

İSTANBUL TEKNİK ÜNİVERSİTESİ ★ ENERJİ ENSTİTÜSÜ

**GAZLARIN TERMODİNAMİK DAVRANIŞLARINDA
KUANTUM ÖLÇEK ETKİLERİ**

**DOKTORA TEZİ
Y. Lis. Coşkun FIRAT**

Anabilim Dalı : ENERJİ BİLİM ve TEKNOLOJİ

Programı : ENERJİ BİLİM ve TEKNOLOJİ

ARALIK 2007

**GAZLARIN TERMODİNAMİK DAVRANIŞLARINDA
KUANTUM ÖLÇEK ETKİLERİ**

**DOKTORA TEZİ
Y. Lis. Coşkun FIRAT
(301922001)**

**Tezin Enstitüye Verildiği Tarih : 7 Eylül 2007
Tezin Savunulduğu Tarih : 14 Aralık 2007**

**Tez Danışmanı : Doç.Dr. Altuğ ŞİŞMAN
Diğer Jüri Üyeleri Prof.Dr. Ahmet Togo GİZ
Prof.Dr. Akif ATALAY
Doç.Dr. Tuğrul HAKİOĞLU (Bilkent Ü.)
Doç.Dr. Cenap Ş. ÖZBEN**

ARALIK 2007

ÖNSÖZ

Gazların global termodinamik özellikleri ve yerel yoğunluk dağılımı üzerinde özellikle nano ölçekte belirgin hale gelen kuantum ölçek etkilerinin modellenmesi ve incelemesi bu tez çalışmasının temel amacını oluşturmaktadır. Parçacık-duvar etkileşmelerinin de yerel yoğunluk üzerindeki etkilerinin incelendiği bu çalışmada ayrıca gazların yerel yoğunluk dağılımı üzerinde kuantum ölçek etkilerinin deneysel doğrulaması için de bir öneri getirilmiştir.

Uluslararası işbirliğine dayalı TÜBİTAK 105T086 no.lu temel araştırma projesi kapsamında gerçekleşmiş olan bu tez çalışmasında sağladığı olanaklar için TÜBİTAK'a, teorik öngörülere ilgi göstererek deneysel doğrulama çalışmalarını başlatan Physikalisch Technische Bundesanstalt-Berlin'den Sayın Prof. Dr. Peter Strehlow'a, deneysel doğrulama amacıyla nano yapıları üreten Physikalisch Technische Bundesanstalt-Berlin'e, tez çalışmam esnasında uluslararası konferansa katılım desteği veren İstanbul Teknik Üniversitesine ve tez çalışmam boyunca yaptığı yönlendirmeler ve yapıcı eleştirilerinden dolayı tez izleme komitesi üyesi Sayın Doç. Dr. Tuğrul Hakioğlu'na teşekkür ederim.

Ayrıca, bu tez çalışmasının ortaya çıkmasında sağladığı olanaklar ve verdiği destekler için değerli danışmanım Sayın Doç. Dr. Altuğ Şişman'a ve bugüne kadar bana harcadıkları emek ve gösterdikleri sabır için sonsuz şükran duygularıyla aileme teşekkür etmeyi bir borç bilirim.

Aralık 2007

Coşkun Fırat

İÇİNDEKİLER

KISALTMALAR	v
TABLO LİSTESİ	vi
ŞEKİL LİSTESİ	vii
SEMBOL LİSTESİ	x
ÖZET	xiii
SUMMARY	xv
1. GİRİŞ	1
1.1. Çalışmanın Konusu	1
1.2. Literatürde Tez Konusu ile İlgili Yapılmış Çalışmalar	4
1.3. Tezin Amacı	5
1.4. Bölümlere Göre Tezin İçeriği	6
2. KONUYA İLİŞKİN TEMEL KAVRAMLAR	7
2.1. İdeal Gazların Global Termodinamik Özelliklerinin Türetimi, Kuantum Ölçek Etkilerinin Kökeni ve Bazı Sonuçları	7
2.2. Parçacıklararası Etkileşme Potansiyelleri	18
2.3. Parçacık-Duvar Etkileşmelerinin Doğası	23
3. GAZLARIN TERMODİNAMİK ÖZELLİKLERİNDE KUANTUM ÖLÇEK ETKİLERİ	25
3.1. Global Termodinamik Özellikler	25
3.1.1. Klasik (Maxwell) Gazlar	29
3.1.2. İdeal Fermi Gazı	32
3.1.3. İdeal Bose Gazı	34
3.2. Yerel Termodinamik Özellikler	39
3.2.1. Maxwellian Gazlarda Yerel Yoğunluk Dağılımı	39
3.2.1.1. Dikdörtgen Domende Tutuklanmış Bir Maxwell Gazın Yerel Yoğunluk Dağılımı	40
3.2.1.2. Küresel Domende Tutuklanmış Bir Maxwell Gazında Yerel Yoğunluk Dağılımı	46
3.2.1.3. Silindirik Domende Tutuklanmış Bir Maxwell Gazında Yerel	

Yoğunluk Dağılımı	51
3.2.1.4. Farklı Geometriye Sahip Domenlerde Tutuklanmış Maxwell Gazında Yerel Yoğunluk Dağılımı	57
3.2.2. Fermi Gazında Yerel Yoğunluk Dağılımı	62
3.2.2.1. Dikdörtgen Domende Tutuklanmış Fermi Gazında Yerel Yoğunluk Dağılımı	62
3.2.2.2. Farklı Geometriye Sahip Domenlerde Tutuklanmış Fermi Gazında Yerel Yoğunluk Dağılımı	67
3.2.3. Bose Gazında Yerel Yoğunluk Dağılımı	71
3.2.3.1. Dikdörtgen Domende Tutuklanmış Bose Gazında Yerel Yoğunluk Dağılımı	71
3.2.3.2. Farklı Geometriye Sahip Domenlerde Tutuklanmış Bose Gazında Yerel Yoğunluk Dağılımı	73
4. KLASİK VE KUANTUM GAZLARINDA PARÇACIK-DUVAR ETKİLEŞMESİNE BAĞLI ÖLÇEK ETKİLERİ	79
5. KUANTUM SINIR TABAKASININ DENEYSEL DOĞRULAMASI İÇİN BİR ÖNERİ	92
6. SONUÇLAR VE TARTIŞMA	99
KAYNAKLAR	101
EKLER	106
ÖZGEÇMİŞ	114

