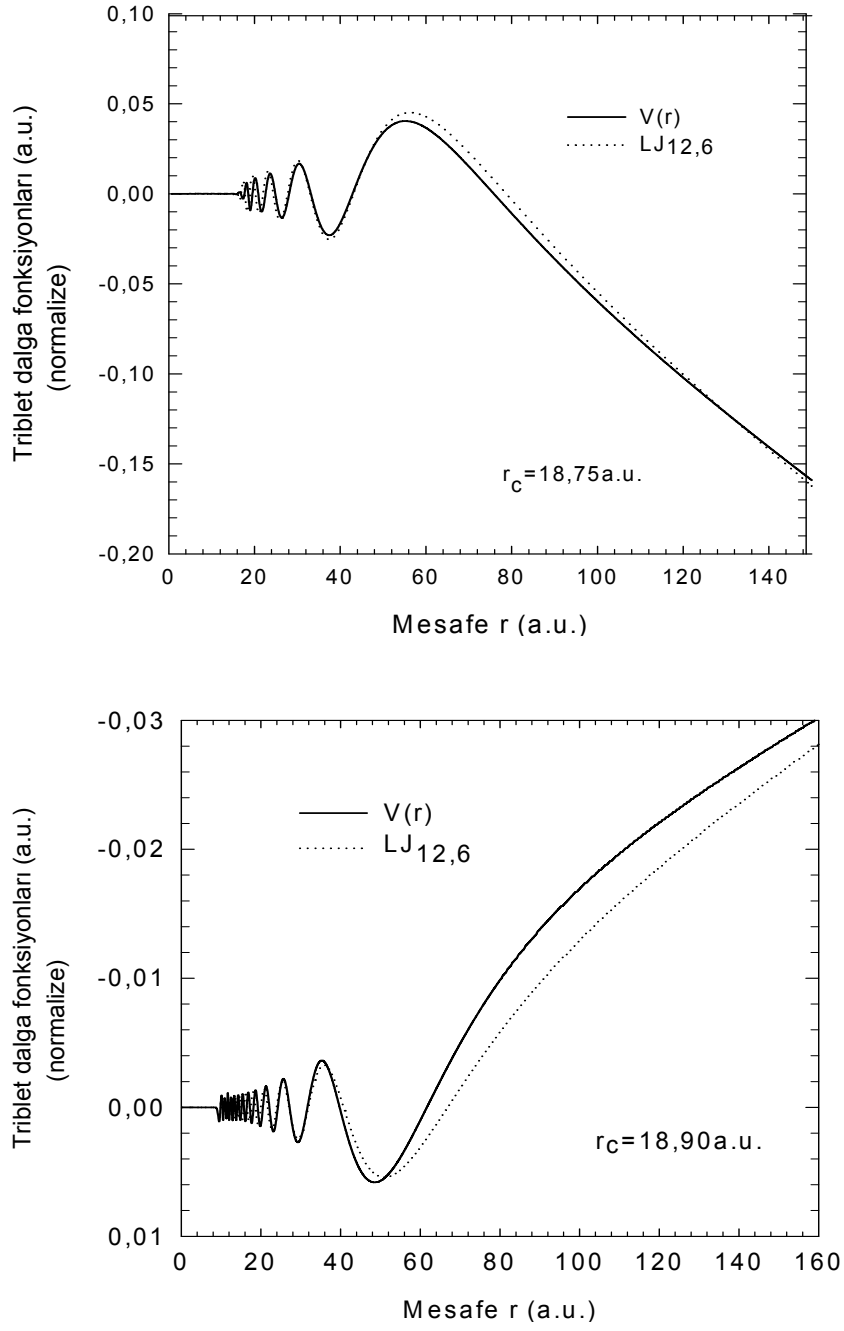
$$\lambda = (0.42065463\sqrt{2\mu c_6^{5/6} / \varphi})^3 \quad (4.7)$$

şeklinde tanımlanmaktadır. Burada $U(r)$ potansiyeli $V(r)$ potansiyeli ile tanımlanan φ ve C_6 'ya bütünüyle bağlıdır. Bu yüzden sonra tartışılacak saçılma özelliklerinin her iki potansiyel için aynı olmasına zemin oluşturur.

Çizelge 4.2. Triplet seviyede potasyum atomu için potansiyel sabitleri

c	α	β	$10^{-3}C_6$	$10^{-5}C_8$	$10^{-7}C_{10}$
0,003 ¹	5,0764 ¹	1,134 ¹	3,813 ²	4,096 ²	5,248 ²
¹ Kay. [68], ² Kay. [86].					

Aşırı soğuk sıcaklıkta saçılma özellikleri için geniş menzilde dalga fonksiyonunun davranışı potasyum için bir örnek olarak incelenebilir. İki potansiyel (Eş. 4.4 ve LJ_{12,6}) için geniş r menzilde boyutlanmış dalga fonksiyonu Şekil 4.2' de verilmektedir. Bu şekilde görüldüğü gibi s-dalga fonksiyonları kesme yarıçapının artırımı ile değişmektedir. Aynı zamanda kesme yarıçapının değişmesi her iki potansiyel için dalga fonksiyonları arasındaki farkı arttırmaktadır. Şekilde farklı kesme yarıçaplarda iki potansiyel için seçilen s-dalga fonksiyonları iyi uyuşma gösterir.



Şekil 4.2. Kesme yarıçapının seçilen değerleri için normalize raydal dalga fonksiyonu $y(r)$

4.1.2. Rubidyum etkileşme potansiyeli

Rb+Rb etkileşme potansiyel toplamı için serbest parametre K+K etkileşme potansiyelinde olduğu gibi kesme yarıçapıdır (r_c) ve $r < r_c$ için $f_c(r)$ fonksiyonun azalmasını yöneltir. $^{85}\text{Rb}+^{85}\text{Rb}$ çarpışmasının potansiyeli Eş. 4.4’de olduğu gibi itici ve çekici potansiyellerin toplamı olarak yazılır:

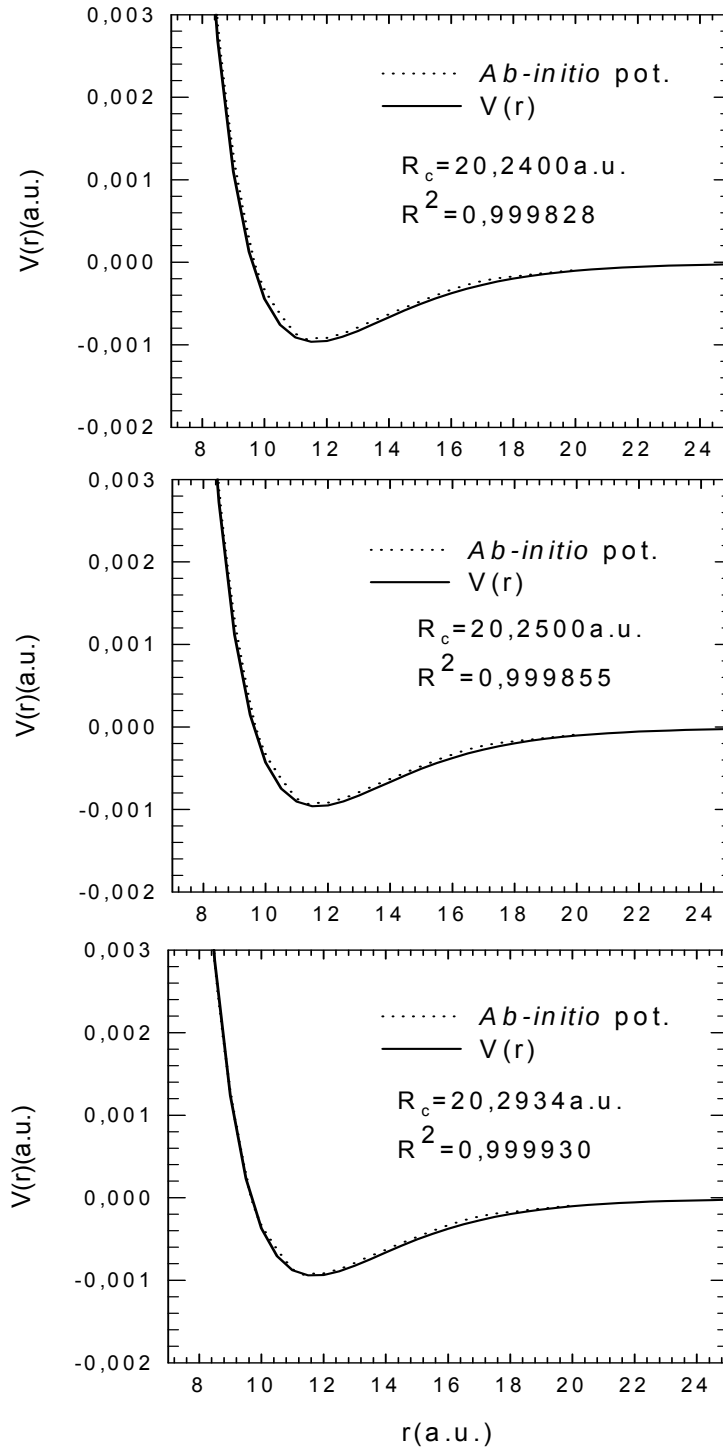
$$V(r) = V(r)_{\text{değiş-dokuş}} + V(r)_{\text{uzun-menzil}} \quad (4.8)$$

Değiş tokuş parametreleri kaynak Smirnov [68] ve uzun menzilli potansiyel için C_6 , C_8 ve C_{10} parametreleri Maeder [92] ve Marinescu’nun [86] makalelerinden alınmıştır. Bu değerler Çizelge 4.3’de toplanmıştır.

Çizelge 4.3. Triplet seviyede rubidyum atomu için potansiyel sabitleri

C	α	β	$10^{-3}C_6$	$10^{-5}C_8$	$10^{-7}C_{10}$
0,00212 ¹	5,2950 ¹	1,112 ¹	4,768 ²	5,506 ³	7,665 ³
¹ Kay. [68], ² Kay. [86], ³ Kay. [92].					

Kesme parametresinin genliği r_c , $r = 7$ ’den 20a.u.’ya *ab-initio* kullanarak Krauss tarafından elde edilen eğriye uydurma yapılarak ayarlandı [93]. Şekil 4.3’de üç farklı kesme yarıçapı ($r_c=20,2400$, $20,2500$ ve $20,2934$) için uydurma eğrileri elde edilir. Bu uydurma eğrileri R^2 değerleri ile kontrol edilir. En iyi uyumda üç farklı uydurma eğrisi için R^2 değerleri hesap edilmiştir. Kesme yarıçapı 20,3934a.u. olan uydurma, R^2 değerine ($R^2=0,999930$) ve diğerlerine ($R^2=0,999855$ ve $0,999825$) göre mükemmel durumdadır. $R^2=0,999930$ değerine sahip eğrinin dönüm noktaları ve minumum noktaları civarında Şekil 4.3’de görüldüğü gibi uydurma eğrisi ile deneysel veriler arasında oldukça iyi uyum vardır. Diğer eğrilerde kesme yarıçapının etkisiyle bu dönüm noktaları ve minumum noktaları civarında uyum zayıflamaktadır ve R^2 değerinde azalma olmaktadır.



Şekil 4.3. Rubidyum atomunun triplet seviyesi için *ab-initio* eğrileri, itici ve çekici potansiyel terimlerden oluşan potansiyel ile karşılaştırılarak elde edilen potansiyel enerji eğrileri

4.1.3. Rubidyum-potasyum etkileşme potansiyeli

Rb+K etkileşme potansiyeli, Rb ve K potansiyellerinden biraz farklı olarak tanımlandı. Bunun sebebi potansiyelde iyi bit uydurmanın'ın olmamasıdır. Daha önceki potansiyellerde serbest parametre olan kesme yarıçapı uydurma işlemi için yeterli olmakta iken burada yeterli olmamıştır. Bunun için potansiyel ifadesinde birkaç çarpan kullanıldı. Kısa menzilli etkileşme;

$$v_{exc.}(r) = \frac{1}{2}(v_u - v_g) = r^\alpha e^{(-\beta r)} J \quad (4.9)$$

ile verilir. Bu denklemde $J = \sum_n f_n J_n r^n$ olarak tanımlanır. Eşitlikte f_n en iyi R^2 değerine göre uydurma programı tarafından ayarlanan uydurma sabitidir. J_n integral sabitidir. Rb+K için bu sabitlerin değerleri Smirnov'un makalesinden alındı [68] ve Çizelge 4.4'te verilmektedir. Potansiyelin uzun menzilli kısmı,

$$v_{uzun-erişimli} = \left(\frac{C_f^6 C_6}{r^6} - \sum_{m>6}^{çift} \frac{C_m}{r^m} \right), \quad (4.10)$$

ile verilir. Bu Van der Waals terimlerin toplamıdır ve küçük mesafelerde $1/r^n$ yakınsaklığını iptal etmek için Eş. 4.5'de verilen kesme fonksiyonu ile çarpıldı.

Etkileşme potansiyelinin r eksenini altında kalan alan aşırı-soğuk saçılma özellikleri belirlemede önemlidir ve bu alanın değeri Eş. 3.28'den hesaplanır. Bu yüzden saçılma sonuçların kesinliği için potansiyel biçimi *ab-initio* potansiyeline tam uyması gerekir. Singlet seviyede Wan de Waals parametreleri uydurma parametresi ile çarpıldı. Şekil 4.4'te gösterildiği gibi potansiyeller R^2 değerlerine göre mükemmel uyumdadır. Bu yüzden biz C_f^c 'ye singlet ve triplet seviyede uzun menzil terim için düzeltme parametresi demekteyiz. Bu teknik diğer çalışmalar için yararlı olabilir. C_6 , C_8 ve C_{10} parametreleri Derevianko'nun makalesinden alındı [71]. Kesme

fonksiyonu Rb+K çarpışmalarının potansiyeli yukarıda verilen Eş. 4.9 ve Eş. 4.10'nun toplamından oluşur.

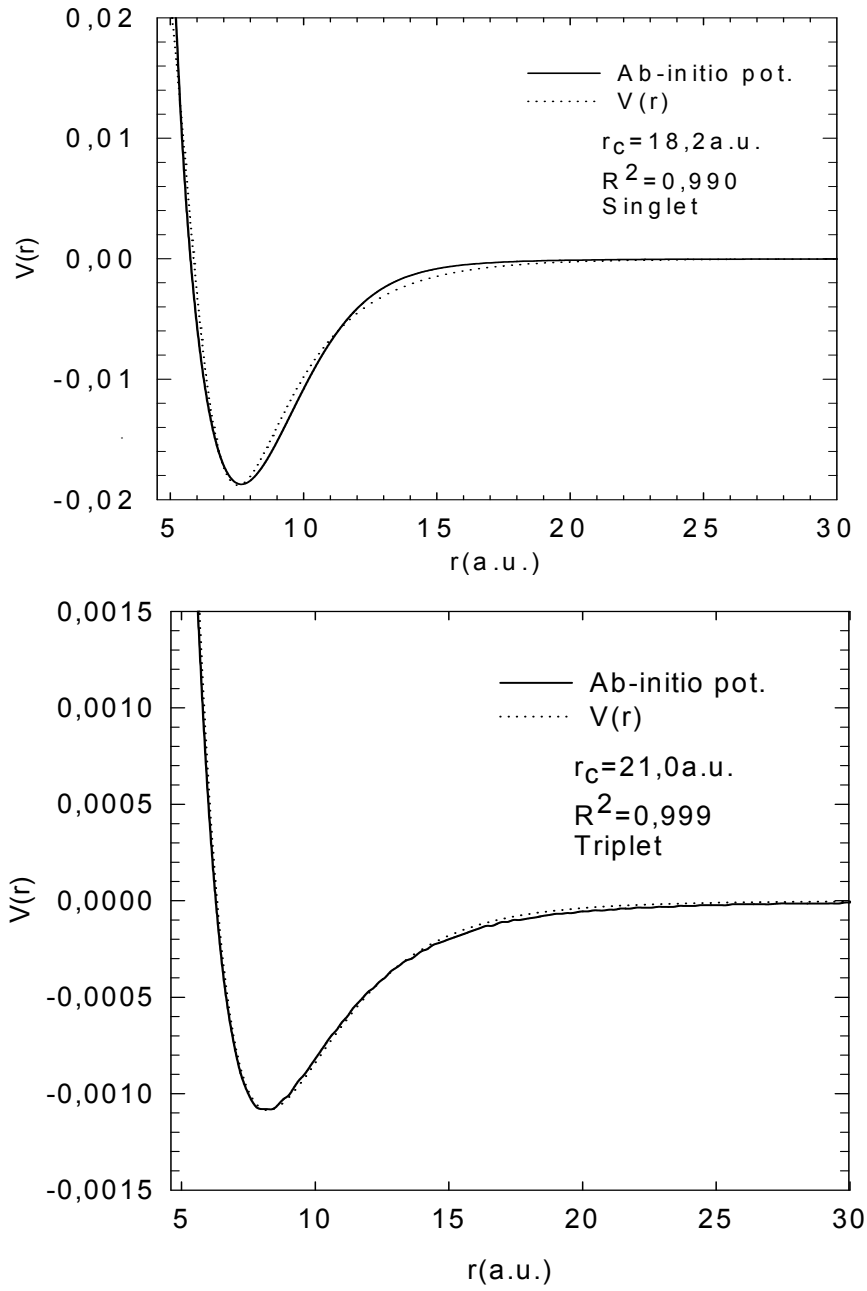
$$V^{2S_{AB}+1}(r) = V(r)_{\text{uzun-erişimli}} + (-1)^{S_{ab}} V(r)_{\text{kısa-erişimli}} \quad (4.11)$$

Kesme yarıçapının genliği geniş menzil için *ab-initio* kullanılarak Rousseau [94] tarafından elde edilen potansiyel verileri ile karşılaştırılarak ayarlandı.

Çizelge 4.4. Singlet ve triplet seviyelerde Rubidyum-Potasyum etkileşmesi için potansiyel sabitleri

	$^1\Sigma_g^+$	$^3\Sigma_u^+$
$10^{-3}f_1$	345	-345
$10^{-3}f_2$	1,0	-1,0
$10^{-3}f_3$	1,0	-1,0
$10^{-3}j_1^1$	5,0	5,0
$10^{-4}j_2^1$	4,0	4,0
$10^{-3}j_3^1$	7,0	7,0
α^1	5,256	5,256
β^1	1,119	1,119
$10^{-4}C_6^2$	1,5023	4,274
$10^{-5}C_8^2$	5,9224	5,922 ⁴
$10^{-7}C_{10}^2$	6,726	6,726
¹ Kay. [68]. ² Kay. [71]. ³ Metin’de tanımlanan uydurma sabiti $C^S_6 = 3,514$ ’dür. ⁴ Metin’de tanımlanan uydurma sabiti $C^{S,T}_8 = 0,865$ ’dir.		