KISALTMALAR

LJ : Lennard-Jones
MB : Maxwell-Boltzmann
FD : Fermi-Dirac
BE : Bose-Einstein

TABLO LİSTESİ

	<u>Sayfa No</u>
Tablo 2.1 ${}^4\text{He}$ ve ${}^3\text{He}$ atomu için farklı sıcaklıklarda L_c değerleri	12
Tablo 2.2 Dikdörtgen bir domende tutuklanmış ideal Maxwell gazının bazı termodinamik özellikleri	15

ŞEKİL LİSTESİ

		<u>Sayfa No</u>
Şekil 2.1	Ölçek etkileri altında toplanabilirlik özelliğinin sorgulanması .	17
Şekil 2.2	Lennard-Jones (12-6) potansiyeli	19
Şekil 2.3	Lennard-Jones (12-6) potansiyel fonksiyonunun çekici ve itici bileşenleri	23
Şekil 3.1	Hareketli bir duvar ile ikiye ayrılmış dikdörtgen bir domende yanal kuvvetler	32
Şekil 3.2	\tilde{x} -doğrultusunda boyutsuz yoğunluk dağılımı	42
Şekil 3.3	Kare şekilli bir domende tutuklanmış ideal Maxwell gazının $\alpha=0.2$ için boyutsuz yoğunluk dağılımı	45
Şekil 3.4	Şekil 3.3’de verilen yoğunluk dağılımının ve sınır tabakanın üstten görünümü	46
Şekil 3.5	$\alpha_R=0.2$ için radyal yönde boyutsuz yoğunluk dağılımı	49
Şekil 3.6	Silindirik domende tutuklanmış ideal Maxwell gazının radyal yönde boyutsuz yoğunluk dağılımı	55
Şekil 3.7	Silindirik domende tutuklanmış ideal Maxwell gazının eksenel yönde boyutsuz yoğunluk dağılımı	55
Şekil 3.8	Üçgen şekilli bir domende tutuklanmış ideal Maxwell gazının $\alpha=0.2$ için boyutsuz yoğunluk dağılımı	57
Şekil 3.9a	L-şekilli domende yoğunluk dağılımı, $4\tilde{\delta} < \tilde{H}$	58
Şekil 3.9b	L-şekilli domende yoğunluk dağılımı, $4\tilde{\delta} \cong \tilde{H}$	58
Şekil 3.9c	L-şekilli domende yoğunluk dağılımı, $4\tilde{\delta} > \tilde{H}$	58
Şekil 3.9d	L-şekilli domende yoğunluk dağılımı, $4\tilde{\delta} \gg \tilde{H}$	59
Şekil 3.10a	Birbirine bağlı iki kare domende yoğunluk dağılımı, $4\tilde{\delta} > \tilde{d}$	59
Şekil 3.10b	Birbirine bağlı iki kare domende yoğunluk dağılımı, $4\tilde{\delta} < \tilde{d}$	59
Şekil 3.10c	Birbirine bağlı iki kare domende yoğunluk dağılımı, $4\tilde{\delta} \ll \tilde{d}$..	60
Şekil 3.11	Keyfi şekilli bir domende yoğunluk dağılımı	60
Şekil 3.12	Kuantum yüzey gerilimi nedeniyle hareketli duvar üzerinde oluşan yanal kuvvetler	61
Şekil 3.13	Hareketli bir duvar ile ikiye ayrılmış dikdörtgen kutuda ideal Maxwell gazının yerel yoğunluk dağılımı, $\alpha=0.2$	61
Şekil 3.14	Dejenere Fermi gazında yerel yoğunluk dağılımı, $\alpha^F=0.2$, $\Lambda=20$	65
Şekil 3.15	Dejenere Fermi gazında yerel yoğunluk dağılımı için basitleştirilmiş dağılım	66
Şekil 3.16	Kare domende dejenere Fermi gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı	68
Şekil 3.17	Üçgen domende dejenere Fermi gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı	68
Şekil 3.18a	L-şekilli domende dejenere Fermi gazının boyutsuz yerel	

	yoğunluk dağılımı, $5(\tilde{\delta}_1 + \tilde{\delta}_2) \cong \tilde{H}$	69
Şekil 3.18b	L-şekilli domende dejenere Fermi gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $(\tilde{\delta}_1 + \tilde{\delta}_2) \cong \tilde{H}$	69
Şekil 3.18c	L-şekilli domende dejenere Fermi gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $(\tilde{\delta}_1 + \tilde{\delta}_2) \cong 2\tilde{H}$	69
Şekil 3.19a	Birbirine bağlı iki kare domende dejenere Fermi gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $2(\tilde{\delta}_1 + \tilde{\delta}_2) \cong \tilde{d}$	70
Şekil 3.19b	Birbirine bağlı iki kare domende dejenere Fermi gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $(\tilde{\delta}_1 + \tilde{\delta}_2) \cong \tilde{d}$	70
Şekil 3.19c	Birbirine bağlı iki kare domende dejenere Fermi gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $(\tilde{\delta}_1 + \tilde{\delta}_2) \cong 2\tilde{d}$	70
Şekil 3.20	Keyfi şekilli bir domende dejenere Fermi gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı	71
Şekil 3.21	Dejenere Bose gazında yerel yoğunluk dağılımı, $\alpha=0.01$, $\Lambda=-10^{-6}$	72
Şekil 3.22	Kare domende dejenere Bose gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı	74
Şekil 3.23	Şekil 3.22'nin ve kuantum sınır tabakalarının üstten görünüşü...	74
Şekil 3.24	Üçgen domende dejenere Bose gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı	75
Şekil 3.25a	L-şekilli domende dejenere Bose gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $4\tilde{\delta} \cong \tilde{H}$	75
Şekil 3.25b	L-şekilli domende dejenere Bose gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $3\tilde{\delta} \cong \tilde{H}$	76
Şekil 3.25c	L-şekilli domende dejenere Bose gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $2\tilde{\delta} \cong \tilde{H}$	76
Şekil 3.25d	L-şekilli domende dejenere Bose gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $\tilde{\delta} \cong \tilde{H}$	76
Şekil 3.25e	L-şekilli domende dejenere Bose gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $\tilde{\delta} \cong 2\tilde{H}$	77
Şekil 3.26a	Birbirine bağlı iki kare domende dejenere Bose gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $2\tilde{\delta} \cong \tilde{d}$	77
Şekil 3.26b	Birbirine bağlı iki kare domende dejenere Bose gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $\tilde{\delta} \cong \tilde{d}$	77
Şekil 3.26c	Birbirine bağlı iki kare domende dejenere Bose gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $\tilde{\delta} \cong 2\tilde{d}$	78
Şekil 3.27	Keyfi şekilli bir domende dejenere Bose gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı	78
Şekil 4.1	He-Si için boyutsuz LJ(12-6) potansiyel fonksiyonu	80
Şekil 4.2	Tek boyutlu bir domende Maxwell gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $\alpha=0.045$ (T=300 K)	84
Şekil 4.3	Tek boyutlu bir domende Maxwell gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $\alpha=0.14$ (T=30K)	84
Şekil 4.4	Tek boyutlu bir domende Maxwell gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $\alpha=0.35$ (T=5K)	85
Şekil 4.5	Kare şekilli bir domende LJ potansiyeli (He-4 ve Si duvar	

	etkileşmesi) altında Maxwell gazının boyutsuz yoğunluk dağılımı, $\alpha=0.045$ ($T=300$ K)	85
Şekil 4.6	Tek boyutlu bir domende LJ potansiyeli (He-3 ve Si duvar) altında Fermi gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $\alpha=0.045$ ($T=300$ K, $\Lambda = 5$)	86
Şekil 4.7	Tek boyutlu bir domende LJ potansiyeli (He-3 ve Si duvar) altında Fermi gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $\alpha=0.14$ ($T=30$ K, $\Lambda = 5$)	87
Şekil 4.8	Tek boyutlu bir domende LJ potansiyeli (He-3 ve Si duvar) altında Fermi gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $\alpha=0.35$ ($T=5$ K, $\Lambda = 5$)	87
Şekil 4.9	Kare şekilli bir domende LJ potansiyeli (He-3 ve Si duvar) altında Fermi gazının boyutsuz yoğunluk dağılımı, $\alpha=0.14$ ($T=30$ K, $\Lambda = 5$)	88
Şekil 4.10	Kare şekilli bir domende LJ potansiyeli (He-3 ve Si duvar) altında Fermi gazının boyutsuz yoğunluk dağılımı, $\alpha=0.35$ ($T=5$ K, $\Lambda = 5$)	88
Şekil 4.11	Tek boyutlu bir domende Bose gazının LJ potansiyeli (He-4 ve Si duvar) altında boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $\alpha=0.045$ ($T=300$ K, $\Lambda = -0.11$)	89
Şekil 4.12	Tek boyutlu bir domende Bose gazının LJ potansiyeli (He-4 ve Si duvar) altında boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $\alpha=0.14$ ($T=30$ K, $\Lambda = -1.11$)	90
Şekil 4.13	Tek boyutlu bir domende Bose gazının LJ potansiyeli (He-4 ve Si duvar) altında boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $\alpha=0.35$ ($T=5$ K, $\Lambda = -6.14$)	90
Şekil 4.14	Kare şekilli bir domende LJ potansiyeli altında Bose gazının boyutsuz yoğunluk dağılımı, $\alpha=0.14$ ($T=30$ K, $\Lambda = -1.11$)	91
Şekil 4.15	Kare şekilli bir domende LJ potansiyeli altında Bose gazının boyutsuz yoğunluk dağılımı, $\alpha=0.35$ ($T=5$ K, $\Lambda = -6.14$)	91
Şekil 5.1	Nano kapasitörün elektron mikroskobu ile alınan görüntüsü	95
Şekil 5.2	Silisyum plaka üzerinde üretilmiş farklı özellik ve boyutlarda nano kapasitörler	96
Şekil 5.3	Nb nano elektrotlar	97
Şekil 5.4	Makro kapasitörün bileşenleri	97
Şekil 5.5	Kryostat sistem	98