Uydurma yapılarak hesap edilen farklı r_c değerleri için singlet ve triplet seviyede rubidyum potasyum potansiyel biçimi Şekil 4.4’te R^2 değerleri ve *ab-initio* data ile birlikte verildi. R^2 değerine göre kesme yarıçapı için *ab-initio* eğri ve teoriksel eğri arasında mükemmel uyum vardır.



Şekil 4.4. Moleküler KRB'nin singlet ve triplet seviyelerinde en iyi kesme yarıçapı için *ab-initio* potansiyel(katı çizgi) ile karşılaştırılarak elde edilen potansiyel enerji eğrileri(noktalı çizgi). İç set R^2 ve kesme yarıçapını göstermektedir

4.2. Saçılma Mesafesi

4.2.1. Potasyum'un triplet seviye saçılma mesafesi

Eş. 4.4'teki potansiyel kullanılarak Eş. 3.27'den hesaplanılan saçılma mesafesinin değerleri kesme yarıçapına bağlı olarak Çizelge 4.5'nin üçüncü sütunda verilir (r_c , bu çizelgenin ilk sütununda verilir). Saçılma mesafesini hesaplamak için beş farklı kesme yarıçapı için iki potansiyel kullanılarak s-dalga faz kayması δ_0 bulunur.

Çizelge 4.5. Kesme yarıçapları için saçılma mesafeleri $a(a.u.)$ ve yarı-klasik faz kayması φ

		Saçılma mesafesi(a.u.)		
$r_c(a.u.)$	φ^a	$a^i(a.u.)$	$a^{ii}(a.u.)$	$a^{iii}(a.u.)$
18,75	73,402	$3,884_{-32}^{69}$	3,941	3,964
18,80	72,166	$93,510_{-37}^{25}$	93,540	93,360
18,85	71,039	-1489_{-587}^{1739}	-1483	-1491
18,90	69,900	$35,954_{-23}^{31}$	35,718	36,099
18,95	68,913	$102,800_{-43}^{26}$	102,700	102,260
		-17 ± 25^b $60 < a < 15^a$	$-1200 < a < -60^d$ $81,1 \pm 2,4^c$	$-80 < a < -28^e$ -33 ± 5^f
^a Eş. 4.28'den hesaplandı. ⁱ Eş. 4.4'deki potansiyel için yarı-klasik metot kullanılarak hesaplandı. ⁱⁱ Eş. 4.4'deki potansiyel için Numerov metot kullanılarak hesaplandı. ⁱⁱⁱ LJ _{12,6} potansiyel için Numerov metot kullanılarak hesaplandı. Deneysel sonuçlar ^a Kay [95], ^b Kay. [96], ^d Kay. [64], ^e Kay. [99], ^f Kay. [97]'den alındı. ^c Nümerik sonuçlar Kay. [98]'den alındı.				

Bunun için $e = k^2 / 2\mu$ (atomik birimde) enerji değerinde Numerov algoritması ile radyal denklem çözülerek ve $y(r) = \sin(kr + \delta_0)$ dalga fonksiyonunun asimptotik davranışından faz kayması elde edilir. Küçük momenta k 'larda fazlar

$a = \lim_{k \rightarrow 0} (\tan \delta_0 / k)$ eşitliğinden nümerik olarak saçılma mesafesini çekmek için kullanılır. Bu metot yoluyla bulunan saçılma mesafeleri Çizelge 4.5'te dördüncü ve beşinci sütunda verilir.

Ayrıca Çizelge 4.5'de sıfır-enerjide asimptotik parametre ve ortalama saçılma mesafesinin yardımı ile elde edilen yarı-klasik faz φ ikinci sütun da verilir. Ayrıca burada dikkat edilmeli ki φ bilinirse $c_6 = 3813$ ve Eş. 4.4 ile LJ_{12,6} için saçılma mesafesi elde edilir. LJ_{12,6} potansiyeli Eş. 4.4'teki potansiyel ile aynı yarı-klasik faza sahip olur. Çizelge 4.5'in üçüncü, dördüncü ve beşinci sütunundaki saçılma mesafeleri mükemmel uyuşmaya sahip. Potasyumun hesap edilen asimptotik değeri $\gamma = 1,7 \times 10^4 a.u.$ kullanılarak ortalama saçılma mesafesi Eş.3.30'dan $\bar{a} = 62,322 a.u.$ olarak hesaplandı.

Potasyum atomu için Çizelge 4.5'in en altında "a-f" ile işaretli saçılma mesafeleri "photoassociative" spektroskopisinden [95, 96, 97, 99, 64] ve nümerik [98] hesaplamalardan, hesaplarımız ile karşılaştırmak için verilmektedir. "c" harfi ile işaretli saçılma mesafesi nümerik olarak $K_2 \ ^3\Sigma_u^+$ seviyede farklı etkileşme potansiyeli için $81,1 \pm 2.4$ a.u olarak hesaplandı. Bu sonuç Çizelge 4.5'te değerlerimiz ile iyi uyuşmaktadır. Bu çizelgede görüldüğü gibi ilgili kaynaklarda potasyum çarpışmaları için hesaplanan saçılma mesafeleri (-1200, 83,5) aralığında geniş bir menzile sahiptir. Bunun yanında hata hesabı dikkate alınmadığında elde edilen saçılma mesafesinin değişim menzili, (-1489, 102,260) aralığındadır. Hatta hata hesabı ile bu aralığın alt ve üst sınırlarıyla daha genişlediği görülmektedir. Saçılma mesafesi tipik olarak Kaynak [100]'da $\sim 95 a.u. (\sim 5nm)$ olarak verilir. Bu değer alkali metal atomları için atomlar arası kuvvet menziline BEC sıcaklığına yakın mikro Kelvin sıcaklıklarda hesaplanılan değerlerimize yakındır.

Hatta hesaplarımız geniş yoğuşmaların kararlılığı itici etkileşmeyi (pozitif a) gerektirir. Tuzaktaki sıcak atomlar elastik çarpışma yoluyla dışarı atılır. Halbuki çekici etkileşme için BEC kararsızdır. Yalnız sınırlı sayıda atom tuzakta yoğuşma

seviyesinde bulunur. Yapılan bütün hesaplara göre bir değerlendirme yapıldığında pozitif ve negatif saçılma mesafelerin yüzde değişimleri sırasıyla %6,4 ve %96,6 dır. Bu durumdan %6,4 oranına göre pozitif saçılma mesafesi, bosonik potasyum izotopun kararlı yoğunlaşması tahmin edilir.

4.2.2. Rubidyum'un triplet seviye saçılma mesafesi

Aşırı soğuk Rb etkileşmesi için Eş. 4.8'deki potansiyel kullanılarak Eş. 3.27'den hesaplanan saçılma mesafesinin değerleri kesme yarıçapına bağlı olarak Çizelge 4.6'nın üçüncü sütunda verilir (r_c , bu çizelgenin ilk sütununda verilir). Saçılma mesafesini hesaplamak için üç farklı kesme yarıçapı için potansiyel kullanılarak s-dalga faz kayması δ_0 bulunur. Bunun için $e = k^2 / 2\mu$ (atomik birimde) enerji değerinde Numerov algoritması ile radyal denklem çözülerek ve $y(r) = \sin(kr + \delta_0)$ dalga fonksiyonunun asimptotik davranışından faz kayması elde edilir. Küçük momentada fazlar $a = \lim_{k \rightarrow 0} (\tan \delta_0 / k)$ 'dan nümerik olarak saçılma mesafesini çekmek için kullanılır. Bu metot yoluyla bulunan saçılma mesafeleri Çizelge 4.6'da dördüncü sütunda verilir.

Ayrıca Çizelge 4.6'da asimptotik parametre ve ortalama saçılma mesafesinin yardımı ile edilen yarı-klasik faz φ ikinci sütun da verilir. Çizelge 4.6'nın üçüncü ve dördüncü sütununda saçılma mesafeleri mükemmel uyuşmaya sahiptir. Eş. 4.8'de potansiyelin $\gamma = 2,7 \times 10^4 a.u.$ asimptotik değeri kullanılarak ortalama saçılma mesafesi Eş. 3.30'dan $\bar{a} = 78,945 a.u.$ olarak hesaplandı.

Çizelge 4.6'nın son iki sütunda rubidyum atom etkileşmesi için literatürden alınan değerler bulunmaktadır. Nümeriksel değerlerin dışında bu değerlerin çoğu foto-birleşim spektroskopu deneylerine aittir. Bu sonuçlar hesaplanan değerlerimiz ile karşılaştırdığımızda artan kesme yarıçapında iyi bir uyuşma vermektedir. 20,250a.u. kesme yarıçapı için elde edilen pozitif saçılma mesafesi “a” harfi ile etiketlenilen saçılma mesafesi ile iyi uyuşmaktadır. Kesme yarıçapı 20,2934a.u. için elde edilen

negatif saçılma mesafesi diğer literatürden alınan değerlerin çoğu ile mükemmel çakışmakta iken bir kaçı ile iyi uyushmaktadır. Bu kesme yarıçapında uydurma işleminde en iyi R^2 değerine (0,99993) sahiptir. Hata hesapların küçük değerlerde olması sonuçların kesinliğini doğrulamaktadır.

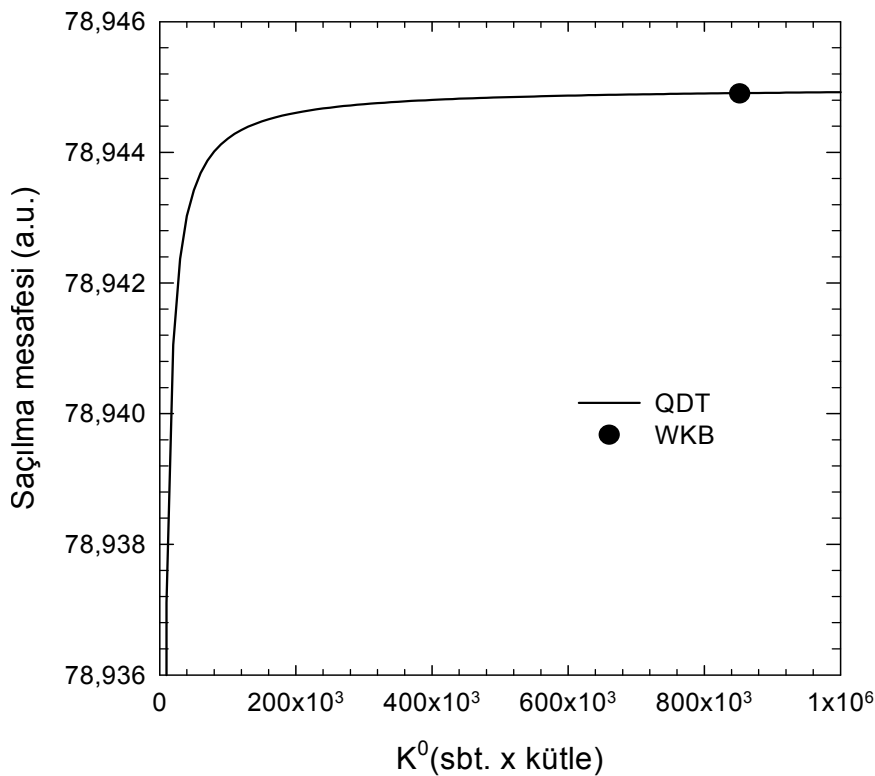
Çizelge 4.6. Farklı üç kesme yarıçapı için yarı-klasik faz kayması ve saçılma mesafesi ve ayrıca literatürde bulunan saçılma mesafeleri

Saçılma mesafesi (a.u.)					
$r_c(a.u.)$	φ^i	$a^{ii}(a.u.)$	$a^{iii}(a.u.)$	$a^{iv}(a.u.)$	$a^{iv}(a.u.)$
20,2400	125,624	$115,381^{+0,9}_{-0,9}$	115,387	146,3 ^a	-388(3)&-387(1) ^d
20,2500	125,374	$143,125^{+1,2}_{-1,2}$	143,157	-369±16 ^b	-440±140 ^e
20,2934	124,311	$-369,753^{+3}_{-3}$	-370,446	-315- -520 ^c	-363±10 ^f , -332±18 ^g
			-1000<a<-60 ^h		
			-500<a<-300 ⁱ		
			85<a<+200&-1200<a<-10 ^j		
			-295±80 ^k		
ⁱ Eş. 3.28'den hesap edildi.					
ⁱⁱ V(r) potansiyeli için yarı-klasik metot kullanılarak hesap edildi.					
ⁱⁱⁱ V(r) potansiyeli için Numerov metot kullanılarak hesap edildi.					
^{iva} Kay. [102], RKR'ye uydurma yapılarak elde edilen iki boyutlu V _{rb} (r) potansiyel için nümerik analiz.					
^b Kay. [103], Çok kanallı QDT ile bağlı sınırlı element R matris işlemin yardımıyla teoriksel analiz.					
^c Kay. [104], Farklı dispersion parametreleri için çok kanallı QDT teori ile teoriksel analiz.					
^d Kay. [105], V=V _{disp} -V _{exch} potansiyelin birinci terimini içeren ve ikinci terimi içermeyen potansiyellerde deneylerden türetilen parametreleri ile toplamalı faz metoduna bağlı teoriksel analiz.					
^e Kay. [106], deneysel “İki-renkli foto-birleşim” spektroskopisi.					
^f Kay. [101] , çapraz boyutlu karışık tekniğe (CDMT) bağlı deneysel analiz.					
^g Kay. [107], CDMT tekniği geliştirilerek yapılan deneysel analiz.					
^h Kay. [108], Yüksek çözünürlükte deneysel foto-birleşim spektroskopisi.					
ⁱ Kay. [82], deneysel “Pulsed foto-birleşim” spektroskopisi.					
^j Kay. [82], bu makalede yazarlar iki metodun kombinasyonunu kullanırlar. Bunlardan biri, saçılma mesafesinin E=0 boyunca bağlı- seviye spektrum en yüksek kısmından türetilir. Örneğin yüksek bağlı triplet seviyelerden a_T sonucu çıkartılır. Diğer metot ise foto-birleşim spektroskopidir.					
^k Kay. [109], deneysel zeeman-çözünürlüklü foto-birleşim spektroskopisi.					

Kesme yarıçapları 20,240a.u. ve 20,250a.u. için rubidyum atomunun yoğunlaşması kararlı iken 20,2934a.u. kesme yarıçapının yoğunlaşması kararsızdır. Bu durumda potansiyelin çekici etkileşmesi baskın olmaktadır. Negatif saçılma mesafeleri yalnız sınırlı sayıda rubidyum atomunun tuzakta yoğunlaşma seviyesinde bulunduğu gösterir.

4.2.3. QDT ile hesaplanan rubidyum saçılma mesafelerin yakınsaklığı

$K^0=0,176$ değeri için Eş. 3.143'ü kullanarak saçılma mesafesini $a=-369,606$ a.u. olarak hesaplandı bu değer Çizelge 4.6'daki sonuca yakındır. Etki menzili Eş. 3.145'den $r=349,778$ a.u. olarak hesaplandı ve Çizelge 4.11'deki değerlerle iyi uyushmaktadır. Hatta bu sonuçlar WKB metodu ile elde edilen sonuçlar ile mükemmel uyushmaktadır. Bu saçılma özellikleri Şekil 4.5'de WKB metoduna dayalı yarı klasik ortalama saçılma mesafesine tam olarak yakınsar.



Şekil 4.5. K sonsuza giderken, K parametresinin fonksiyonu olarak QDT ile hesaplanan saçılma mesafesinin yakınsaklığı

4.2.4. Szmytkowski'nin formülleri ile yarı-klasik sonuçların yakınsaklığı

Radoslaw Szmytkowski'nin formüllerini kullanarak rubidyum-85 izotopunun saçılma mesafesinin yakınsaklığını elde edildi. Bu formüller Eş. 3.120, Eş. 3.122, Eş. 3.127 ve Eş. 3.133'de verilir. Biz burada en iyi kesme yarıçapına ($r_c=20,2934$) göre WKB metodu ile saçılma mesafelerini Çizelge 4.7'de hesap edildi. Bu çizelgede bu metodun sonuçları rubidyum saçılma mesafesini yakınsaklığını doğrular.

Çizelge 4.7. $^3\Sigma_u^+$ seviyede aşırı soğuk Rb-Rb çarpışmalar için saçılma mesafesinin yakınsaklığı

Saçılma mesafesi $a_0(a.u.)$					
$\rho(a.u.)$	Kısa-men-zil $a_{0s}(\rho)$	Eş. 3.122	Eş. 3.120	Eş. 3.133	Eş. 3.127
1000	-336,538	-336,928	-336,928	-336,928	-337,294
2000	-361,074	-361,114	-361,114	-361,114	-361,113
3000	-365,813	-365,824	-365,824	-365,824	-365,818
4000	-367,564	-367,568	-367,568	-367,568	-367,563
10000	-369,374	-369,374	-369,374	-369,374	-369,369
20000	-369,750	-369,750	-369,750	-369,750	-369,745
∞	-369,753	-369,753	-369,753	-369,753	-369,748

4.2.5. Rb-K izotopların singlet ve triplet seviye saçılma mesafeleri

Bu bölümde aşırı-soğuk sıcaklıklarda triplet seviyede Rb+K çarpışmaları için saçılma mesafesi ve etki mesafesi yarı-klasik metot ve Eş. 4.11'de verilen potansiyel için Numerov metot ile Schrödinger denklemi çözülerek hesaplandı.

Eş. 4.11'deki potansiyel ile tanımlanan singlet ve triplet seviyede rubidyum ve potasyum'dan oluşan karışımların çarpışmaları için WKB metodu ile Eş. 3.27'den hesaplanan saçılma mesafesinin sonuçları kesme yarıçapında Çizelge 4.8'de verilir. Saçılma mesafesini nümerik hesaplamak için kesme yarıçapında potansiyeller kullanılarak s-dalga faz kayması elde edilir. Bu sayede atomik birimde $e = k^2 / 2\mu$ ($\mu = 78030 a.u.$) enerjide radyal denklemi çözülerek dalga fonksiyonun $y(r) = \sin(kr + \delta_0)$ asimptotik davranışından δ_0 faz kayması elde edilir. Küçük

momentumlarda fazlar saçılma mesafesini nümerik olarak çekmek için kullanılır. Bu metot yoluyla bulunan saçılma mesafeleri Çizelge 4.8'in nümerik sütununda verilir. Ayrıca asimptotik parametrenin γ 'nın değerleri kullanılarak Çizelge 4. 8'de ortalama saçılma mesafesi $\bar{a}$ ve sıfır-enerji yarı-klasik faz ϕ elde edildi.