SEMBOL LİSTESİ

A	: Domenin yüzey alanı
A_M	: Makro kapasitörün yüzey alanı
A_n	: Nano kapasitörün yüzey alanı
C	: Domenin çevre uzunluğu (periferi)
C_M	: Makro kapasitörün kapasitesi
C_n	: Nano kapasitörün kapasitesi
C_P	: Sabit basınçta ısı kapasitesi
C_V	: Sabit hacimde ısı kapasitesi
D	: Domen boyutu
d	: Parçacıklararası ortalama mesafe, katı küre yarıçapı, birbirine bağlı domenlerde geçiş bölgesi genişliği
d_n	: Nano kapasitörde elektrotlar arasındaki mesafe
E	: Sistemin toplam enerjisi
E_{cl}	: Klasik toplam enerji
F	: Serbest enerji
\mathfrak{S}	: İki parçacık etkileşme kuvveti
F_A	: Kuantum yüzey enerjisi
F_V	: Klasik serbest enerji
f_V	: Klasik serbest enerji yoğunluğu (hacimsel)
f_A	: Kuantum yüzey enerjisi yoğunluğu
g_D	: D -boyutlu domende tutuklanmış parçacıklar için durum yoğunluğu
H	: Entalpi, Silindirik bir domende yükseklik, L-şekilli domende dar bölge yüksekliği
h	: Planck sabiti
\hbar	: İndirgenmiş Planck sabiti
i, j, k	: Kartezyen koordinatlarda kuantum durum değişkenleri
J_l	: Küresel Bessel Fonksiyonu
k_b	: Boltzmann sabiti
L	: Domenin karakteristik boyutu
$L_c(T)$: Parçacıkların en olası de Broglie dalgaboyunun yarısı
L_c^F	: Fermi sıcaklığında en olası de Broglie dalgaboyunun yarısı
L_M	: Makro kapasitörün uzunluğu
L_x, L_y, L_z	: Dikdörtgen bir domenin boyutları
L_x^{eff}	: x -yönündeki etkin uzunluk
Li	: Polilogaritmik fonksiyon
m	: Parçacığın kütlesi, LJ potansiyel ifadesi için verilen sabit sayılar
N	: Toplam parçacık sayısı
n	: LJ potansiyel ifadesi için verilen sabit sayılar
n_{cl}	: N/V olup, parçacık yoğunluğunun klasik ifadesi
n_{eff}	: Etkin parçacık yoğunluğu
n_{cl}^M	: Makro kapasitördeki gazın homojenize yoğunluğu

n_{cl}^n	: Nano kapasitördeki gazın homojenize yoğunluğu
n_M^{eff}	: Makro kapasitördeki gazın etkin yoğunluğu
n_n^{eff}	: Nano kapasitördeki gazın etkin yoğunluğu
n_q	: Kuantum yoğunluk, $1/\lambda_T^3$
N_C	: Domendeki köşe, uç veya delik sayısı
P	: Basınç
P_{cl}	: Klasik basınç
P_R	: Küresel ve silindirik domende radyal yöndeki basınç
P_H	: Silindirik domende eksenel yöndeki basınç
$P_{xx}^q, P_{yy}^q, P_{zz}^q$: x, y ve z -yönlerinde oluşan kuantum kökenli basınç düzeltmeleri
P_{xx}, P_{yy}, P_{zz}	: x, y ve z -yönündeki basınçlar
R	: Küresel ve silindirik domenler için yarıçap
R_1	: Makro kapasitörün iç çapı
R_2	: Makro kapasitörün dış çapı
r	: parçacıklararası mesafe
R_{eff}, H_{eff}	: Etkin yarıçap ve etkin yükseklik
r_0	: Katı küre olarak varsayılan parçacığın çapı
S	: Entropi
S_{cl}	: Klasik entropi
T	: Sıcaklık (K)
T_c	: Kritik sıcaklık
T_F	: Fermi sıcaklığı
T_{LJ}	: Lennard-Jones sıcaklığı
$U(r)$: İki parçacık etkileşme potansiyeli
V	: Domen Hacmi
V_{eff}	: Etkin domen hacmi
V_M	: Makro kapasitörün geometrik hacmi
V_M^{eff}	: Makro kapasitörün etkin hacmi
V_n	: Nano kapasitörün geometrik hacmi
V_n^{eff}	: Nano kapasitörün etkin hacmi
\mathbf{x}	: Konum vektörü
x, y, z	: Kartezyen konum koordinatları
X_i, Y_j, Z_k	: Dalga fonksiyonunun bileşenleri
x_{nl}	: l -inci mertebeden küresel Bessel fonksiyonlarının n -inci dereceden kökleri
Y_{lm}	: Küresel harmonikler
α	: Ters ölçek katsayısı
α^F	: Fermi sıcaklığında boyutsuz ters ölçek katsayısı
α_R, α_H	: Radyal ve eksenel yönde ters ölçek katsayıları
$\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$: x, y ve z -yönlerinde boyutsuz ters ölçek katsayıları
δ	: Kuantum sınır tabakası kalınlığı
$\tilde{\delta}_1, \tilde{\delta}_2$: Fermi gazlarında karakteristik boyutsuz sınır tabaka kalınlıkları
\tilde{h}_1, \tilde{h}_2	: Fermi gazlarında karakteristik boyutsuz yoğunluk genlikleri
\tilde{x}_m	: Fermi gazlarında maksimum yoğunluğun boyutsuz koordinatı
ϵ_0	: Parçacıkların yer seviyesi enerjisi, vakum dielektrik sabiti
ϵ_{LJ}	: Lennard-Jones potansiyeli kuyu derinliği

ε	: Enerji özdeğeri
ε_r	: r -kuantum halinde bulunan parçacığın enerji özdeğeri
ε_r^M	: Makro kapasitördeki gazın bağıl dielektrik sabiti
ε_r^n	: Nano kapasitördeki gazın bağıl dielektrik sabiti
ε_u	: İki parçacık için minimum etkileşme potansiyeli kuyu derinliği
ζ	: Tek parçacık bölüşüm fonksiyonu
$\zeta(x)$: Zeta fonksiyonu
$\Theta(x)$: Adım fonksiyonu
κ	: Dalga sayısı olup, dalga vektörünün şiddetidir, $\kappa = \kappa $
$\kappa_x, \kappa_y, \kappa_z$: Dalga vektörünün kartezyen bileşenleri
Λ	: Boyutsuz global kimyasal potansiyel, $\Lambda = \mu/k_b T$
Λ_F	: Boyutsuz Fermi potansiyeli, $\Lambda_F = \mu_F/k_b T$
Λ_L	: Boyutsuz yerel kimyasal potansiyel
Λ_S	: 3D davranıştan 2D davranışa geçişin gerçekleştiği boyutsuz kimyasal potansiyel değeri
λ_T	: Parçacıkların termal de Broglie dalgaboyu
λ_T^c	: Kritik sıcaklıkta parçacıkların termal de Broglie dalgaboyu
λ_T^F	: Fermi sıcaklığında parçacıkların termal de Broglie dalgaboyu
μ	: Kimyasal potansiyel
μ_D	: Dipol momentini
μ_F	: Fermi potansiyeli
σ	: Kuantum yüzey gerilimi
ψ	: Dalga fonksiyonu
$\Omega(\kappa)$: κ değerinden daha küçük özdeğerlerin sayısı

İndisler

\sim	: Boyutsuz büyüklük sembolü
0	: Yer seviyesi indisi
I, II, III	: Domen indisleri
c	: Kritik sıcaklık indisi
cl	: Kuantum ölçek etkileri olmaksızın verilen (klasik) ifadeler için indisi
D	: Domen boyutu indisi
e	: Uyarılmış seviye indisi
eff	: Etkin değerler indisi
i, j, k	: Kartezyen koordinatlarda kuantum hal indisleri
M	: Makro domen indisi
max	: Maksimum değerler indisi
n, l, m	: Küresel koordinatlarda kuantum hal indisleri,
n, m, q	: Silindirik koordinatlarda kuantum hal indisleri
n	: Nano domen indisi
q	: Kuantum ölçek etkisi ile verilen ifadeler için indisi
R, H	: Küresel ve silindirik koordinatlarda koordinat indisleri
r	: Genelleştirilmiş kuantum hal indisi
x, y, z	: Koordinat indisleri

GAZLARIN TERMODİNAMİK DAVRANIŞINDA KUANTUM ÖLÇEK ETKİLERİ

ÖZET

Özellikle yarı iletken teknolojisindeki ilerlemelere paralel olarak gelişen nano teknoloji bugün mikro ve nano ölçekte mekanik donanımların ve sistemlerin yapımını da olanaklı hale getirmiştir. Nano ölçekte mekanik yapıların üretilebilir hale gelmesi ve mikro/nano ölçekte türbinler, pompalar, karıştırıcılar, ısı deęiştiricileri, valfler vb. donanımların gerçekleştirilmeye başlamasıyla birlikte bu ölçekte gazların termodinamik özelliklerinin ne şekilde deęiştiięi, nasıl modellenebileceęi, bu deęişimlerden nasıl yararlanabileceęi, olası yeni davranışlara dayalı yeni cihazların/teknolojilerin nasıl geliştirilebileceęi gibi sorular da gündeme gelmeye başlamıştır. Bu çerçevede gazların termodinamik davranışları üzerinde kuantum ölçek etkilerinin araştırılması da göreceli olarak yeni ve güncel bir konuyu oluşturmaktadır. Bu nedenle mikro/nano ölçekte gazların termodinamięi konusu yarı iletkenlere göre daha yeni bir çalışma alanını oluşturmakta ve enerji teknolojilerinden savunma teknolojilerine kadar birçok alanda uygulama potansiyelini barındırmaktadır.

Nano ölçekte gazların termodinamik özellikleri makro ölçektekinden farklılık gösterir. Bu farklılığın nedenlerinden biri olan kuantum ölçek etkisi; sistemin karakteristik boyutu ($L=V/A$, V : hacim, A : yüzey alanı) yanında, parçacıkların termal de Broglie dalga boyunun (λ_T) ihmal edilemedięi durumlarda önem kazanır. Böyle bir durumda, parçacıkların enerji deęerlerine ilişkin süreklilik yaklaşımı da geçerliliğini yitirir ve kesiklilik, sistemin davranışlarında özellikle nano ölçekte belirgin hale gelen kuantum ölçek etkilerinin ortaya çıkmasına yol açar. Kuantum ölçek etkileri, termodinamik hal fonksiyonlarını sistemin geometri (şekil) ve ölçeğine baęımlı hale getirerek, makro ölçekte karşılaşılmayan yeni ve ilginç davranışlara yol açar. Bunların arasında anizotropik gaz basıncı, ölçek ve geometri farkından kaynaklanan gaz difüzyonu, termoelektrik etkilere benzer termoölçek etkilerinin ortaya çıkması ve kütleye baęımlı büyüklüklerin (extensive quantities) toplanabilirlik (additivity) özellięinin ortadan kalkması sayılabilir.

Literatürde gazların termodinamik özelliklerinin, gazların tutuklandıkları domenin şekil ve ölçeğine olan baęımlılıęı, sadece global özelliklerle sınırlı olarak, son yıllarda incelenmeye başlanmıştır. Global termodinamik özellikler üzerindeki kuantum ölçek etkileri ise, Schrödinger denkleminin analitik çözümünün mümkün olabildięi dikdörtgen, silindir ve küresel tek bölge basit geometriler için incelenmiş olup, bu konudaki çalışmalar Maxwell-Boltzmann istatistięine uyan klasik ideal gazlarla sınırlı bulunmaktadır.