Kay. [110]'da sunulan termalizasyon ölçümlerinden sıfır-enerji s-dalga saçılma mesafesinin geniş değeri geleneksel çift manyetik optik tuzak (MOT) cihazlar kullanılarak elde edilmiştir [111, 112]. Modugno, ^{41}K - ^{87}Rb çifti için saçılma mesafelerin direk ölçümlerini tahmin etti. O ayrıca Çizelge 4.8'in deneysel sütununda kütle skala ile diğer izotop kombinasyonların çarpışma davranışını ortaya çıkardı [113]. Daha sonra ^{40}K - ^{87}Rb ve ^{41}K - ^{87}Rb çiftleri için Simoni birkaç manyetik alanın varlığında saçılma özelliklerini araştırdı [114]. JILA grubu son zamanları ^{40}K ve ^{87}Rb izotopun saçılma parametrelerini hassas bir şekilde ölçtü. Inouye tarafından ^{40}K ve ^{87}Rb izotopun singlet ve triplet saçılma mesafesi, saçılma mesafesinin manyetik alana bağlılığının rezonans bölgesinden ölçtü [115]. ^{40}K ve ^{87}Rb izotopun çift spin polarize seviyeler arasında türler arası saçılma mesafesinin genliği Goldwin tarafından çapraz boyutlu termal rahatlamadan elde edildi [116]. Çizelge 4.8'de gösterildiği gibi hesaplanan bu değerler hata sınırları içinde hesaplarımızla mükemmel uyuşmaktadır.

Çizelge 4.8'de açıkça gösterildiği gibi rubidyum-potasyum çiftleri için hesaplanan saçılma mesafeleri, $V(r)$ potansiyeli, R^2 değerine göre *ab initio* mükemmel uyuşmaya sahip olduğu zaman deneysel saçılma mesafesi ile iyi uyuşmaktadır.

Hatta sonuçlarımız geniş yoğunluğun kararlılığının itici etkileşmelerini gerektirir (pozitif a). Halbuki çekici etkileşmeler(negatif a) için yoğunlaşma kararsızdır. Yalnız sınırlı sayıda atom tuzakta yoğunlaşma seviyesinde bulunabilir. $V(r)$ 'deki değişime göre saçılma mesafesi negatif değerde bulunabilir. Bu durum triplet seviyede yoğunlaşmaya yol açar. Atomların sayısı ile tanımlanan küçük kritik değerler ile sınırlanır. Aksine pozitif saçılma mesafesini gözledik. Bu durum kararlı yoğunlaşma üretir. Ayrıca Eş. 3.27'de yarı-klasik faz kaymasının fonksiyonu olarak hesaplanan saçılma mesafesi kullanılarak faz kaymasındaki az bir değişiklik ağır bir şekilde saçılma genliğini

etkilemektedir. Sonuç olarak aşırı-soğuk saçılma faz ile verilen potansiyel değişikliklerine bağlıdır. Ayrıca ^{41}K - ^{87}Rb çifti için *ab-initio* potansiyel ile desteklenen bağ seviyelerin sayısına N_{bd} zayıfca bağlıdır. Aksine bir izotoptan diğerine kütle skalası ağır bir şekilde N_{bd} 'ye bağlıdır.

Çizelge 4.8. Singlet ve triplet seviyelerde aşırı soğuk rubidyum-potasyum karışımlarının saçılma mesafeleri

		^{85}Rb			^{87}Rb		
	a.u.	Yarıklasik ⁱ	Nüme. ⁱⁱ	Deney ⁱⁱⁱ	Yarıklasik ⁱ	Nüme. ⁱⁱ	Deney ⁱⁱⁱ
^{39}K	a_s	$136,730^{25}_{-31}$	136,763	-	$-3,121^{67}_{-39}$	-3,197	-
	a_t	$56,983^{2.5}_{-2.5}$	56,952	58^{14}_{-6}	$36,854^{+3}_{-3}$	36,894	31^{16}_{-6}
^{40}K	a_s	$161,840^{32}_{-48}$	161,807	-	$-54,49^{64}_{-40}$	-54,490	$-54^{12}_{-12}{}^1$,
	a_t	$-49,364^{10}_{-9}$	-49,390	$-38^{57}_{-17}{}^1$	$-281,62^{73}_{-52}$	-281,61	-261^{170}_{-159} , -281 ± 15^1 , -250 ± 30^2
^{41}K	a_s	$212,560^{53}_{-118}$	212,552	-	$54,46^{41}_{-31}$	54,456	—
	a_t	$271,568^{22}_{-27}$	306,016	329^{1000}_{-55}	$167,29^7_{-8}$	167,28	163^{57}_{-12}
ⁱ V(r) potansiyeli için yarı-klasik metot kullanılarak hesaplandı. ⁱⁱ V(r) potansiyeli için Numerov metot kullanılarak hesaplandı. ⁱⁱⁱ Kay. [113], ¹ Kay. [115] ² Kay. [116] saçılma mesafesi conventional cross-dimensional thermalization tekniği ile ölçüldü.							

Çizelge 4.9. Singlet ve triplet seviyelerde aşırı soğuk Rb-K karışımlarının ortalama saçılma mesafesi a (atomik birim) ve yarı-klasik faz kayması

		^{39}K		^{40}K		^{41}K	
^{85}Rb	$\bar{a}_s(a.u.), \varphi$	93,65	339,254	94,056	342,202	94,450	345,072
	$\bar{a}_t(a.u.), \varphi$	68,39	101,089	68,690	101,967	68,977	102,823
^{87}Rb	$\bar{a}_s(a.u.), \varphi$	93,82	340,486	94,230	343,467	94,627	346,369
	$\bar{a}_t(a.u.), \varphi$	68,52	101,357	68,817	102,244	69,107	103,108

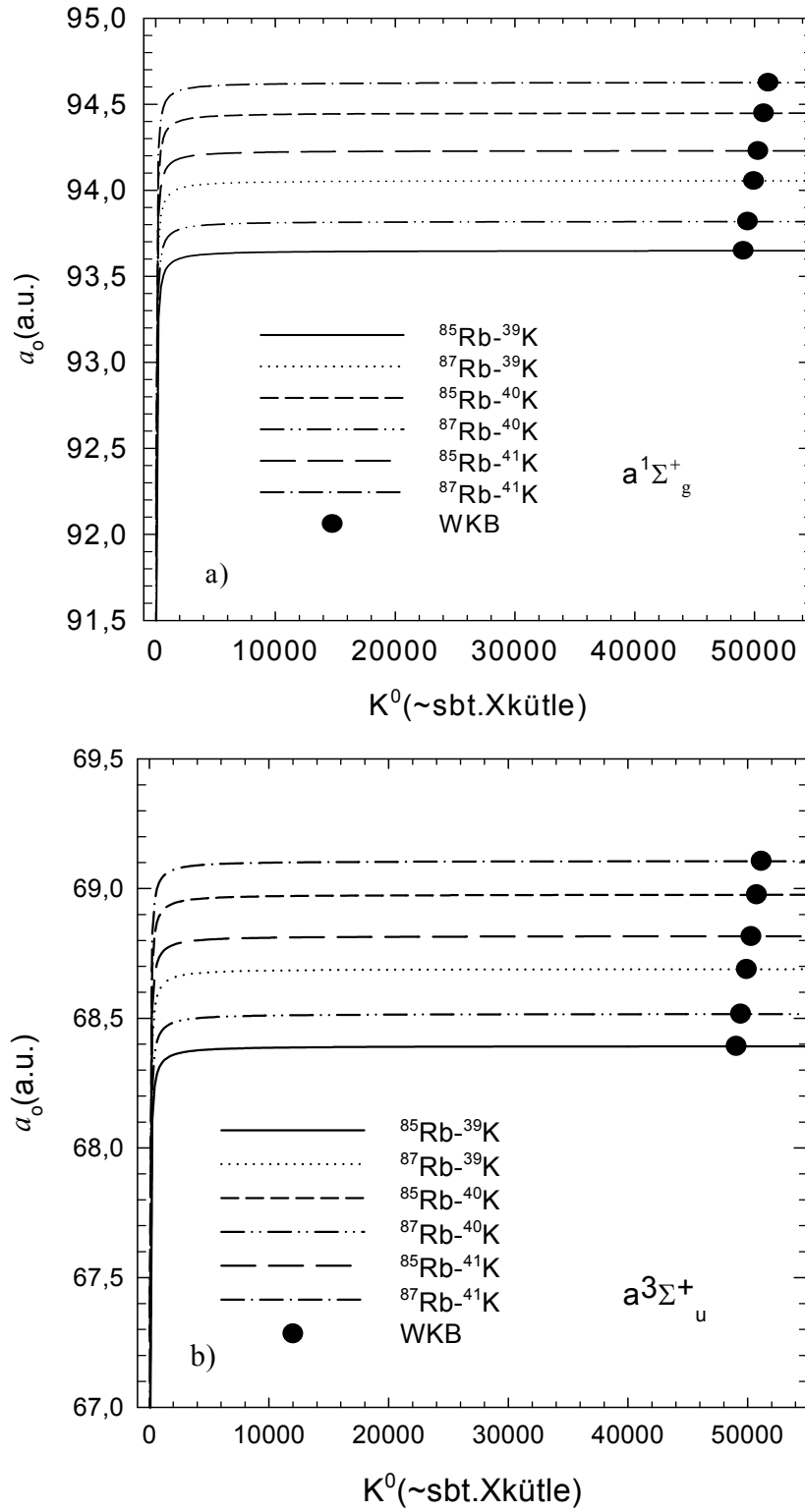
Bu tezdeki hesaplar boson-fermiyon olmasına göre en büyük ilgi ^{40}K - ^{87}Rb çiftinedir ve saçılma mesafesi negatif ve büyük olasılıkla Çizelge 4.8’de diğer sonuçlarla uyuşan türler arası saçılma mesafesi geniş bir değerdedir. Bu durum dejerene bölgenin aşağısında fermiyonik türlerin etkisinde iki atomun birlikte (sempatik) soğutulmasını ima eder [113].

4.2.6. QDT ile hesaplanılan Rb-K saçılma mesafelerin yakınsaklığı

Kuantum kusur Teori kullanılarak K_0 parametresi ile saçılma özelliklerin yakınsaklığının araştırılması ilginç bir sonuç vermektedir.

Şekil 4.6, Eş. 3.30’da verilen ortalama yarı-klasik formül ile QDT’nin Eş. 3.143’ü kullanarak çizilen singlet ve triplet saçılma mesafesi eğrilerini gösterir. Grafikske gösterimler K^0 sonsuza giderken QDT sonuçları Şekil 4.6’da yarı-klasik metodu ile elde edilen değerlere mükemmel olarak yakınsamasını verir. Bu yakınsama Şekil 4.6’da görüldüğü gibi bütün izotop etkileşmeleri için geçerlidir. Daha öncede hesap edilen aşırı soğuk rubidyum atomların saçılmasında saçılma mesafelerinin yakınsamasının korunduğunu açıkça görülmüştür.

Hatta bu benzer hesaplamalardan sonra bu iki metodun sonuçları sonuçlarını genelleleyebiliriz. Saçılma mesafesi ve etki menziline hesaplanması kullanılan yarı-klasiksel ve QDT metotları kullanılarak herhangi bir aşırı-soğuk atom-atom çarpışması için benzer sonuçlar verir(örneğin Kay. [117]). Yalnız saçılma mesafesi ve etki menzili değil diğer tipik saçılma özellikleride (faz kayması, dalga fonksiyonu ve tesir kesitleri) atomlar arası etkileşme potansiyelinin aynı durumunda benzer sonuçlar verecektir.



Şekil 4.6. K sonsuza giderken K parametrenin fonksiyonu olarak QDT ile hesaplanılan singlet a) ve triplet b) saçılma mesafesinin WKB sonucuna yakınsaması

4.3. Etki Menzili

4.3.1. Aşırı soğuk potasyum atomunun etki menzili

İki potansiyel için etki menzili Çizelge 4.10'da verilir. Eş. 3.50 ve Eş. 3.73'ten r_e 'nin hesapları arasında yakın uyuşma, kısmi-dalga denkleminin nümeriksel integralinin kesinliğini doğrular. Hesaplanan etki menzili değerleri geniş bir aralığa (92,804, 609,668) sahiptir. Çizelge 4.10'nun son satırında enerji bağımlı psodo potansiyel için Gao tarafından türetilen bir ifade kullanılarak hesaplanan etki menzili yukarıda verilen aralığın üzerindedir [118]. Fakat kesme yarıçapı 19,90a.u. değerinde potansiyeldeki belirsizliğin fazla olmasına göre elde edilen hata hesabı aralığında çizelgedeki Gao tarafından hesaplanan etki menzili değeri gözlenir. Ayrıca saçılma mesafesi gibi etki menzili yarı-klasik faza ve kesme yarıçapına bağlı olarak değişir.

Çizelge 4.10. Beş farklı kesme yarıçapında çarpışan potasyum atomların etki menzili r_e (a.u.)

Etki menzili(a.u.)			
$r_c(a.u.)$	$r_e^i(a.u.)$	$r_e^{ii}(a.u.)$	$r_e^{iii}(a.u.)$
18,80	98,157 ⁴⁶ ₋₉	98,155	98,175
18,85	194,285 ⁴²⁶ ₋₈₂	194,317	184,291
18,90	609,668 ⁴⁶¹⁴ ₋₄₁₃	608,977	609,396
18,95	92,804 ²⁸ ₋₁	92,809	92,810
19,00	175,410 ²⁸⁷ ₋₆₆	175,403	175,446
	2083 ^a		
ⁱ Eş. 4.4'deki potansiyel için yarı-klasik metot kullanılarak hesaplandı ⁱⁱ Eş. 4.4'deki potansiyel için Numerov metot kullanılarak hesaplandı. ⁱⁱⁱ LJ _{12,6} potansiyel için Numerov metot kullanılarak hesaplandı. ^a Fermi Pseudopotential yaklaşımı [118].			

Eş. 3.28 ve titreşim düzeylerin sayısı $n_s(\varphi/\pi)$ 'nın hesaplanması, saçılma mesafesi ve etki menzilin büyüklüğü potansiyel eğrilerin son titreşim bağ seviyelerin konumları ile yakın alakalıdır. Bu durum Levinson teoremi ile tutarlıdır. Levinson teoremi en yüksek düzeyin bağ enerjisi sıfıra giderken saçılma mesafesi $\pm$ sonsuza gider [75].

4.3.2. Aşırı soğuk Rubidyum atomunun etki menzili

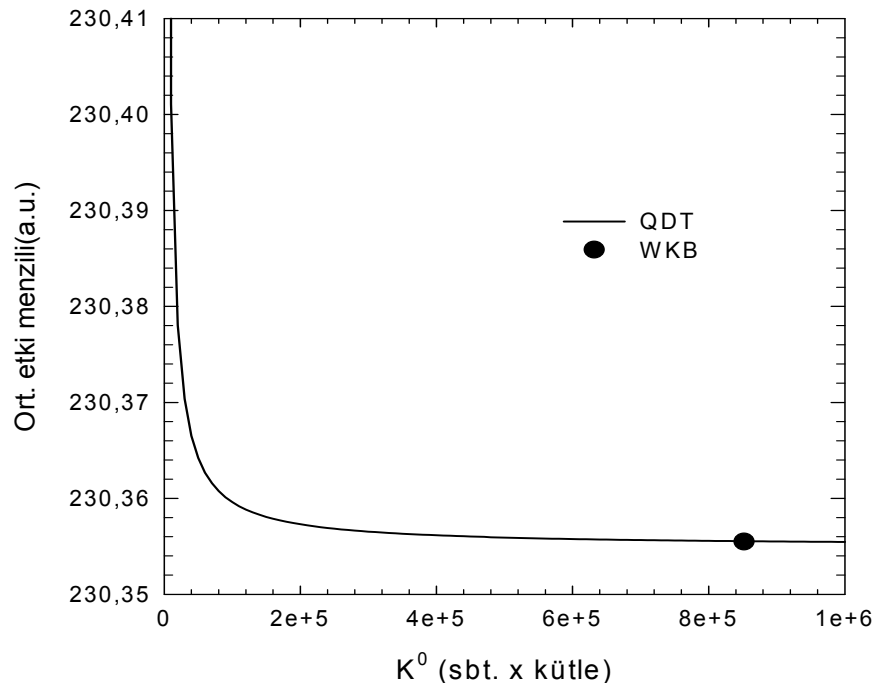
$V(r)$ potansiyeli ve farklı iki metot için hesap edilen etki menzili Çizelge 4.11'de verilir. Eş. 3.50 ve Eş. 3.73'den r_e 'nin hesapları arasında yakın uyuma kısmı dalga denkleminin nümeriksel integralinin kesinliğini aşırı soğuk potasyum atomda olduğu gibi doğrular. Çizelge 4.11'in son sütununda enerji bağımlı psodo için Gao tarafından türetilen bir ifade kullanılarak hesaplanılan etki menzili ile kesme yarıçapı 20,2934a.u. olan sonuçlarımız ile oldukça uyumludur. Ayrıca rubidyum atomu için ortalama etki menzili $\bar{r}_e = 230,357a.u.$ olarak bulundu. Etkileşme potansiyelindeki doğruluğun kesin olması WKB'ye dayalı metot da etki menzilin hata değişimi küçük olmaktadır.

Çizelge 4.11. Rubidyum atom saçılmasının farklı üç kesme yarıçapı için etki menzili(a.u.)

Etki menzili(a.u.)			
$r_c(a.u.)$	$r_e^i(a.u.)$	$r_e^{ii}(a.u.)$	$r_e^{iii}(a.u.)$
20,2400	$130,792^{+1}_{-1}$	130,804	
20,2500	$116,404^{+0.2}_{-0.2}$	116,432	
20,2934	$349,721^{+4}_{-4}$	349,889	347 ^a
ⁱ $V(r)$ potansiyeli için yarı-klasik metot kullanarak hesaplandı. ⁱⁱ $V(r)$ potansiyeli için Numerov metodu kullanarak hesaplandı. ^a Fermi psodo potansiyel yaklaşımı kullanarak hesaplandı [118].			

4.3.3. QDT ile hesaplanılan rubidyumun etki menzilinın yakınsaklığı

$K^0=0,176$ değeri için Eş. 3.145'i kullanarak etki menzili $r=349,778$ a.u. olarak hesaplandı ve Çizelge 4.7'deki değerlerle ile iyi uyuşmaktadır. Hatta bu sonuçlar WKB metoduna dayalı sonuçlar ile mükemmel uyuşmaktadır.



Şekil 4.7. K sonsuza giderken, K parametresinin fonksiyonu olarak QDT ile hesaplanılan etki menzilinın yakınsaklığı

Ortalama etki menzili Eş. 3.73'de saçılma mesafesi yerine ortalama saçılma mesafesi ($\bar{a}$) yerleştirilerek kolayca;

$$\bar{r}_e = \frac{\sqrt{\gamma}}{3} \left[\frac{\sqrt{2}\Gamma(1/4)}{\Gamma(3/4)} - \frac{4\sqrt{\gamma}}{\bar{a}} + \frac{\Gamma(3/4)}{\Gamma(1/4)} \frac{4\sqrt{2}\gamma}{\bar{a}^2} \right] \quad (4.12)$$

olarak elde edilir.