Öte yandan gerçek sistemlerde tek bölge geometrik yapılar yerine çoęunlukla çok bölge geometrik yapılarla karşılaşılmaktadır. Hem global termodinamik özelliklerdeki şekil ve ölçek baęımlılıęının fiziksel mekanizmalarının detaylı olarak

anlaşılabilmesi için hem de denge dışı termodinamikte yaygın olarak kullanılan yerel denge varsayımına dayalı modeller için yerel termodinamik özelliklerin de incelenmesi ayrıca önem taşımaktadır. Bunun yanı sıra, düşük sıcaklıklarda parçacıkların termal de Broglie dalga boyunun büyümesi nedeniyle kuantum ölçek etkilerinin önemi artmakta ve buna bağlı olarak çalışmaya konu olan geometri ve ölçek bağımlılığı şiddetlenmektedir. Düşük sıcaklık koşullarında önemi daha da artan bu bağımlılığın incelenebilmesi için Maxwell-Boltzmann istatistiği yerine Bose-Einstein ve Fermi-Dirac istatistiklerine dayanan modellerin kullanılması gerekmektedir.

Bu tez çalışmasının temel amacı; nano ölçekte tutuklanmış gazların global ve yerel termodinamik büyüklükleri üzerinde kuantum ölçek etkilerinin incelenebileceği bir model geliştirerek, termodinamik davranışlar üzerinde bu etkilerin hangi mekanizmayla ve hangi büyüklükte gerçekleştiğini belirlemektir. Ayrıca bu etkilerin, sıcaklık, ölçek, şekil vb. kontrol parametreleri ile nasıl ve ne kadar değiştiğini incelemek de tezin temel amacıdır. 105T086 no.lu uluslararası bir TÜBİTAK projesi kapsamında gerçekleşen bu tez çalışmasında elde edilen teorik öngörülerin deneysel doğrulaması için, Physikalisch Technische Bundesanstalt-Berlin (PTB-Berlin) ile işbirliği çerçevesinde bir deney planlanmış olup gereken nano ölçekli yapılar üretilmiştir.

Bu tez çalışmasında, hal yoğunluğu için Weyl varsayımı kullanılarak keyfi bir domende tutuklanmış klasik ve kuantum gazlarının serbest enerjisi (Helmholtz) üzerinde kuantum ölçek etkileri genelleştirilerek global termodinamik özellikler türetilmiştir. Nano ölçekte, gazlarda klasik olarak gözlenmeyen yanal kuvvetlerin ortaya çıktığı gösterilmiştir. Gazların yerel yoğunluk dağılımı üzerinde kuantum ölçek etkileri öncelikle Schrödinger denkleminin analitik çözümlerinin mümkün olabildiği dikdörtgen, küre ve silindirik geometrilerde ele alınmıştır. Analitik çözümün mümkün olmadığı seçilmiş bazı geometrilerde tutuklanmış Maxwellian ve kuantum gazlarının yerel yoğunluk dağılımları sayısal çözümlerle incelenmiştir. Gazların yerel yoğunluğunun termodinamik denge durumunda dahi homojen olmadığı ve gaz yoğunluğunun domen sınırlarında sıfır değerine gittiği bir kuantum sınır tabakasının olduğu gösterilmiştir. Gerek yerel yoğunluk dağılımı ve gerekse bu tabakanın kalınlığı ile ilişkili analitik ifadeler Maxwellian, Fermi ve Bose gazları için ayrı ayrı elde edilmiştir. Maxwellian ve Bose gazlarından farklı olarak Fermi gazının yoğunluk dağılımında Friedel salınımlarının oluştuğu görülmüştür. Kuantum sınır tabakasının kuantum ölçek etkilerinin sebebi olduğu ve tüm domenlerde aynı gaz tipi için aynı kalınlık ifadesine sahip olduğu belirlenmiştir. Ayrıca parçacıklarla sınırlar arasındaki Lennard-Jones (LJ) tipi etkileşmelerin yerel yoğunluk üzerinde yol açtığı değişimler kuantum ölçek etkileri de göz önüne alınarak modellenmiş ve salt LJ etkileşmelerinin sonuçları ile karşılaştırılmıştır. Elde edilen teorik sonuçların deneysel doğrulamasının yapılabilmesi amacıyla da bir deney önerisinde bulunulmuştur.

QUANTUM SIZE EFFECTS IN THE THERMODYNAMIC BEHAVIORS OF GASES

SUMMARY

Nowadays nano technology, which is developing parallel to the progress in especially semiconductor technology, makes the production of mechanical systems and structures in micro/nano scale possible. Along with the production of mechanical structures in nano scale and realization of the devices like gas turbines, pumps, mixers, heat exchangers, valves etc., the following questions arise: how the thermodynamic properties of gases differ in this scale, how it can be modeled, how one can make use of these differences, how new devices and technologies can be developed in this scale. As a result, quantum size effects on thermodynamic behaviors of gases became a new and current research topic. Therefore, the subject of thermodynamics of gases in micro/nano scale is a new research area in comparison with the semiconductors and it has many application potentials from energy technologies to the military defense technologies.

In nano scale, thermodynamic properties of gases differ from those in macro scales. One of the reasons of this difference is the quantum size effects, which become important when the thermal de Broglie wavelength of particles (λ_T) is not negligible in comparison with the characteristic length of the system ($L=V/A$, V volume, A surface area). In such a case, the continuum approximation for the energy eigenvalues of particles becomes invalid and the discrete nature of energy eigenvalues causes quantum size effects, which are noticeable in nano scale. Quantum size effects make the thermodynamic state functions depend on geometry (shape) and size of the system and it causes some new and interesting behaviors, which are not observed in macro scale. Some of them are anisotropic gas pressure, gas diffusion due to size and geometry difference, thermo-size effects like thermo-electric effects and the vanishing of the additivity property of extensive quantities.