4.3.4. Aşırı soğuk Rubidyum-Potasyum çarpışmasının etki menzili

Rubidyum-potasyum izotop etkileşmeler için fazın fonksiyonunda Yarı-klasik metot ve Numerov metotları ile kullanarak hesaplanan etki menzili Çizelge 4.12’de sunulur. Altı farklı izotop etkileşmesi için iki farklı metotla hesaplanan etki menzili değerleri yakın uyuşmaktadır. Uydurma işleminde etkileşme potansiyelindeki belirsizliklere göre WKB’ye dayalı metot da hata hesabı yapılmıştır. Uydurma potansiyeldeki uyumun kesinliğine göre hata aralıkların daha düştüğü görülmektedir. Bunun yanında saçılma mesafesinin keskin değiştiği faz bölgesinde aynı oranda etki menziliindeki hata değişimi potansiyeldeki az bir değişmeye göre daha büyük olur.

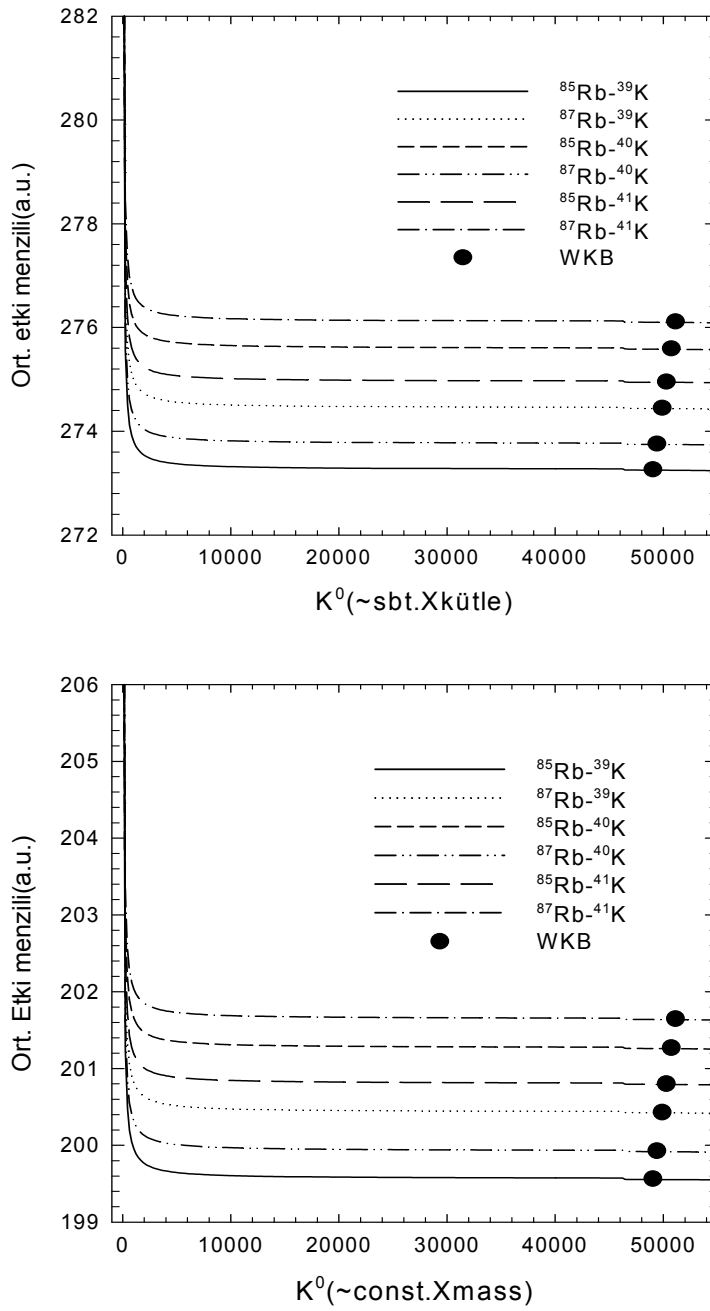
Çizelge 4.12. Rubidyum-potasyum izotoplarının saçılması için etki menzili r_e (a.u.)

		³⁹ K		⁴⁰ K		⁴¹ K	
		WKB ⁱ	Nüme. ⁱⁱ	WKB ⁱ	Nüm. ⁱⁱ	WKB ⁱ	Nüme. ⁱⁱ
⁸⁵ Rb	r_s (a.u.)	155,32 ⁴³ ₋₁₇	155,321	140,84 ²⁶ ₋₃	140,84	139,505 ²⁴ ₋₁₀	139,50
	r_t (a.u.)	295,49 ³² ₋₂₇	295,40	1534,4 ⁵²³ ₋₃₄₄	1534,4	124,99 ⁵ ₋₄	124,99
⁸⁷ Rb	r_s (a.u.)	511,37 ⁵⁵²⁵ ₋₃₃₆	511,39	6637 ⁶²⁴⁸ ₋₅₅₈₀	6635	983,86 ⁶⁵⁰ ₋₆₄₄	983,53
	r_t (a.u.)	838,65 ¹⁹¹ ₋₁₄₁	838,41	386,47 ³⁵ ₋₄₁	386,535	103,87 ² ₋₁	102,99
ⁱ V(r) potansiyeli için yarı-klasik metot kullanarak hesaplandı.							
ⁱⁱ V(r) potansiyeli için Numerov metodu kullanarak hesaplandı.							

Rubidyum-potasyum izotop etkileşmesi için hesaplanan etki menzilinin boyutu yaklaşık olarak rubidyum veya potasyum atomlarının etki menzili boyutları ile aynı mertebede olmasına karşın bu çizelgede boson-fermiyon etkileşmesine uygun ⁸⁵Rb-⁴⁰K’un triplet ve ⁸⁷Rb-⁴⁰K’un singlet seviyelerinin etki menzili boyutu daha büyüktür. Bu etkileşmelerin saçılma mesafesinin kararsızlığı uzun mesafelerde boson ve fermiyon türler arasında ağır bir etkileşmenin olduğuna kanıttır. BEC için bu ağır etkileşmeyi yenebilmek için atomları daha fazla soğutulması gerektirir. Bu da teknolojik sınırların ötesinde soğutulmasıdır.

4.3.5. QDT ile hesaplanılan rubidyumun potasyumun etki menzilin'in yakınsaklığı

Şekil 4.8, QDT sonucu Eş. 3.145 ve ortalama WKB formülünden elde edilen Eş. 4.12 yardımıyla çizilen etki mesafesi eğrilerini gösterir.

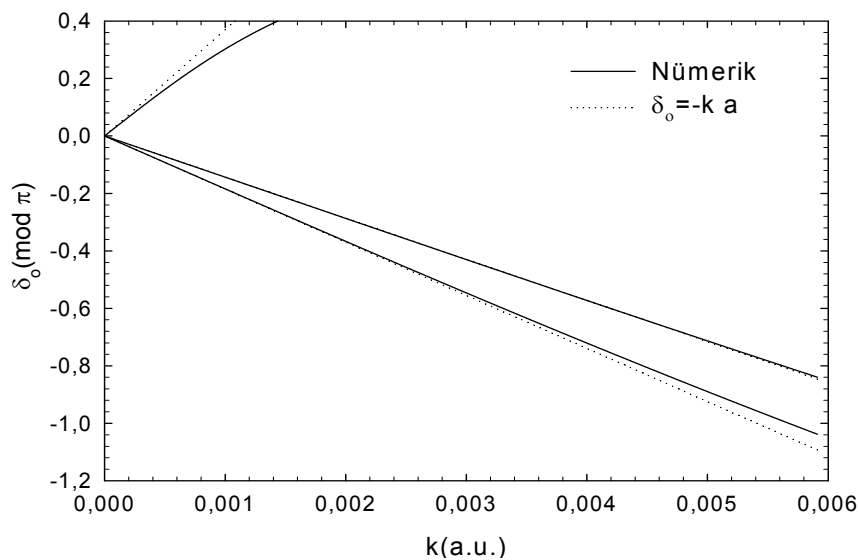


potansiyeli için eşit fazda ϕ faz kaymaları(üçgen). Çember çizgi $\delta_0 = -a k'$ yı temsil eder

$l = 0$ için Momentum sıfıra giderken beş farklı kesme yarıçapı ve her iki potansiyel için faz kaymaları Şekil 4.9'da ayırt edilemez. Ayrıca bu durumda düşük enerji saçılması daima $l = 0$ kısmı dalga ile baskındır ve $\delta_0 = -ka$ uygun faz kayması ile verilir. Bu denklemden hesaplanan faz kayması Şekil 4.9'da verilir. Bu şekilde gösterildiği gibi nümerik hesaplarımızla iyi uyuşmakta ve doğrusal davranış göstermektedir.

4.4.2. Aşırı soğuk rubidyum saçılmasının faz kayması

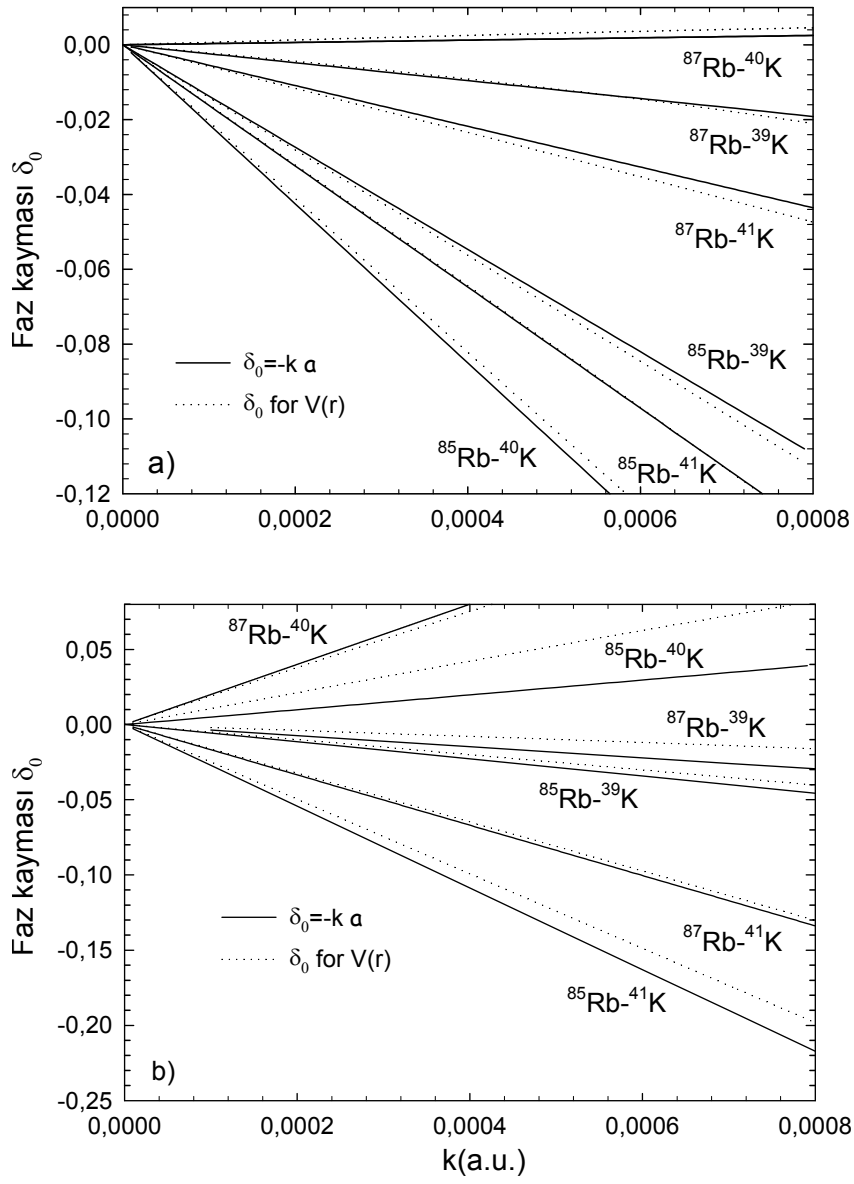
Aşırı soğuk rubidyum atomunun $V(r)$ potansiyelinde üç farklı kesme yarıçapı kullanılarak nümerik ve $\delta_0 = -a k$ denkleminde faz kaymaları hesabı Şekil 4.10'da verilmektedir. Bu şekilde görüldüğü gibi her kesme yarıçapı da iki farklı hesap oldukça tutarlıdır. Potasyum atomunda olduğu gibi faz kaymaları düşük limitlerde doğrusal davranış gösterir. Bu yalnız düşük sıcaklıklarda baskın s-saçılmanın özelliğidir. Ayrıca faz kaymasının negatif (pozitif a) veya pozitif (negatif a) olması potansiyelin sırasıyla çekici ve itici olmasından kaynaklanır.



Şekil 4.10. Farklı kesme yarıçaplarında $V(r)$ potansiyeli için hesaplanılan s-dalga faz kaymaları (katı çizgiler). Noktalı çizgiler $\delta_0 = -a k$ ile hesaplanan faz kaymalarını gösterir

4.4.3. Aşırı soğuk rubidyum potasyum çarpışmasının faz kayması

Şekil 4.11’de verilen faz kaymaları farklı izotop etkileşmelerin karışımları için singlet ve triplet seviyelerde nümerik olarak hesaplanır. Momentum sıfıra giderken $l = 0$ için s-faz kaymaları singlet seviyede hemen ayırt edilemezdir. Buna karşın Şekil 4.11’de triplet seviye için zayıf bir uyum gözlenir. Fermiyon-boson veya boson-boson’dan oluşan gaz karışımı kritik sıcaklık aşağısında semptomatik soğutmanın etkisi ile daha düşük kuantum seviyede yoğunlaşır. Atomlar boson olduğu zaman atom bulutu düşük sıcaklıklarda aynı kuantum seviyede olur. Eğer atomlar fermiyon veya fermiyon-bozon karışımı ise soğutma dereceli olarak atomlar daha yakın bir araya getirilir ve atomların her biri daha düşük enerji seviyesinde oluşur. Bu durum “Fermi denizi” olarak adlandırılır [100]. Bu durumda düşük enerji saçılması aşağıda verilen faz kaymasına uygun daima $l = 0$ kısmı dalga ile baskındır: $\delta_0 = -ka$. Şekil 3’de gösterildiği gibi faz kaymaları zayıf bir uyuma sahip. Bu yüzden ^{40}K - ^xRb ($x=85, 87$) atomların çarpışmasında saçılma mesafeleri ^{40}K - ^{85}Rb ’nin singlet seviyesi aksine yoğunlaşmanın bozulmasına karşın kararsızdır. Fermiyon-boson dan oluşan karışımlar, Çizelge 4.9’da bildirildiği gibi boson-boson etkileşmelerine göre çok daha çekicidir. Bu durumda fermiyonik bulut bosonik buluta göre Paul dışarlama ilkesi ile tanımlanılan kesin bir hacmin aşağısına küçülmez [100].



Şekil 4.11. Singlet ve triplet seviyelerde(Katı çizgiler) $V(r)$ potansiyeli için hesaplanan s-dalga faz kaymaları. Noktalı çizgiler $\delta_0 = -a k$ ile hesaplanan eğriler göstermektedir

4.5. Tesir Kesiti

4.5.1. Aşırı soğuk potasyum çarpışmasının tesir kesiti

Toplam tesir kesiti son seviyelerin diferansiyel tesir kesitleri toplanarak elde edilir. Toplam elastik tesir kesiti, Eş. 2.13 ile tanımlanır. Triplet seviyede sıfır enerji sınırında $l = 0$, $\sin \delta_0 \cong \delta_0$ sonucuna göre toplam elastik tesir kesiti $\sigma_{el}^t = 4\pi a^2$ eşitliğine dönüşür. Bosonlar için saçılma tamamıyla s-dalgada ise toplam tesir kesiti $\sigma_{tot} = 8\pi a^2$ olur.

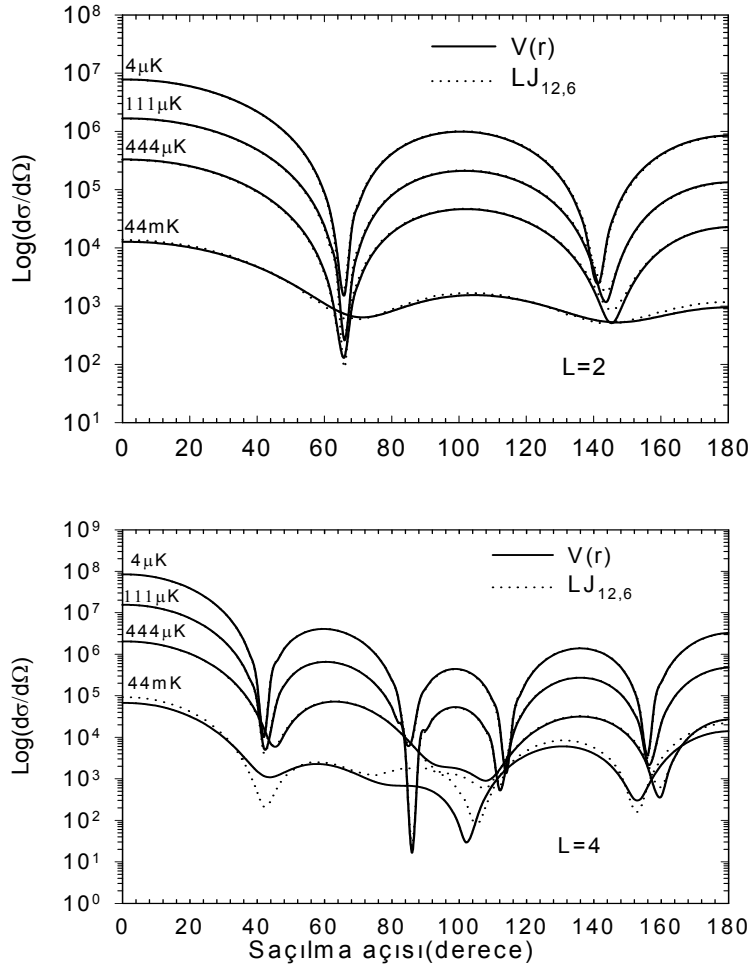
Çizelge 4. 13. Aşırı-düşük enerjilerde iki potansiyel için hesap edilen faz kaymaları, tesir kesitleri ve toplam tesir kesitleri

Log ₁₀ E(a.u.)→		-11,1950		-9,7518		-9,1496	
l→		2	4	2	4	2	4
δ_ℓ (mod π)	LJ _{12,6}	2,0677x10 ⁻¹²	1,772x10 ⁻¹¹	2,394 x10 ⁻¹³	7,217 x10 ⁻¹³	8,288 x10 ⁻¹⁵	4,077x10 ⁻¹⁵
	V(r)	2,0677x10 ⁻¹²	1,772 x10 ⁻¹¹	2,394 x10 ⁻¹³	7,217 x10 ⁻¹³	8,342 x10 ⁻¹⁵	4,077x10 ⁻¹⁵
σ_ℓ (μm^2)	LJ _{12,6}	0,4851	0,5268	0,9896	0,9187	0,3163	-0,1198
	V(r)	0,4851	0,5268	0,9896	0,9187	0,3173	-0,1198
$\sigma_{tot.}$ (μm^2)	LJ _{12,6}	3,1572					
	V(r)	3,1264					
	WKB	3,1498					

Faz kaymaları (δ_l) ve tesir kesiti (σ_ℓ) iki farklı potansiyel için açısal momentumun $l = 2,4$ değerleri ve farklı enerjilerde hesaplandı ve Çizelge 4.13’de listelenir. Bu çizelge de iki potansiyel için verilen faz kayması çok yakın uyuşma verir.