In literature, the dependence of thermodynamic properties of gases on the shape and size of the confinement domain have recently been examined for the global properties only. These studies consider rectangular, cylindrical and spherical geometries with a single domain, for which the analytical solution of the Schrödinger equation is possible, and they are limited with the classical ideal gases obeying Maxwell-Boltzmann statistics.

On the other hand, in real systems, generally multi-domain geometric structures are used instead of single ones. Both to understand the physical mechanism of the shape and size dependence of global thermodynamic properties in detail and to use the models based on the local equilibrium assumption, which are often used in non-equilibrium thermodynamics, it is important to examine also the local thermodynamic properties. Furthermore, quantum size effects become more

important at low temperatures due to longer thermal de Broglie wave length of particles and correspondingly the geometry and size dependence, which is the main subject of this thesis, becomes stronger. This dependence is more significant at low temperature conditions and it is necessary to use the models based on Fermi-Dirac and Bose-Einstein statistics instead of Maxwell-Boltzmann one.

The main objective of this thesis is to develop a model that provides to examine quantum size effects on the global and local thermodynamic properties of gases confined in nano scale and to determine the mechanisms and the strength of these effects. Furthermore, it is also the aim of this thesis to examine the variation of these effects with the control parameters such as temperature, size, shape etc. For the verification of the theoretical predictions of this thesis, which is a part of an international TUBITAK research project with the contract number 105T086, an experiment has been planned by collaboration with Physikalisch Technische Bundesanstalt-Berlin (PTB-Berlin) and the required nano structures have already been produced.

In this thesis, quantum size effects on free energy of classical and quantum gases confined in a domain of arbitrary shape are generalized by considering Weyl's conjecture for density of states and the global thermodynamic properties are derived. In nano scale, it is shown that gases can have the lateral forces which can not be classically observed. Quantum size effects on local density of gases are considered for rectangular, spherical and cylindrical geometries for which the Schrödinger equation can be solved analytically. Local density distributions of Maxwellian and quantum gases confined in some special geometry are examined by numerical solutions. It is shown that local density of gases is not homogenous even at thermodynamic equilibrium and density goes to zero value within a quantum boundary layer near to the boundaries. Analytical expressions for both density distribution and the thickness of this boundary layer are given for Maxwellian, Fermi and Bose gases. It is seen that there is a Friedel-like oscillations in density of Fermi gas different than those in Maxwellian and Bose gases. It is determined that the quantum boundary layer is the origin of quantum size effects and it has the same thickness for whole domains for the same type of gas. Furthermore, the influence of Lennard-Jones (LJ) type particle-boundary interactions on the local density is calculated by considering the quantum size effects and the results are compared with the results of pure LJ interactions. An experimental setup is suggested to verify the predictions of the theoretical results.

1. GİRİŞ

1.1. Çalışmanın Konusu

Yarı iletken teknolojisindeki ilerlemelere paralel olarak gelişen nano teknoloji bugün mikro ve nano ölçekte mekanik donanımların ve sistemlerin yapımını da olanaklı hale getirmiştir [1-8]. Milimetreden nanometreye kadar geniş bir ölçekte üretim amacıyla çeşitli yöntemler geliştirilmiş, farklı uygulama ve malzemeler ele alınmış ve mikro sistem konusunda birçok çalışma yapılmıştır. Son yıllarda nanometrik ölçekte üretilen malzeme ve yapılarda önemli ilerlemeler olmuştur. 1982 yılında taramalı tünel mikroskobunun ve 1986 yılında atomik kuvvet mikroskobunun icat edilmesiyle, nano ölçekte bir yüzeyin atomik çözünürlükte görüntülenmesi, yüzeydeki atom veya moleküllerin toplanması, kaydırılması, sürüklenmesi mümkün olmuştur. Günümüzde çapı yaklaşık 1 nm olan karbon nano tüpler üretilmektedir. Hidrojen atomunun çapının 0.1 nm civarında olduğu düşünülürse, nanoteknolojinin bugün gelmiş olduğu nokta daha iyi anlaşılabilir. Nano yapılar; yeni nesil bilgisayar teknolojisi, elektronik, fotonik, biyoloji, kimya, tıp, haberleşme, askeri uygulamalar ve benzeri birçok alanda uygulama bulmaktadır [9-17].

29 Aralık 1959 yılında, California Institute of Technology’de “American Physical Society” tarafından düzenlenen bir toplantıda, Richard Feynman’ın, malzemelerin tek tek atom ve molekül boyutunda yeniden düzenlenebileceği olasılığından bahsettiği ve nanobilim ve nanoteknoloji konusunu takdim ettiği “There is a plenty of room at the bottom” başlıklı konuşması nanoteknoloji fikrinin başlangıcı olarak sayılmaktadır [18]. Nanoteknoloji teriminden ilk defa, Tokyo Üniversitesi araştırmacılarından Norio Taniguchi’nin mühendislikte nanometre seviyesinde malzemelerin üretilebileceğini öngördüğü 1974 yılındaki çalışmasında bahsedilmiştir [19]. Bugün ise nanoteknoloji, 2004 yılı itibariyle tüm dünyada toplam 30 milyar\$’lık bir pazara sahip olup, 2015 yılı itibariyle bu rakamın 1 trilyon\$’a ulaşması beklenmektedir [20]. Sadece Amerika Birleşik Devletlerinde özel sektör

haricinde hükümetin 2008 yılı için nanoteknoloji konusundaki araştırmalara yaklaşık 1.5 milyar\$ ayırmış olması bu konunun önemini hakkında bir fikir vermektedir [21].