Birkaç açısal momentum için elde edilen tesir kesitleri yalnız sıfır-enerjili yarı klasik faza ϕ bağlıdır. Beş farklı kesme yarıçapında iki farklı potansiyel için Numerov metot kullanılarak hesaplanılan toplam tesir kesiti (σ_{tot}) Çizelge 4.13’ün ilk

sütununda



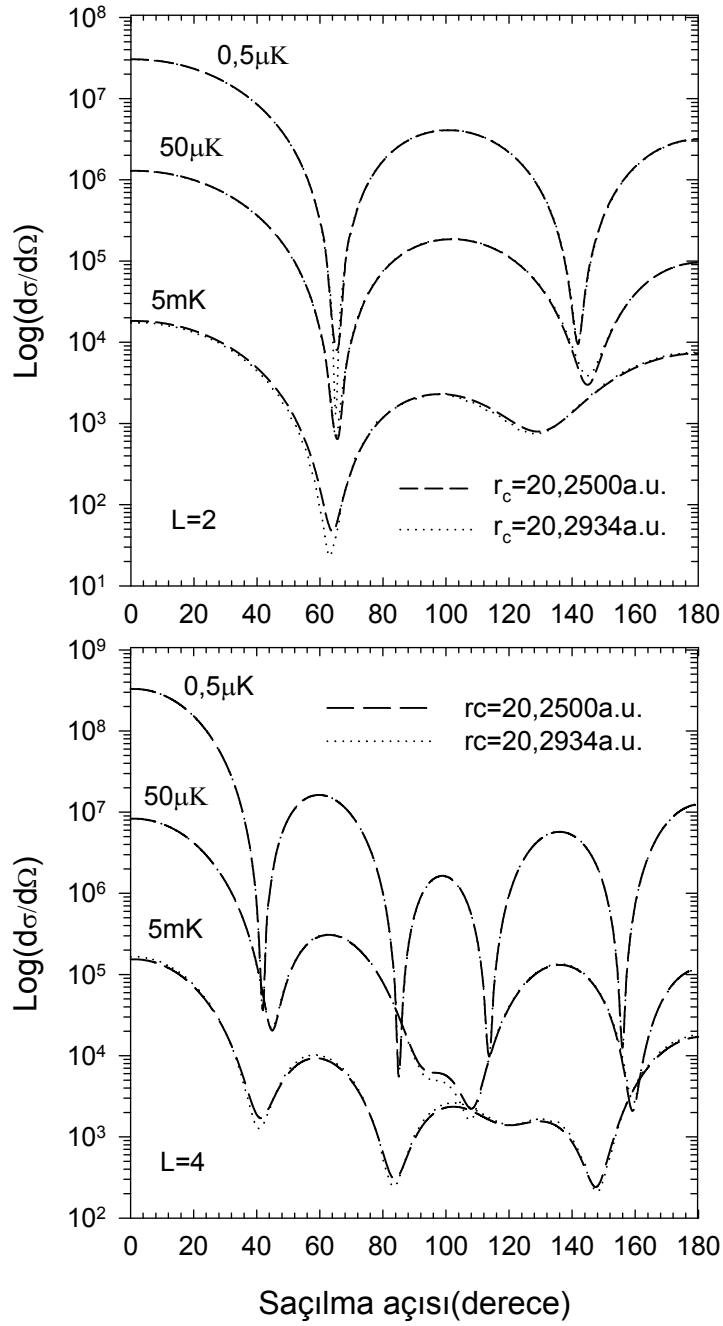
Şekil 4. 12. Farklı sıcaklıklarda ve açısal momentumun artan değerlerinde potasyum atomunun saçılması için diferansiyel tesir kesitleri (seçilen $r_c=18,75\text{a.u.}$ kesme yarıçapı için)

ve LJ₁₂₋₆ ve Eş. 4.4’de verilen potansiyeller için ortalamaları Çizelge 4.13’ün ikinci sütununun yedinci ve sekizinci satırlarında karşılaştırılarak verilir. Ayrıca yarı-klasik metot kullanılarak $8\pi a^2$ ile hesaplanılan toplam tesir kesiti bu tablonun son satırında verilir. Elde edilen tesir kesitleri arasında iyi bir uyuma vardır.

Şekil 4.12, elastik çarpışan potasyum atomlarının triplet seviyesi için saçılma açısına bağlı diferansiyel tesir kesitleri (DTK)’ni gösterir. Atomların tamsayı aşırı ince kuantum sayısının boson olmasına göre yalnız çift kısmı dalgalar DTK’ya katkıda bulunur. Şekil 4.12’de DTK iki potansiyeli ve baskın $l = 2,4$ kısmı dalgalar için sıcaklığa ve kesme yarıçapına bağlı olarak verilir. Düşük sıcaklıklarda potansiyeller için DTK’lar iyi uyumaktadır. Ayrıca düşük enerjide DTK piki yeterince derindir. Çünkü baskın kısmı dalgalar potasyumun saçılmasına aşırı derecede katkıda bulunur. Şekil 4.12’de sıcaklığın geniş değerlerinde DTK’lerin zayıf piklerini gözlemleriz. Ayrıca düşük açısız momentumda grafik eğrileri daha yüksel açısız momentuma göre çok daha düzenlidir.

4.5.2. Aşırı soğuk rubidyum çarpışmasının tesir kesiti

Şekil 4.13, elastik çarpışan Rubidyum atomlarının triplet seviyesi için diferansiyel tesir kesitleri (DTK)’ni gösterir. Atomların tamsayı aşırı ince kuantum sayısının boson olmasına göre yalnız çift kısmı dalgalar DTK’ya katkıda bulunur. Şekil 4.13’de DTK iki potansiyeli ve baskın $l = 2,4$ kısmı dalgalar için sıcaklığa ve kesme yarıçapına bağlı olarak verilir. Düşük sıcaklıklarda farklı kesme yarıçaplarında potansiyeller için DTK’lar iyi ayırt edilemez. Ayrıca düşük enerjide DTK piki yeterince derindir. Çünkü baskın kısmı dalgalar rubidyum saçılmasına aşırı derecede katkıda bulunur. Geniş sıcaklıklarda Şekil 4.13’de DTK’ların zayıf piklerini gözlemleriz. Ayrıca düşük açısız momentumda grafik eğrileri daha yüksel açısız momentuma göre çok daha düzenlidir.



Şekil 4.13. $r_c=18,75\text{a.u.}$ kesme yarıçapında ve $L=2, 4$ açısal momentumda farklı sıcaklıklarda rubidyum atomun saçılması için diferansiyel tesir kesiti

4.5.3. Aşırı soğuk rubidyum potasyum çarpışmasının tesir kesiti

Diferansiyel tesir kesiti ve faz kayması kullanılarak elastik tesir kesitleri hesaplanır. $^x\text{Rb}+^y\text{K}$ (x;y izotopları verir) çarpışması için Numerov metodu kullanılarak, farklı enerji açısal momentumun $l = 2,4$ değerleri için faz kaymaları(δ_l) ve tesir kesitleri ($d\sigma_l$) elde edildi. Bu değerler Çizelge 4.14'de logaritmik skalada listelenir. Çok düşük enerjiler için çizelgede δ_l ve $d\sigma_l$ değerler çok çarpışmanın sahip olduğu geniş değerlere sahiptir.

İki atom arasında Elastik singlet ve triplet tesir kesitleri,

$$\sigma_{el.}^{S,T} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l^{S,T}, \quad (4.13)$$

ile verilir. Burada S ve T singlet ve triplet seviyelere karşılık gelir.

Çizelge 4. 14. Numerov metodu kullanılarak $V(r)$ için hesaplanan tesir kesitleri ve faz kaymaları

		$^x\text{Rb}-^y\text{K}$							
	Log10(E)	L	Çar.	85-39	85-40	85-41	87-39	87-40	87-41
δ_0	-14,99	2	10^{-3}	5,17	4,93	5,86	3,28	4,48	2,69
		4	10^{-3}	5,50	5,57	6,61	3,64	5,36	3,36
	-11,57	2	-	0,256	0,245	0,289	0,165	0,223	0,136
		4	-	0,271	3,261	0,322	1,562	0,265	0,169
$d\sigma(\text{m}^2)$	-14,99	2	10^{-12}	5,00	4,92	7,67	2,24	4,73	1,58
		4	10^{-12}	3,63	3,55	5,61	1,62	3,43	1,14
	-11,08	2	10^{-12}	4,57	4,52	6,63	2,15	4,33	1,53
		4	10^{-12}	3,32	3,26	4,85	1,56	3,14	1,12

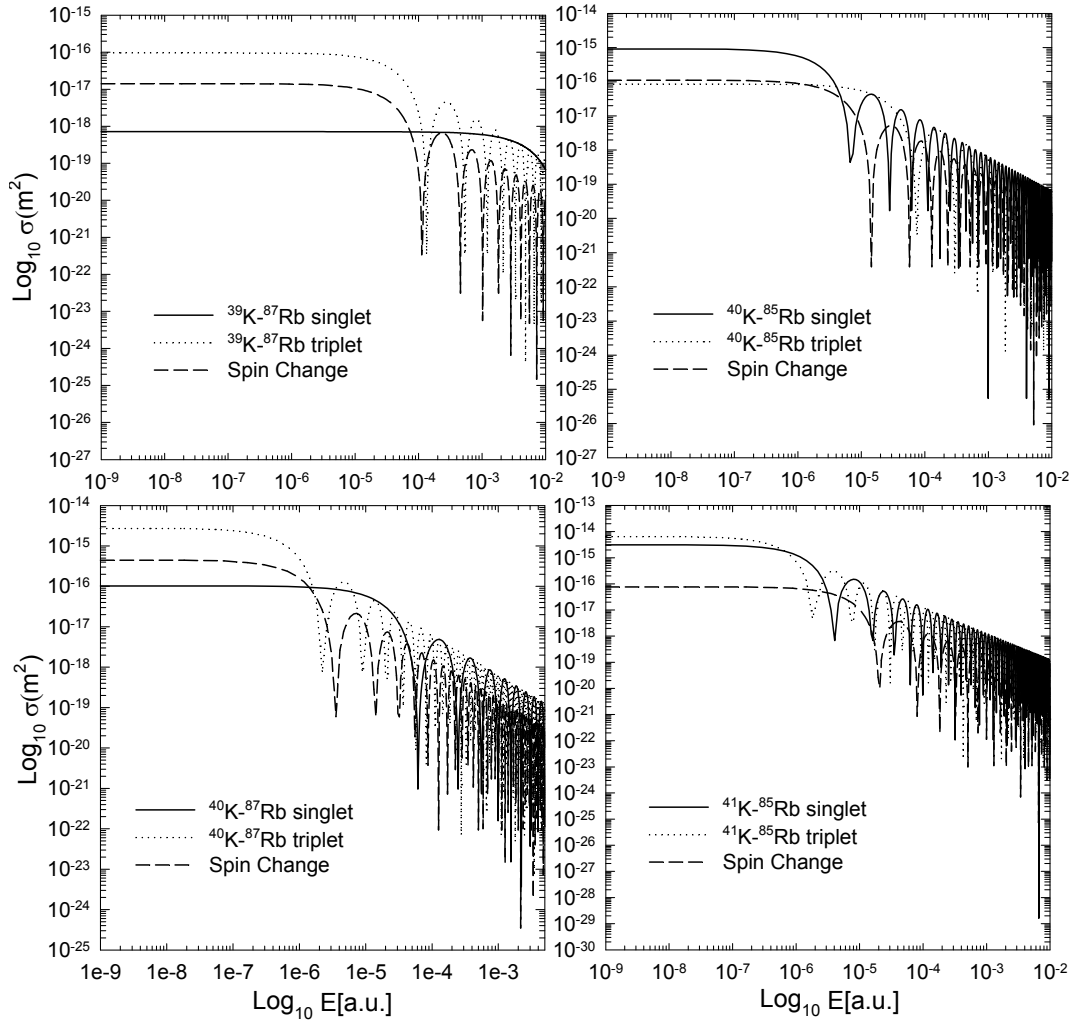
Karışık alkali metal atomların $l=0$ katkıları ile baskın aşırı-soğuk gazda tesir kesitleri boson-boson ve boson-fermiyon sistemler için $\sigma_{el.}^{S,T} = 8\pi a_{S,T}^2$ ve $\sigma_{el.}^{S,T} = 4\pi a_{S,T}^2$ ile tanımlanır [119]. Spin-değiş dokuş tesir kesitleri singlet ve triplet faz kaymalarından hesaplanır,

$$\sigma_{sc} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2(\delta_l^T - \delta_l^S). \quad (4.14)$$

Düşük enerjilerde, bu parametre $\sigma_{sc.} = \pi(a_T^2 - a_S^2)$ olur [72].

Ayrıca spin-kayma çarpışmalar olarak bilinen tesir kesiti tuzaktan kaçan atomların bilgisini verir [120]. Seçilen karışık atomlar için sıfır enerji limitinde s-dalga tesir kesitleri $^{40}\text{K}-^{85}\text{Rb}$ etkileşmesinin singlet ve triplet seviyeleri için sırasıyla $9,213 \times 10^{-16} \text{m}^2$ ve $8,584 \times 10^{-17} \text{m}^2$ ve $^{39}\text{K}-^{87}\text{Rb}$ etkileşmesinin singlet ve triplet seviyesinde sırasıyla $7,1933 \times 10^{-19} \text{m}^2$ ve $9,5797 \times 10^{-17} \text{m}^2$ olarak hesaplanır.

Spin-yük tesir kesitleri ayrıca $^{40}\text{K}-^{85}\text{Rb}$ için $3,9239 \times 10^{-16} \text{m}^2$ ve $^{39}\text{K}-^{87}\text{Rb}$ için $1,4139 \times 10^{-17} \text{m}^2$ olarak hesaplanır. (m^2) biriminde enerjiye bağlı tesir kesitlerin değerleri $10^{-2}(\text{a.u.})$ mertebesine kadar Şekil 4.14’de gösterilir. Düşük enerjilerde, tesir kesitleri s-dalga ve daha az genişlikte p-dalga ile tanımlanır. Tesir kesitleri çok düşük enerjilerde sabittir. Ayrıca sıfır-enerji tesir kesitleri sabit plato bölgesinden elde edilir. Elde edilen sabit tesir kesitleri yukarıda bulunan değerler ile iyi uyumaktadır. Singlet ve triplet tesir kesiti artan enerji ile azalmaya yönelir. Fakat azalma daha yüksek kısmı dalga katkıları ile üst üste biner. Kısmı dalgaların küçük sayıda katkıları ile osilasyonlar oluşur. Şekilde görüldüğü gibi keskin yapılar ‘biçim’ rezonanslarına göredir. Grafikler düşük enerjilerde daha az kısmı dalga saçılmaya katkıda bulunur. Bu şekilde fermiyon- boson $^{85,87}\text{Rb}+^{40}\text{K}$ çarpışmalar farklı özellikler gösterir. $^{85}\text{Rb}+^{40}\text{K}$ çarpışması $^{87}\text{Rb}+^{40}\text{K}$ çarpışmasından daha kararlıdır. Çünkü $^{87}\text{Rb}+^{40}\text{K}$ çarpışması, her iki seviye için enerjinin azalan değerleri ile daha az kısmı dalgaya sahip olur. Toplam tesir kesitleri, aynı yüksek enerji bölgesinde aşırı düşük enerji değerindedir.

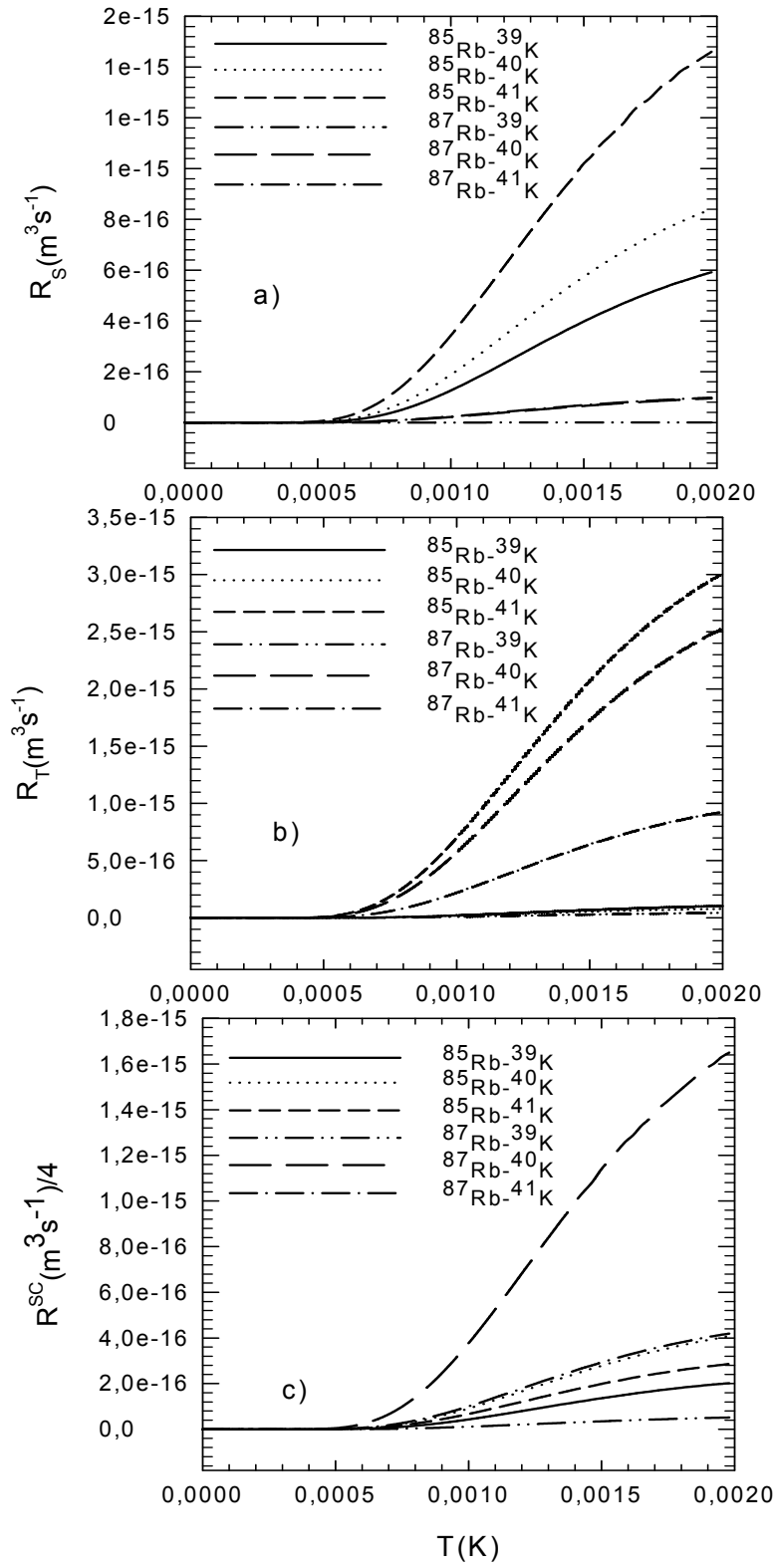


Şekil 4.14. Karışık rubidyum-potasyum izotopları için enerjinin fonksiyonu olarak spin-yük tesir kesitleri

Genel olarak hız dağılımı kinetik enerji ile karakterize edilen Maxwellian'dır ve ortalama elastik ve spin değiş dokuş tesir kesiti tanımlanır:

$$\bar{\sigma}(T) = \frac{1}{(k_B T)^2} \int_0^\infty \sigma(E) E e^{(-E/k_B T)} dE. \quad (4.15)$$

Rb+K buharında izotopların her bir çiftinin sıcaklığının eşit olması varsayılarak uygun oran sabiti,



Şekil 4. 15. Karışık Rubidyum-potasyumun farklı izotopların singlet a) ve triplet b) ve değiş dokuş oran sabiti c)

$$\Re^{S,T,SC} = \left[\frac{8k_B T}{\pi\mu} \right] \overline{\sigma}(T). \quad (4.16)$$

ile verilir. 1 K'ne kadar T için spin yük oran sabiti (cm^3s^{-1}) Şekil 4.15'de verilir.

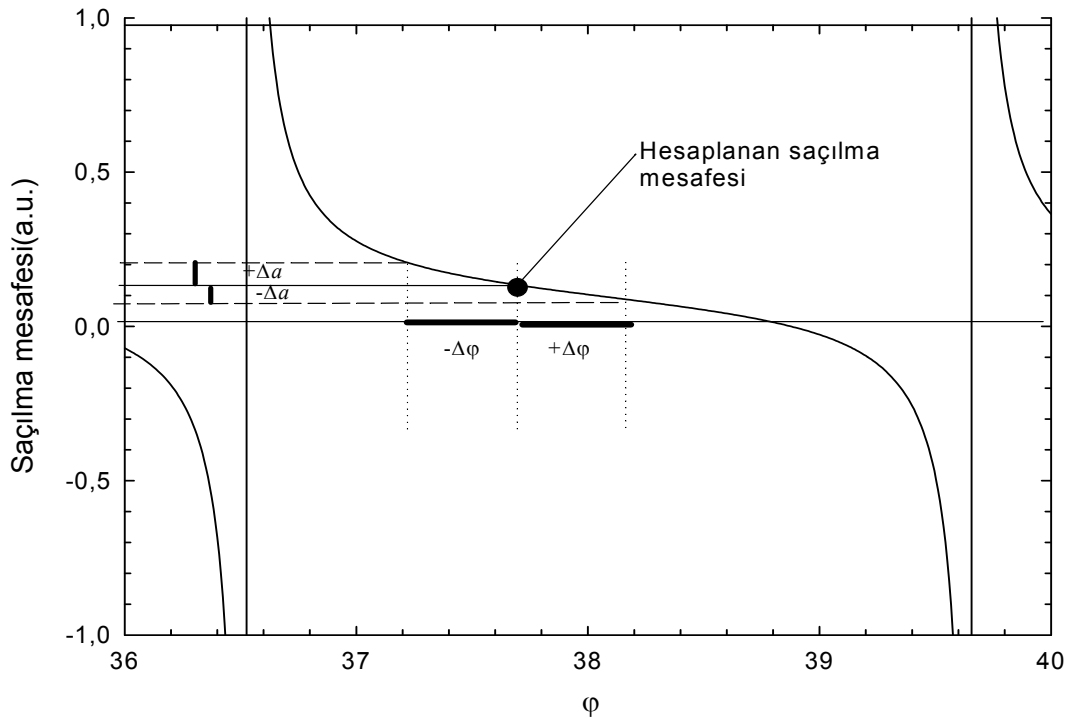
Singlet ve değiş dokuş oran sabitleri düşük sıcaklıklarda sabit bir değere yönelir. Ortalama singlet ve değiş dokuş tesir kesiti yukarıda verildiği gibi sırasıyla $4\pi a^2$ ve $\pi(a^S - a^T)$ ile verilir. Bu durumda singlet seviye için sabit değer $4\pi(a^S)^2(8k_B T / \pi\mu)^{1/2}$ olarak kay. [120]'da tanımlanır. Değiş dokuş sabitini $\pi(a^S - a^T)^2(8k_B T / \pi\mu)^{1/2}$ olarak bulunur. Burada a_0^S, a_1^T sırasıyla s-singlet ve p-triplet saçılma mesafeleridir. Bu sıcaklıklarda a_0^S, a_1^T 'ye göre çok etkilidir. Artan enerjilerde spin oran sabitleri Şekil 4.15'de gösterildiği gibi her iki singlet ve triplet seviyeler için keskin bir artış gösterir.

4.6. Hata Hesabı

Saçılma özellikleri, etkileşme potansiyelin $V(r)$ ayrıntılarına duyarlı olmasından dolayı, hesaplanan özelliklerden saçılma mesafesi ve etki mesafesi, bilinen deneysel ve teoriksel belirsizlikler içinde singlet ve triplet potansiyeldeki değişikliklere bağlılığı ile karardır. Bu belirsizlikler etkileşme potansiyelde uzun menzilli kısmın Wan der waals parametrelerine, gözlenen titreşim seviyelerin bağ enerjilerine, potansiyelin derinliğine ve potansiyelin iç ve dış dönüm noktalarından kaynaklanabilir. Bu belirsizliklere bağlı olarak deneysel ve teoriksel potansiyel arasında farklılıklar $\Delta V(r_i)$ elde edilir. Bu potansiyeldeki değişimler yarı klasik değişimleri bulmak için kullanılır. Bu fazdaki hatalar toplam $\Delta\varphi$ 'yi hesaplamak için toplanır. Daha sonra toplam faz, saçılma mesafesi ve etki mesafesindeki değişime dönüştürülür. Şekil 4.16 genel olarak fazdaki hata değişimine göre saçılma mesafesindeki hata değişimin bulunmasını gösterir. Bu şekilde yarı klasik faz, saçılma mesafesine tanjant fonksiyonu ile bağlı olduğu görülmektedir. Saçılma mesafesi, fazdaki az bir değişikliğe fazlaca duyarlıdır. Bu şekilde hata hesabının

nümerik metot için geçerli olduğunu söyleyebiliriz. Çünkü nümerik metot da hesaplarımız yarı-klasik metoda olduğu gibi potansiyele ağır bir şekilde bağlıdır ve her iki metot da saçılma mesafeleri, aynı potansiyele tanımlanan faz kaymalarının tanjantı şeklinde hesaplanır. Saçılma mesafesi hesapları verilen çizelgelerde görüldüğü gibi yarı klasik ve nümerik metotlar için büyük uyuşmanın olması, nümerik metot için hata hesaplarında aynı doğrultuda bulunabileceğini açıkça göstermektedir. Literatürde bu yönde nümerik sonuçların yerine yarı-klasik sonuçlardan hesaplanan hata hesapları verilmektedir [121].

Ayrıca bu yorum potasyum etkileşmesi için uygulanan tipik LJ_{12-6} potansiyel kullanılarak elde edilen saçılma mesafesi içinde geçerli. Çünkü LJ_{12-6} potansiyeli için elde edilen faz daha önce bahsedildiği üzere tamamıyla yarı-klasik faz değeri ile aynı olur. Bu potansiyel tamamıyla yarı klasik olarak elde edilen fazdan yararlanılarak elde edilmiştir. Dolayısıyla elde edilecek hata hesapları sonuçlarında aynı olacaktır.



Şekil 4. 16. Hata hesabının yarıklasik saçılma mesafesinden hesaplanması

5. SONUÇ VE ÖNERİLER

1995’de Anderson ve arkadaşları tarafından ^{87}Rb atomunun yoğunlaşması yapılmasından sonra yaklaşık 20 ülkede bir çok atom ve molekül fizikçisinin dikkatini çeken BEC çalışmaları yapıldı. Birçok devlet destekli ulusal laboratuvar kuruldu. Avrupa birliği içinde ortak projeler ile BEC çalışmalar yapıldı. Bu alanda çalışan fizikçilerin isimlendirmesi ile yeni fizik, fiziğin her alanında çalışılmaya başlandı. Alkali metal atomlarından 1-A grubunun birinci sırasındaki H’den başlayarak Fr’a kadar tüm atomların BEC yoğunlaşması gerçekleştirildi. Son zamanları alkali metal atomların kendi içerisinde karışık olanların yoğunlaşmaları gerçekleştirilmektedir. Bir atomun yoğunlaşması, atom lazerleri, farklı amaçta elektronik aygıt yapma gibi dolaylı hedefler ortaya koydu. Bunlar kısmen gerçekleşti. Direk olarak yoğunlaşma durumunda yoğun atomik çarpışmalar, tuzaklama, lazer soğutma, yoğunlaşma bulutlarının kolektif uyarılması, dönmesi ve sipinör etkileşimleri gibi bir çok olay gözlemlendi.

Yoğun atomik çarpışmalar BEC’nin oluşmasında en önemli olaydır. MikroKelvin sıcaklık bölgesine ulaşma iki işlemin birleştirilmesi ile mümkün olur. Manyetik tuzakta lazer soğutma önce gazı soğuturarak atomların daha aşağı seviyelerde yoğunlaşmaya zorlanır. İkinci durumda zorlamalı buharla soğutma, tuzak derinliği azaltılır, ve yoğun ikili çarpışmalar sonucunda enerjisi fazla olan atomların kaçması sağlanır, geriye kalan atomların yeniden termalize olarak daha düşük sıcaklıklara gider. İkili çarpışmalara zemin oluşturan Zayıf etkileşen Bose gazının temel teorisi 1940 lardan başlayarak 1960’lara kadar geliştirildi. Bu gazın özelliği üç boyutlu çarpışmalardan ziyade iki boyutlu (Binary) çarpışmaların çok sıklıkta olmasıdır. Atomlar arasındaki mesafe $n^{-1/3}$, s-saçılma mesafesinden çok daha geniş olduğu zaman ikili çarpışmalar olur yani $na^3 \ll 1$ (genelde $na^3 \approx 10^{-6}$)’dir. Saçılma mesafesinin genliği atomlar arası kuvvetin şiddet menziline verir (genelde alkali atomlar için $\sim 1\text{-}5$ nm boyutundadır). Geniş yoğunlaşmanın kararlılığı itici etkileşme (pozitif a) gerektirir. Çekici etkileşmeler için (negatif a) yoğunlaşma eğer kesin bir hacimde büyürse bozulmaya karşı kararsız olur.

Yaptığımız bu çalışmada aşırı soğuk ortamda $K+K$, $Rb+Rb$ ve karışık $K + Rb$ atomik çarpışmaların BEC'nin oluşmasında önemli saçılma parametreleri elde edildi [117, 122, 123]. Bunun için atomların etkileşmesini tarif eden potansiyel biçimleri tespit edildi. Etkileşme potansiyeli itici(exchange) ve çekiçi(van der waals) olmak üzere iki kısmından oluşur. Saçılma mesafesi uzun menzilli terimden kaynaklanır. Burada kısa menzilli potansiyel, uzun menzilli potansiyelin kısa menzilde davranışını kontrol etmek için kullanılır. Çoğu zaman literatürde kısa menzilli potansiyel kullanılmaz. Bunun yerine potansiyelin uzun menzilli kısımda asimptotik dönüm noktası göz önüne alınarak hesaplama yapılmaktadır ve kısa menzilde deneysel uyuma bağlı olmayan ufak ayarlamalar yapılmaktadır. Bizim bu çalışmamızda çok kesin olarak kısa menzilli terim üstel fonksiyon yardımı ile belirlenmiştir. Kısa menzilde, uzun menzilli potansiyelin etkisini yok etmek için uzun menzilli potansiyelde kesme fonksiyonu ile bir çarpan eklenmiştir. Bu kesme fonksiyonu kesme yarıçapı ile kontrol edilmektedir.

Triplet $K+K$ etkileşme potansiyeli için floresan spektroskopisi den alınan triplet seviyede deneysel verilere uydurma yapılarak yüksek R^2 değerinde (0,9900) potansiyel biçimi elde edilmiştir. Potansiyel uyumluluğundaki az oranda belirsizliğe karşın 5 farklı kesme yarıçapı kullanılmıştır. Her kesme yarı çapı için yarıklasik metot için deneysel ve teoriksel potansiyel arasındaki fark ortalama $\sim \pm\%1$ olarak belirlenmiştir. Triplet $Rb+Rb$ etkileşme potansiyeli, farklı üç kesme yarı çapında , $r = 7$ 'den 20 a.u.'ye *ab-initio* kullanarak Krauss tarafından elde edilen eğriye uydurma yapılarak bulundu. Kesme yarıçapı $20,3934$ a.u. olan uydurma, R^2 değerine (0,99993) göre yüksek hassasiyetle bulundu. Farklı kesme yarı çapı için yarı klasik metot için deneysel ve teoriksel potansiyel arasındaki fark ortalama $\sim \pm\%0,007$ olarak belirlenmiştir.

Singlet ve triplet $K+Rb$ etkileşme potansiyeli, en iyi kesme yarıçapında geniş menzil için *ab-initio* kullanılarak Rousseau [94] tarafından elde edilen potansiyel dataları ile karşılaştırılarak sırasıyla en iyi singlet ve triplet R^2 (0,990, 0,999) değerleri için elde edildi. Karışık $K+Rb$ izotopların etkileşme potansiyeli için diğer potansiyel biçimlerinden farklı olarak hem itici etkileşmede hemde çekici etkileşme

terimlerinde potansiyelin en iyi uydurma sağlaması için uydurma çarpanları eklendi. Bu sayede yüksek R^2 değerine sahip potansiyel biçimleri elde edildi.

Aşırı soğuk atomik çarpışmaların potansiyel biçimleri belirlendikten sonra ve bu potansiyeller kullanarak zayıf etkileşen atomların saçılma özellikleri hesaplanmıştır. Bu özelliklerden saçılma mesafesi yoğunlaşma dinamiğinin gerçekleşip gerçekleşmediği hakkında bilgi vermesinden dolayı deneyler tarafından önemli bir parametre olarak bilinir. Saçılma mesafesinin işareti yoğunlaşmanın kararlılığını gösterir. Pozitif saçılma mesafesi BEC'nin gelişmesinin sonuçlanması ile kararlı BEC olarak tarif edilir. Negatif saçılma mesafesi kararlı olmayan durumu gösterir. Fakat sınırlı sayıda atomun yoğunlaşma durumunda olduğunu tarif eder. Ayrıca BEC'nin elde edilmesi için gerekli buharlaştırma durumunda çarpışma oranı elastik çarpışma tesir kesitine bağlı ve s-dalga saçılma mesafesinin karesi ile orantılıdır.

Aşırı soğuk potasyum buharında, zayıf etkileşen potasyum atomların triplet seviyede saçılma mesafeleri, Lennard-Jones 12-6 tipi bir potansiyel ve deneysel verilere uydurma yapılarak elde edilen potansiyel biçimleri kullanılarak yarıklasik ve nümerik olmak üzere iki metot kullanılmıştır. Bu metotlar kullanılarak elde edilen sonuçlar deneysel verilerle karşılaştırılmıştır. Her iki metot için beş farklı kesme yarıçapında aşırı soğuk potasyum atomlarının triplet seviyede saçılma mesafeleri hesaplanmıştır. İki metot için sonuçlar arasında mükemmel uyum vardır. Bölüm 4.2.1'de farklı kesme yarıçaplarında hesaplanan sonuçların hata sınırları içinde deneysel sonuçlarla uyumluluğu gözlenmiştir. Uydurma potansiyelinden elde edilen yarı-klasik faz ve Van der Waals parametreleri kullanılarak elde edilen LJ_{12,6} potansiyeli için hesaplanan saçılma mesafesi, uydurma potansiyelinden hesaplanan saçılma mesafesine oldukça yakın bulunmuştur. Uyumlu sonuçların elde edilmesinde basit Lennard Jones 12-6 potansiyelin düzeltilerek kullanılması potansiyelin tanımlanmasında ve hesaplarda kolaylık sağlamaktadır. Elde edilen hesaplara göre pozitif ve negatif saçılma mesafelerin yüzde değişimleri sırasıyla %6,4 ve %96,6'dır. Bu durumdan, bosonik potasyum izotopun kararlı yoğunlaşması, %6,4 pozitif saçılma mesafesi oranına göre tahmin edildi.

Aşırı soğuk rubidyum buharında, zayıf etkileşen bozonik rubidyum-85 izotopunun triplet seviyede saçılma mesafeleri üç farklı kesme yarıçapında hesaplanmıştır. Nümerik ve yarı-klasik sonuçlar arasında, aşırı soğuk potasyum saçılmasında olduğu gibi oldukça iyi bir uyuma vardır. Hesaplanan saçılma mesafeleri literatürden alınan değerler ile karşılaştırılmıştır. Bu değerleri nümerik ve foto-birleşim spektroskopu olarak iki gruba ayırabiliriz. Bu sonuçlar hesaplanan değerlerimiz ile karşılaştırdığımızda artan kesme yarıçapında iyi bir uyuma vermektedir. 20,250a.u. kesme yarıçapı için elde edilen pozitif saçılma mesafesi, literatürden alınan RKR potansiyeli kullanılarak hesaplanan saçılma mesafesi değeri ile iyi uyumaktadır. Kesme yarıçapı 20,2934a.u. için elde edilen negatif saçılma mesafesi diğer literatürden alınan değerlerin çoğu ile mükemmel uyumaktadır. Bu kesme yarıçapının uydurma işleminde en iyi R-kare değerine (0,99993) sahiptir. Hata hesapların küçük değerlerde olması sonuçların kesinliğini doğrulamaktadır.

Aşırı soğuk rubidyum-85 saçılmasında kuantum kusur teori kullanılarak artan enerji ölçeği K^0 değerinde ortalama yarı-klasik saçılma mesafesi değerine tam olarak yakınsamaktadır. Ayrıca Radoslaw Szmytkowski'nin formüllerini kullanılarak rubidyum-85 izotopunun artan iyonizasyon yarıçapında hesaplanan saçılma mesafesi, yarı-klasik saçılma mesafesine yakınsamaktadır.

Aşırı soğuk potasyum-rubidyum buharında, zayıf etkileşen bozonik-bozonik ve bozonik-fermiyonik potasyum-rubidyum izotoplarının singlet ve triplet seviyelerde kütle skalalı potansiyeller kullanılarak saçılma mesafeleri hesaplanmıştır. Hata sınırları içinde yarı-klasik ve nümerik değerler arasında mükemmel uyuma vardır. Ayrıca her iki metot ile hesaplanan değerler hata sınırları içinde deneysel değerler ile mükemmel uyumaktadır. Bosonik-bosonik etkileşme türlerden ^{39}K - ^{87}Rb etkileşmenin singlet saçılma mesafesi hariç pozitif saçılma mesafeleri ile kararlı iken fermiyonik-bosonik ^{40}K - ^{87}Rb ve ^{40}K - ^{85}Rb etkileşme türleri negatif saçılma mesafeleri ile yoğunlaşmaları kararsızdır. Bunun sebebi fermiyonik türlerin pauli dışarılama ilkesine uymak için bütün atomların taban seviyeye çekilmeye zorlamıştır. Ancak bu durum fermiyonik türlerin yoğunlaşması olmayacağı anlamına gelmez. Semptotik soğutma yardımıyla iki MOT sistemlerde fermiyonik türleri

yoğuşması mümkündür. Aynı ortamda kararlı türler diğer kararsız olan türlerin yoğuşmasını sağlamaktadır. Fermiyonik yoğuşmadan kasıt fermiyonik türlerde bütün atomlar mükemmel pauli dışarlama ilkesine göre davranış gösterir. Karışık fermiyonik-bozonik ^{40}K - ^{87}Rb türü pozitif saçılma mesafesi ile semptomatik soğutma yardımıyla yoğuşması kararlı olur. Deneysel olarak fermiyonik türlerin yoğuşması bozonik türlerin yoğuşmasına daha fazla teknoloji gereksinimi gösterir. Bundan dolayı yüksek maliyetlidir. Bu durum teorik çalışmalarımızın önemini artırmaktadır.

Aşırı soğuk potasyum-rubidyum izotopların saçılmasında kuantum kusur teorisi kullanılarak artan enerji ölçeği K^0 değerinde ortalama yarı-klasik saçılma mesafesi değerine diğer aşırı soğuk $\text{K}+\text{K}$ ve $\text{Rb}+\text{Rb}$ türlerin saçılmasında olduğu gibi singlet ve triplet seviyelerde tam olarak yakınsamaktadır. Bu yakınsamaya genel olarak baktığımızda her iki metodun sonuçları farklı etkileşmeler için aynı olur. Burada şu sonucu çıkarabiliriz. İki metot için yapılacak olan herhangi bir hesaplamada aynı sonuçlar elde edilir.

Etki menzili, potansiyele bağlı durum ile bağlı olmayan parçacığın etkileşmeden kopub serbest hale geldiği durum arasında uzunluk ölçümüdür. Burada etki menzilli dalga fonksiyonlar ile direk ilgilidir. Bağlı durumun fonksiyonu geniş atomik mesafede bağlı olmayan fonksiyona yakınsar. Etki menzili bu fonksiyonların tüm uzayda olasılıklarının farkı olarak değişir. Diğer bir değişle parçacığın saçılma sonucu potansiyelin etkisi altında serbest hale gelinceye kadar uzunluk menzili olarak tanımlanır.

Aşırı soğuk potasyum buharında, zayıf etkileşen potasyum atomların triplet seviyede etki menzilleri beş farklı kesme yarıçapı için nümerik ve yarı-klasik yöntemler ile hesap edildi. Elde edilen sonuçlar arasında oldukça iyi uyum vardır. Ayrıca saçılma mesafesinde olduğu gibi basit Lenard-Jones 12-6 potansiyeli kullanılarak elde edilen etki menzili hesabı diğer uydurma potansiyeli kullanılarak yapılan hesaplar ile oldukça iyi uyuşmaktadır. Literatürden alınan Gao tarafında hesaplanan etki mezilli değeri bizim hesaplarımızın üzeri bir değerde olmasına karşın kesme yarıçapı 18,90a.u için yapılan hata sınırları içinde yer almaktadır.

Aşırı soğuk rubidyum buharında, zayıf etkileşen rubidyum atomların triplet seviyede etki menzilleri üç farklı kesme yarıçapı için nümerik ve yarı-klasik yöntemler ile hesap edildi. Elde edilen sonuçlar arasında oldukça iyi uyum vardır. Kesme yarıçapı 20,2934 a.u. değerinde hesap edilen etki menzili Gao tarafından hesap edilen etki menzili değerine hata sınırları içinde oldukça mükemmel uyumludur. Ayrıca yarı-klasiksel metot da basit olarak etki menzili için ortalama etki menzili ifadesi türetilerek ve bu ifaden hesaplanan ortalama etki menzili değeri QDT ile yakınsaklığı incelendi. Bu incelemede yarı-klasik enerji ölçeği sonsuza giderken QDT'nin sonucu tam olarak yarıklasik sonuca yakınsamaktadır.

Aşırı soğuk potasyum-rubidyum buharında, zayıf etkileşen bozonik-bozonik ve bozonik-fermionik potasyum-rubidyum izotoplarının singlet ve triplet seviyelerde kütle ölçekli potansiyeller kullanılarak etki menzilleri hesaplanmıştır. Hata sınırları içinde yarı-klasik ve nümerik değerler arasında mükemmel uyuma vardır. Ayrıca singlet ve triplet seviyelerde her bir karışık izotop etkileşmesi için enerji ölçeği sonsuza giderken QDT'nin sonuçları, yarı-klasik olarak türetilen ortalama etki menzili ifadesi kullanılarak hesaplanan değerlere tam olarak yakınsamaktadır. Aşırı soğuk atomik çarpışmalarda QDT ve yarı-klasik metotlar ile elde edilen hesaplamalar, saçılma mafesinde olduğu gibi etki menzili içinde aynı sonuçları vermektedir. Herhangi iki etkileşme için bu metotlarda yapılacak olan hesaplamalar aynı olur.

Faz kaymasının saçılma teorisinde önemli bir etkisi vardır. Özellikle tesir kesiti tamamıyla yörünge açısal momentuma bağlı faz kaymalarından elde edilir. Düşük sıcaklıkta daha düşük kısmı dalgalar saçılmaya katkısı bulunduğu için daha yüksek yörüngeli kısmı dalgalar için faz kaymaları sıfır olur. Aşırı düşük sıcaklıklarda saçılmaya katkı veren yalnız birkaç faz kayması hesaplanır. Faz kayması temelde radyal denklemin çözülmesinden elde edilir. Fakat biz bunun fiziksel yapısına baktığımızda saçılan parçacık geniş menzillerde klasik olarak dış dönüm noktasında belli bir faz farkı ile serbest bir parçacık halinde seyahat eder. Uzun menzilde, dalga fonksiyonu bu faz kayması ile $\sin(kr + \delta_0)$ şeklinde davranır. Uzun menzilde denklemin çözümü bu fonksiyon ile karşılaştırıldığında aşırı düşük sıcaklıklarda

baskın $L=0$ için faz kayması elde edilir. Farklı kesme yarıçaplarında aşırı soğuk potasyum, rubidyum ve karışık potasyum-rubidyum saçılmalarında faz kaymasının hesaplanması en önemli şu sonuçlar ortaya çıkmaktadır. Aşırı düşük sıcaklıklarda faz kaymaları doğrusal davranış gösterir ve etkileşme potansiyelleri için nümerik hesaplanması bir $V(r)$ potansiyeli için teorik sonuç olan $\delta_0 = -a k$ eşitliği ile uyumluluk gösterir. Ayrıca faz kayması, saçılma mesafesinin işareti ile ters olarak negatif yönde değişmesi yoğunlaşmanın kararlı davranış gösterirken pozitif eğilim göstermesi yoğunlaşmanın kararsız olduğunu gösterir. Ayrıca faz kaymasının negatif (pozitif a) veya pozitif (negatif a) olması potansiyelin sırasıyla çekici ve itici olmasından kaynaklanır.

Aşırı düşük sıcaklıklarda tesir kesiti geniş bir değerde verilir ve saçılma mesafesi ile tanımlanır. Ayrıca tesir kesiti Bethe formülü kullanılarak $\sigma = 4\pi a^2 \left[1 + ak^2(r_e - a) \right]$ eşitliğinde saçılma mesafesi ile birlikte etki menziline bağlanabilir. Fakat aşırı düşük sıcaklıklarda k dalga sayısının sıfıra yaklaşırken köşeli parantez içindeki ikinci parametresi sıfır olur. Geride sadece saçılma mesafesine bağlı terim kalır.

Kesim 4.5'te aşırı soğuk potasyum buharında, zayıf etkileşen atomların triplet seviyede artan birkaç enerji değerinde faz kaymaları, kısmi tesir kesitleri ve toplam tesir kesiti, uydurma potansiyeli ve yarı-klasik fazdan tanımlanan $LJ_{12,6}$ potansiyeli için hesap edildi. Elde edilen sonuçlar arasında oldukça iyi uyum vardır.

Elastik çarpışan $K+K$ ve $Rb+Rb$ atomlarının triplet seviyesi için saçılma açısına bağlı diferansiyel tesir kesitleri (DTK) hesapları şu sonuçları vermektedir. Atomların tamsayı aşırı ince kuantum sayısının boson olmasına göre yalnız çift kısmi dalgalar DTK'ya katkıda bulunur. Şekil 4.12 ve Şekil 4.13'te DTK potasyum etkileşmesi için iki potansiyel ve her iki etkileşmede baskın $L=2, 4$ kısmi dalgalara, sıcaklığa ve kesme yarıçapına bağlı olarak verilir. Düşük sıcaklıklarda potansiyeller için DTK'leri iyi uyuşmaktadır. Ayrıca bu sıcaklıklarda DTK piki yeterince derindir. Çünkü baskın kısmi dalgalar potasyumun saçılmasına aşırı derecede katkıda bulunur. Geniş sıcaklıklarda Şekil 4.12'de DTK'lerin zayıf piklerini gözlemliyoruz.

Aşırı soğuk elastik Rb+K izotopik çarpışmalarda, her etkileşme için farklı iki enerjide $L=2, 4$ kısmi dalgalar için faz kaymaları ve buna karşılık diferansiyel tesir kesitleri hesaplanmasında $L=4$ için yapılan hesaplar $L=2$ için yapılan hesaplardan daha düşük seviyelerde elde edilmiştir. Bu sonuç beklentilerime uygundur çünkü daha düşük sıcaklıklarda az sayıda kısmi dalga saçılmaya katkıda bulunur.

Düşük enerjilerde spin kayma tesir kesitleri $\sigma_{sc.} = \pi(a_T^2 - a_S^2)$ denklemi ile sabit değere gider. Fermiyon-boson ve boson-boson etkileşmeleri için yapılan spin yük tesir kesitleri ortalama $\sim 10^{-17} \text{m}^2$ mertebesinde geniş bir değere sahip ve bu değer nümeriksel olarak hesaplanan spin yük tesir kesinin düşük enerji bölgesinden hesap edilir. Her iki yoldan elde edilen sonuçlar arasında oldukça fazla uyum vardır. Bu değer yoğunlaşma esnasında tuzaktan kaçan atomların tesir kesitini gösterir.

Sıcaklığın geniş menziline singlet, triplet ve spin yük oran sabitleri hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçlara göre yüksek sıcaklıklarda keskin bir artış olurken düşük sıcaklıklarda sabit bir değere gider. Düşük enerjilerde singlet oran sabitinden esinlenerek değiş dokuş oran sabiti $\pi(a^S - a^T)^2 (8k_B T / \pi\mu)^{1/2}$ şeklinde genel bir ifade elde edildi.

Son bölümde saçılma özelliklerinin hesaplanmasında hataların kaynakları ve hata hesabı yapılmıştır. Bu sonuçlara göre saçılma potansiyelin davranışlarına sıkı bir şekilde bağlıdır.

Teorik ve deney olarak bu tarz çalışmaların desteklenmesi ile uzak hedef olsada teknolojik alanda yeni nesil elektronik aygıt üretimine ve bu sayede kısıtlı enerji kaynağı kullanılarak korkunç yüksek kapasitede örneğin hardisklerin üretimine yol açacaktır. Bu çalışmaların en önemli sonucu atom lazerlerin keşfedilmesi olarak görülür. Bu çalışmaların teorik olarak yapılması deneysel olarak kontrol edilmesi zor olan deneysel çalışmalara yön vermektir. Bu sayede uygun olmayan durumların deneysel olarak çalışılması önlenerek çok daha fazla iş gücü ve masraftan kaçınılmasını sağlayacaktır.

KAYNAKLAR

1. James R. Anglin and Wolfgang Ketterle "Bose–Einstein condensation of atomic gases", *Nature*, 416: 211-218 (2002).
2. Masuhara, N. *et al.* "Evaporative cooling of spin-polarized atomic hydrogen", *Phys. Rev. Lett.* 61: 935–938 (1988).
3. Phillips W. D., Prodan J. V., and Metcalf H. J., "Laser cooling and electromagnetic trapping of neutral atoms", *J. Opt. Soc. Am. B*, 2: 1751–1767 (1985).
4. Gribakin G. F., and Flambaum V. V., "Calculation of the scattering length in atomic collisions using the semiclassical approximation", *Phys. Rev. A*, 48: 546–553 (1993).
5. Szmytkowski R., "Analytical calculations of scattering lengths in atomic physics", *J. Phys. A: Math. Gen*, 28: 7333-7345 (1995).
6. Gao B., "Solutions of the Schrödinger equation for an attractive $1/r^6$ potential", *Phys. Rev. A*, 58: 1728-1734 (1998).
7. Schmid E. W., Spitz G., Lösch W., "Theoretical Physics on the personal Computer", Second Edition, *Springer-Verlag*, Berlin, 189-206, (1990).
8. P Weiner J., Bagnato V. S., Zilio S. and Julienne P. S., "Experiments and theory in cold and ultracold collisions", *Rev. Mod. Phys.*, 71, 1 - 85 (1999).
9. Dalibard J., and Cohen-Tannoudji C., "Dressed-atom approach to atomic motion in laser light: the dipole force revisited", *J. Opt. Soc. Am. B*, 2: 1707–1720 (1985).
10. Adams C. S., Carnal O., and Mlynek J., "Atom interferometry", *Adv. At. Mol. Opt. Phys.*, 34: 1–33 (1994).
11. Adams C. S., Sigel M., and Mlynek J., "Atom optics", *Phys. Rep.*, 240: 143–210 (1994).
12. Morinaga M., Yasuda M., Kishimoto T., and Shimizu F., "Holographic manipulation of a cold atomic beam", *Phys. Rev. Lett.*, 77: 802–805 (1996).
13. Jessen P. S., and Deutsch I. H., "Optical Lattices", *Adv. At., Mol., Opt. Phys.*, 37: 95–138 (1996).
14. Suominen K.-A., "Theories for cold atomic collisions in light fields", *J. Phys. B*, 29: 5981–6007 (1996).

15. Suominen K.-A., Burnett K., Julienne P. S., Walhout M., Sterr U., Orzel C., Hoogerland M., and Rolston S. L., "Ultracold collisions and optical shielding in metastable xenon", *Phys. Rev. A*, 53: 1658–1689 (1996).
16. Vigué J., "Possibility of applying laser-cooling techniques to the observation of collective quantum effects", *Phys. Rev. A*, 34: 4476–4479 (1986).
17. Herzberg G., "Molecular Spectra and Molecular Structure. I. Spectra of Diatomic Molecules", Second Ed. *van Nostrand*, Princeton, 71-197 (1950).
18. Stoof H. T. C., Koelman J. M. V. A., and Verhaar B. J., "Spin-exchange and dipole relaxation rates in atomic hydrogen: rigorous and simplified calculations", *Phys. Rev. B*, 38: 4688–4697 (1988).
19. Gao B., "Theory of slow-atom collisions", *Phys. Rev. A*, 54: 2022–2039 (1997).
20. Bethe H., "Theory of disintegration of nuclei by neutrons", *Phys. Rev.* 47: 747–759 (1935).
21. Julienne P. S., and Mies F. H., "Collisions of ultracold trapped atoms", *J. Opt. Soc. Am. B*, 6: 2257–2269 (1989).
22. Julienne, P. S., Smith A. M., and Burnett K., "Theory of collisions between laser cooled atoms", *Advances in Atomic, Molecular, and Optical Physics* 30: 141–198 (1993).
23. Mott, N. F. and Massey H. S. W., "The Theory of Atomic Collisions", Third Edition, *Oxford Univ. Press*, London, 48-51 (1965).
24. Wigner E. P., "On the behavior of cross sections near thresholds", *Phys. Rev.*, 73: 1002–1009 (1948).
25. Côté R., Heller E. J., and Dalgarno A., "Quantum suppression of cold atom collisions", *Phys. Rev. A*, 53: 234–241 (1996).
26. Arndt M., Dahan M. Ben, Guery-Odelin D., Reynolds M. W., and Dalibard J., 1997, "Observation of a zero-energy resonance in Cs-Cs collisions", *Phys. Rev. Lett.* 79: 625–628 (1997).
27. Leo P., Tiesinga E., Julienne P. S., Walter D. K., Kadlecsek S., and Walter T. G., "Elastic and inelastic collisions of cold spin-polarized ^{133}Cs atoms", *Phys. Rev. Lett.*, 81: 1389–1392 (1998).
28. Anderson M. H., Ensher J. R., Matthews M. R., Wieman C. E., and Cornell E. A., "Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor", *Science*, 269: 198–201 (1995).

29. Davis K. B., Mewes M.-O., Andrews M. R., van Druten N. J., Durfee D. S., Kurn D. M., and Ketterle W., "Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms", *Phys. Rev. Lett.*, 75: 3969–3973 (1995).
30. Bradley C. C., Sackett C. A., and Hulet R. G., "Bose-Einstein condensation of lithium: Observation of limited condensate number", *Phys. Rev. Lett.*, 78: 985–988 (1997).
31. Stwalley W. C., and Nosanow L., "Possible new quantum systems", *Phys. Rev. Lett.*, 36: 910–913 (1976).
32. Crampton S. B., Phillips W. D., and Kleppner D., "Proposed low temperature hydrogen maser", *Bull. Am. Phys. Soc.*, 23: 86-88 (1978).
33. Kleppner D., Berg H. C., Crampton S. B., Ramsey N. F., Vessot R. C., Peters H. E., and Vanier J., "Hydrogen-maser principles and techniques", *Phys. Rev.* 138: A972–A983 (1965).
34. Cline R. W., Greytak T. J., Kleppner D., "Nuclear polarization of spin-polarized atomic hydrogen", *Phys. Rev. Lett.*, 47: 1195–1198 (1981).
35. Dalgarno A., "Spin-change cross sections", *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, 262: 132–135 (1961).
36. Berlinsky A. J., and Shizgal B., "Spin-exchange scattering cross sections for hydrogen atoms at low temperatures", *Can. J. Phys.*, 58: 881–885 (1980).
37. Verhaar B. J., JKoelman. M. V. A., Stoof H. T. C., Luiten O. J., and Crampton S. B., "Hyperfine contribution to spin-exchange frequency shifts in the hydrogen maser", *Phys. Rev. A*, 35: 3825–3831 (1987).
38. Ahn R. M. C., van den Eijnde J. P. H. W, and Verhaar B. J., "Calculation of nuclear spin relaxation rate for spin-polarized atomic hydrogen" *Phys. Rev. B*, 27: 5424–5432 (1983).
39. Uang Y.-H., and Stwalley W. C., "Close-coupling calculations of spin-polarized hydrogen-deuterium collisions", *Phys. Rev. Lett.*, 45: 627–630 (1980).
40. Tiesinga E., Stoof H. T. C., and Verhaar B. J., "Spin-exchange frequency shift of the cryogenic deuterium maser", *Physica B*, 165: 19–20 (1990).
41. Jamieson M. J., Dalgarno A., Doyle J. M., "Scattering lengths for collisions of ground state and metastable state hydrogen atoms", *Mol. Phys.*, 87: 817–826 (1996).
42. Tiesinga, E., Kuppens S. J. M., Verhaar B. J., and Stoof H. T. C., "Collisions between cold ground state Na atoms", *Phys. Rev. A*, 43: R5188–R5191 (1991).

43. Gibble K., and Chu S., "Future slow-atom frequency standards," *Metrologia*, 29: 201–212 (1992).
44. Verhaar B. J., Gibble K., and Chu S., "Cold-collision properties derived from frequency shifts in a Cs fountain", *Phys. Rev. A*, 48: R3429–R3432 (1993).
45. Kokkelmans S. J. J. M. F., Verhaar B. J., Gibble K., and Heinzen D. J., "Predictions for laser-cooled Rb clocks", *Phys. Rev. A* 56: R4389–R4392 (1997).
46. Gibble K., Chang S., and Legere R., "Direct observation of s-wave atomic collisions", *Phys. Rev. Lett.* 75: 2666–2669 (1995).
47. Lee, T. D., and Yang C. N., "Low-temperature behavior of dilute Bose system of hard spheres. I. Equilibrium properties", *Phys. Rev.*, 112: 1419–1429 (1958).
48. Hess H. F., G. P. Kochanski, Doyle J. M., Mashuhara N., Kleppner D., and Greytak T. J., "Magnetic trapping of spin-polarized atomic hydrogen", *Phys. Rev. Lett.*, 59: 672–675 (1987).
49. Fried D. G., Killian T. C., Willmann L., Landhuis D., Moss A. C., T. J. Greytak, and D. Kleppner, "Bose-Einstein Condensation of Atomic Hydrogen", *Phys. Rev. Lett.*, 81: 3811–3814 (1998).
50. Burnett K., "Bose-Einstein Condensation with evaporatively cooled atoms," *Contemp. Phys.*, 37: 1–14 (1996).
51. Hess H. F., Kochanski G. P., Doyle J. M., Greytak T. J., and Kleppner D., "Spin-polarized hydrogen maser", *Phys. Rev. A*, 34: 1602–1604 (1986).
52. Ketterle W., and Van Druten N. J., "Evaporative cooling of trapped atoms", *Adv. At., Mol., Opt. Phys.* 37: 181–236 (1996).
53. Tiesinga E., Moerdijk A. J., Verhaar B. J., and Stoof H. T. C., "Conditions for Bose-Einstein condensation in magnetically trapped atomic cesium", *Phys. Rev. A*, 46: R1167–R1170 (1992).
54. Monroe C. R., Cornell E. A., Sackett C. A., Myatt C. J., and Wieman C. E., "Measurement of Cs-Cs elastic scattering at $T=30\ \mu\text{K}$ ", *Phys. Rev. Lett.*, 70: 414–417 (1993).
55. Newbury N. R., Myatt C. J., and Wieman C. E., "s-wave elastic collisions between cold ground state ^{87}Rb atoms", *Phys. Rev. A*, 51: R-2680–R2683 (1995).
56. Davis K. B., Mewes M., Joffe M. A., Andrews M. R., and Ketterle W., "Evaporative cooling of sodium atoms", *Phys. Rev. Lett.*, 74: 5202–5205 (1995).

57. Huang K., and Yang C. N., "Quantum mechanical many-body problem with hard-sphere interactions," *Phys. Rev.*, 105: 767–775 (1957).
58. Stoof H. T. C., Bijlsma M., and Houbiers M., "Theory of interacting quantum gases", *J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol.*, 101: 443–457 (1996).
59. Edwards M., and Burnett K., "Numerical solution of the nonlinear Schroedinger equation for small samples of trapped neutral atoms", *Phys. Rev. A*, 51: 1382–1386 (1995).
60. Dodd R. J., Mark Edwards, Williams C. J., Clark C. W., Holland M. J., Ruprecht P. A, Burnett K., "Role of attractive interactions on Bose-Einstein condensation", *Phys. Rev. A*: 54: 661–664 (1996).
61. Holland M. J., Jin D. S., Chiofalo M. L., and Cooper J., "Emergence of interaction effects in Bose-Einstein condensation", *Phys. Rev. Lett.*, 78: 3801–3805 (1997).
62. Mewes M.-O., Andrews M R., van Druten N. J., Kurn D. M., Durfee D. S., and Ketterle W., "Bose-Einstein condensation in a tightly confining dc magnetic trap", *Phys. Rev. Lett.*, 77: 416–419 (1996).
63. Moerdijk A. J., Stwalley W. C., Hulet R. G., and Verhaar B. J., "Negative scattering length of ultracold ^7Li Gas", *Phys. Rev. Lett.*, 72: 40–43 (1994).
64. Boesten H. M. J. M., Vogels J. M., Tempelaars J. G. C., and Verhaar B. J., "Properties of cold collisions of ^{39}K atoms and of ^{41}K atoms in relation to Bose-Einstein condensation", *Phys. Rev. A*, 54: R3726–R3729 (1996).
65. Soding J., Guery-Odelin D., Desbiolles P., Ferrari G., Ben Dahan M, and Dalibard J., "Giant spin relaxation of an ultracold cesium gas", *Phys. Rev. Lett.*, 80: 1869–1872 (1998).
66. Petrich C. J., Smith H., "Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases", *Cambridge University Press*, 40-41,103-107, (2002).
67. Burke J.P., "Theoretical Investigation of Cold Alkali Atom Collisions", Doktora tezi, *University of Colorado*, 18-19, (1999).
68. Smirnov B. M. and Chibisov M. I., "Electron Echange and Changes in The Hyperfine States of Colliding Alkaline Metal Atoms" *Soviet Physics JETP*, 21: 624-628 (1965).
69. Cheng Chin, Vladan Vuletic, Ansdrew J. Kerman, and Steven Chu," High Resolution Feshbach Spectroscopy of Cesium" *Phys. Rev. Lett.*, 85: 2717–2720 (2000)

70. Paul J. Leo, Carl J. Williams, and Paul S. Julienne,” Collision Properties of Ultracold ^{133}Cs Atoms”, ***Phys. Rev. Lett.***, 85: 2721–2724 (2000).
71. Derevianko A., Johnson W. R., Safronova M. S., and Babb J. F., “High-Precision Calculations of Dispersion Coefficients, Static Dipole Polarizabilities, and Atom-Wall Interaction Constants for Alkali-Metal Atoms”, ***Phys. Rev. Lett.***, 82: 3589–3592 (1999).
72. Côté R. and Dalgarno A., and Jamieson M. J., “Elastic scattering of two ^7Li atoms”, ***Phys. Rev. A***, 50: 399-404 (1994).
73. Flambaum V.V., Gribakin G.F., and Harabati C., “Analytical calculation of cold-atom scattering” ***Phys. Rev. A***, 59: 1998-2005 (1998).
74. Joachain Charles J., Quantum Collision Theory, ***North-Holland publishing company***, Amsterdam, 19-52 (1975).
75. Côté R. and Dalgarno A., “Elastic scattering of two Na atoms”, ***Phys. Rew. A***, 50: 4827-4835 (1994).
76. Marinescu M, “Computation of the scattering length and effective range in molecular physics”, ***Phys. Rev. A***, 50: 3177–3180 (1994).
77. Fano U and Rau A R P, “Atomic Collisions and Spectra”, **Orlando, FL: Academic**, ch 2-4 (1986).
78. Fabrikant I.I., “Scattering By Long-Range Potentials For Low Energies”, ***Latv. PSR Zinat. Akad. Vestis Fiz. Teh. Zinat. Ser.***, 6: 11-15 (1973).
79. Magnus W, Oberhettinger F and Soni R P, “Formulae and Theorems of the Special Functions of Mathematical Physics”, 3rd edn, ***Springer***, Berlin (1966).
80. Radzig A A and Smirnov B M “Reference Data on Atoms, Molecules, and Ions” ***Springer***, Berlin, ch 9 (1985).
81. Williams C. J. and Julienne P. S., “Mass effects in the theoretical determination of nuclear-spin relaxation rates for atomic hydrogen and deuterium” ***Phys. Rev. A***, 47: 1524-1527 (1993).
82. Boesten H. M. J. M., Tsai C. C., Verhaar B. J., and Heinzen D. J., “Observation of a Shape Resonance in Cold-Atom Scattering by Pulsed Photoassociation” ***Phys. Rev. Lett.***, 77: 5194-5197 (1996).
83. Seaton M. J., “Quantum defect theory”, ***Rep. Prog. Phys.***, 46: 167-257 (1983) ; Rau A.R.P., “Relationships between the parameters of quantum-defect theory”, ***Phys. Rev. A*** 38: 2255-2258 (1988).

84. Greene C. H., Rau A. R. P., and Fano U., "General form of the quantum-defect theory. II" **Phys. Rev. A**, 26: 2441-2459 (1982).
85. Levy B. R. and Keller J. B., "Low-Energy Expansion of Scattering Phase Shifts for Long-Range Potentials", **J. Math. Phys.**, 4: 54-64 (1963).
86. Marinescu M., Sadeghpour H. R., and Dalgarno A., "Dispersion coefficients for alkali-metal dimers", **Phys. Rev. A**, 49: 982-988 (1994).
87. Mott N. F. Massey, H. S. W., "The theory of Atomic Collision", Third Edition, **Oxford University Press**, Ely House, London, 21-22 (1965).
88. Zhao Guoxing, Zemke Warren T., Kim J. T. et al., "New measurements of the $a^3\Sigma_u^+$ state of K_2 and improved analysis of long-range dispersion and exchange interactions between two K atoms", **J. Chem. Phys.**, 105: 7976-7985 (1990).
89. Internet: NIST, "Periodic Table: Atomic Properties of the Elements", <http://physics.nist.gov/PhysRefData/contents.html>(2003).
90. Friend D. G. and Etters R. D., "A dilute hard-sphere Bose gas model calculation of low-density atomic hydrogen gas properties", **J. Low Temp. Phys.**, 39: 409-415 (1980).
91. Li L., Lyyra A. M., Luh W. T. and Stwalley W. C., "Observation of the $^{39}K_2$ $a^3\Sigma^+$ State by Perturbation Facilitated Optical-Optical Double Resonance (PFOODR) Resolved Fluorescence Spectroscopy", **J. Chem. Phys.**, 93: 8452-8463 (1990).
92. Maeder F. and Kutzelnigg W., "Natural states of interacting systems and their use for the calculation of intermolecular forces : IV. Calculation of van der Waals coefficients between one- and two-valence-electron atoms in their ground states, as well as of polarizabilities, oscillator strength sums and related quantities, including correlation effects ", **Chem. Phys.**, 42: 95-112 (1979).
93. Krauss M. and Stevens W. J., "Effective core potentials and accurate energy curves for Cs_2 and other alkali diatomics", **J. Chem. Phys.**, 93: 4236-4242 (1990).
94. Rousseau S., Allouche A. R., and Aubert-Fre'con M., "Theoretical Study of the Electronic Structure of the KRb Molecule", **J. Molec. Spectroscopy**, 203: 235-243 (2000).
95. Williams C. J., Tiesinga E. et al., "Determination of the scattering lengths of ^{39}K from 1_u photoassociation line shapes", **Phys. Rev. A**, 60: 4427-4438 (1999).
96. Bohn John L., Burke James P. et al., " Collisional properties of ultracold potassium: Consequences for degenerate Bose and Fermi gases" **Phys. Rev. A**, 59: 3660-3664 (1999).

97. Hang. W, Nikolov A. N. et al., “Ground-state scattering lengths for potassium isotopes determined by double-resonance photoassociative spectroscopy of ultracold ^{39}K ”, **Phys. Rev. A**, 62: 052704(4) (2000).
98. Côté R., Dalgarno A., Wang H. and Stwalley W.C., “Potassium scattering lengths and prospects for Bose-Einstein condensation and sympathetic cooling”, **Phys. Rev. A**, 57: R4118-R4121 (1998).
99. Marco B. D et al., “Measurement of p -Wave Threshold Law Using Evaporatively Cooled Fermionic Atoms”, **Phys. Rev. Lett.**, 82: 4208-4211 (1999).
100. Anglin James R. & Ketterle Wolfgang, “Bose-Einstein condensation of atomic gases”, **Nature**, 416: 211-218 (2002).
101. Roberts J. L. et al., “Resonant Magnetic Field Control of Elastic Scattering in Cold ^{85}Rb ”, **Phys. Rev. Lett.**, 81: 5109-5112 (1998).
102. Westpal P., S Koch. et al., “Low-velocity elastic scattering of Rb-Rb”, **Phys. Rev. A**, 56: 2784-2787 (1997).
103. Purke James P., Jr., et al., “Prospects for Mixed-Isotope Bose-Einstein Condensates in Rubidium”, **Phys. Rev. Lett.**, 80: 2097-2100 (1998).
104. Purke James P., Jr., et al., “Ultracold scattering properties of the short-lived Rb isotopes”, **Phys. Rev. A**, 59: 1303-1308 (1999).
105. Kempen E. G. M. van et al., “Interisotope Determination of Ultracold Rubidium Interactions from Three High-Precision Experiments”, **Phys. Rev. Lett.**, 88: 93201-93204 (2002).
106. Tsai C. C. et al., “Two-Color Photoassociation Spectroscopy of Ground State Rb_2 ”, **Phys. Rev. Lett.**, 79: 1245-1248 (1997).
107. Roberts J. L. et al., “Improved characterization of elastic scattering near a Feshbach resonance in ^{85}Rb ”, **Phys. Rev. A**, 64: 024702-024704 (2001).
108. Gardner J. R., Cline R. A. et al., “Collisions of Doubly Spin-Polarized, Ultracold ^{85}Rb Atoms”, **Phys. Rev. Lett.**, 74: 3764-3767 (1995).
109. Courteille Ph. et al., “Observation of a Feshbach Resonance in Cold Atom Scattering”, **Phys. Rev. Lett.**, 81: 69-72 (1998).
110. Mosk A. et al., “Mixture of ultracold lithium and cesium atoms in an optical dipole trap”, **Appl. Phys. B**, 73: 791-799 (2001).

111. Marcassa L. G. et al., “Collisional losses in a K-Rb cold mixture”, **Phys. Rev. A**, 63: 013413-013419 (2000) .
112. Goldwin J. et al., “Two-species magneto-optical trap with ^{40}K and ^{87}Rb ”, **Phys. Rev. A**, 65: 021402(R)-021405(R) (2002).
113. Ferrari G., Inguscio M. I, et al., “Collisional Properties of Ultracold K-Rb Mixtures”, **Phys. Rev. Lett.**, 89: 053202-053205 (2002).
114. Simoni A. et al., “Magnetic Control of the Interaction in Ultracold K-Rb Mixtures”, **Phys. Rev. Lett.**, 90: 163202-163205 (2003).
115. Inouye S., Goldwin J., Olsen M. L., Ticknor C., Bohn J. L., and Jin D. S., “Observation of Heteronuclear Feshbach Resonances in a Mixture of Bosons and Fermions”, **Phys. Rev. Lett.**, 93: 183201-183204 (2004).
116. Goldwin J., Inouye S., Olsen M. L., Newman B., DePaola B. D., and Jin D. S., “Measurement of the interaction strength in a Bose-Fermi mixture with ^{87}Rb and ^{40}K ”, **Phys. Rev. A**, 70: 021601(R)-021604(R) (2004).
117. Öztürk M. K., Özçelik Süleyman, “Scattering of Ultracold Potassium Atoms in the triplet State”, **Chinese J. Phys.**, 43: 337-347 (2005).
118. Blume D. and Greene Chris H., “Fermi pseudopotential approximation: Two particles under external confinement”, **Phys. Rev. A**, 65: 43613-43618 (2002).
119. Geist W., You L. and Kennedy T. A. B, “Sympathetic cooling of an atomic Bose-Fermi gas mixture”, **Phys. Rev. A**, 59: 1500-1508 (1999).
120. Derevianko A. et al., “Enhanced cooling of hydrogen by a buffer gas of alkali-metal atoms”, **Phys. Rev. A**, 64: 11404-11407 (2001).
121. S. B. Weiss, M. Bhattacharya, and N. P. Bigelow, “Calculation of the interspecies s-wave scattering length in an ultracold Na-Rb vapor”, **Phys. Rev. A**, 68: 42708-42713 (2003).
122. Öztürk M. K., Özçelik Süleyman, “Calculation of the elastic scattering properties of ultra-cold Rubidium vapor”, **Chin. Phys. Lett.**, 21: 2395-2398 (2004).
123. Öztürk M. K., Özçelik Süleyman, “Calculation of Elastic Scattering Properties in Ultracold Fermi–Bose and Bose–Bose Rb–K Vapor”, **J. Phys. Soc. Jpn.**, 75: 337-347 (2006).

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı, adı : ÖZTÜRK, M. Kemal
 Uyuğu : T.C.
 Doğum tarihi ve yeri : 31.03.1976 Çankırı
 Medeni hali : Bekar
 Telefon : 0 (312) 338 08 40
 Faks : -
 e-mail : ozturkm@gazi.edu.tr.

Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet tarihi
Yüksek lisans	Gazi Üniversitesi /Fizik Bölümü	2001
Lisans	Gazi Üniversitesi/ Fizik Bölümü	1998
Lise	Gazi Lisesi	1993

İş Deneyimi

Yıl	Yer	Görev
1999-2006	Gazi Üniversitesi	Araştırma Görevlisi

Yabancı Dil

İngilizce

Yayınlar

- Öztürk M. K., Özçelik Süleyman, “Calculation of the elastic scattering properties of ultra-cold Rubidium vapor”, *Chin. Phys. Lett.*, 21: 2395-2398(2004).
- Öztürk M. K., Özçelik Süleyman, “Scattering of Ultracold Potassium Atoms in the triplet State”, *Chinese J. Phys.*, 43: 337-347(2005).
- Öztürk M. K., Özçelik Süleyman, “Calculation of Elastic **Scattering** Properties in Ultracold Fermi–Bose and Bose–Bose Rb–K Vapor”, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 75: 337-347(2006).

Hobiler

Masa tenisi, Bilgisayar teknolojileri