Küçülen boyutlarla birlikte, bu yeni yapıların davranışlarının makroskopik eşdeğerlerine göre nasıl değiştiğini inceleme ve anlama konusu, günümüzün önemli bilimsel etkinliklerinden biri olmuştur. Bu çalışmalar; bilinen makroskopik yaklaşımlara dayalı modellerin, nano-ölçekteki geçerliliklerinin sınanmasını ve gereken yeni modellerin geliştirilmesini kapsamaktadır. Nano ölçekte sistemin özelliklerinin, makro ölçüğe oranla büyük farklılıklar gösterdiği bilinmektedir. Bu farklılıklar, elektronik özelliklerden optik özelliklere, termodinamik özelliklerden transport özelliklere kadar uzanmaktadır. Bu ölçekte yüzey etkileri ve kuantum etkiler önemli hale gelmektedir. Nanobilim; bu etkileri ve onların malzeme özellikleri ile fiziksel, kimyasal, biyolojik vb. süreçler üzerindeki tesirlerini incelemekle ilgili bir bilim dalı olup, nanoteknoloji ise malzemenin nano ölçekte farklılaşan yada ortaya çıkan yeni özelliklerini de kullanarak nano yapılar, cihazlar ve sistemler tasarlamak, üretmek, geliştirmek ve uygulamalar yapmaktır.

Yarı-iletken teknolojisindeki büyük ilerlemeye paralel olarak elektronik ve optik özelliklerdeki farklılıklar yoğun biçimde incelenmiş ve incelenmeye devam etmektedir [22-38]. Nano ölçekte mekanik yapıların üretilebilir hale gelmesi ve mikro/nano ölçekte türbinler, pompalar, karıştırıcılar, ısı değiştiricileri, valfler vb. donanımların gerçekleştirilmeye başlanmasıyla birlikte bu ölçekte gazların termodinamik özelliklerinin ne şekilde değiştiği, nasıl modellenebileceği, bu değişimlerden nasıl yararlanabileceği, olası yeni davranışlara dayalı yeni cihazların/teknolojilerin nasıl geliştirilebileceği gibi sorular da gündeme gelmeye başlamıştır. Bu çerçevede gazların termodinamik davranışları üzerinde kuantum ölçek etkilerinin araştırılması da göreceli olarak yeni ve güncel bir konuyu oluşturmaktadır. Bu konuda literatürde sınırlı sayıda yayın mevcut olup konu gelişimini sürdürmektedir [39-47].

İstatistik fiziğin yöntemleri, gazların termodinamik özelliklerinin dağılım fonksiyonundan hareketle hesaplanmasını olanaklı kılar. Dağılım fonksiyonu, gaz parçacıklarının olası mikro durumlar üzerindeki istatistiksel dağılımını temsil eder. Dağılım fonksiyonundan hareketle mikro durumlar üzerinden toplamlarla ifade edilen gazın termodinamik hal fonksiyonlarından biri, genellikle serbest enerji,

hesaplanarak sistemin diğer tüm termodinamik özellikleri bu hal fonksiyonu cinsinden tanımları kullanılarak elde edilirler.

Termodinamik özellikler üzerinde parçacıkların dalga karakterinin, dolayısıyla kuantum etkilerin önemini belirleyen iki koşuldan söz edilebilir. Bunlardan biri parçacıklar arası ortalama mesafe, d , ile parçacıkların termal de Broglie dalga boyu, λ_T , arasındaki büyüklük sıralamasıdır. $d \gg \lambda_T$ durumunda parçacıkların dalga karakterinin dağılım fonksiyonu üzerindeki etkisi önemsizdir ve tanecik varsayımına dayanan Maxwell-Boltzmann (MB) istatistiğinden hareketle gazların termodinamik özelliklerini yüksek bir doğrulukla belirlemek mümkündür. Bu koşulun sağlanmadığı durumda ise, parçacıkların dalga karakteri önem kazanır ve dalga fonksiyonunun simetrik yada anti-simetrik olmasına bağlı olarak sırasıyla Bose-Einstein (BE) ve Fermi-Dirac (FD) istatistikleri geçerli olur. Bu istatistikler ve bunlara dayanarak elde edilen termodinamik özellikler $d \gg \lambda_T$ koşulunda MB istatistiği ve onun termodinamik özellikler için öngördüğü ifadelerle yakınsarlar.

Parçacıkların dalga karakterinin termodinamik özellikler üzerindeki önemini belirleyen diğer bir koşul ise gazın tutuklandığı domenin hacminin yüzey alanına oranıyla belirlenen karakteristik boyutu, $L = V/A$, ile λ_T arasındaki sıralamadır. $L \gg \lambda_T$ durumunda; parçacıkların ardışık enerji seviyeleri arasındaki fark termal enerjilerine ($k_b T$) kıyasla çok küçük olduğundan termodinamik hal fonksiyonlarının hesaplanması sırasında süreklilik yaklaşımı yapılır ve toplam ifadeler integral ifadeler ile yer değiştirilerek hesaplanır. Ters durumda ise integral ifadeler toplamları yeterli doğrulukla temsil edemezler. Bu durumda toplam ifadelerini daha doğru bir yöntemle hesaplamak gerekir. Bu tür bir yöntemle yapılan hesaplamalar, integral ifadelerine $\lambda_T A/V$ ile orantılı bir düzeltme getirir. Makro sistemlerde $\lambda_T A/V \rightarrow 0$ olduğundan bu düzeltme önemsizken mikro ve nano sistemlerde önem kazanır. Söz konusu düzeltmeler, λ_T/L ile orantılı olup gerek sistemin ölçeğine gerek Planck sabitine bağlı olması nedeniyle kuantum-ölçek etkilerini temsil eder. Mikro/nano ölçekte tutuklanmış gazların termodinamik özelliklerinde önemi artan kuantum ölçek etkileri; gerçekte sonlu boyuta sahip bir domende, Heisenberg belirsizlik ilkesi gereğince, parçacıkların momentum bileşenlerinden hiçbirinin sıfır değerini alamamasından kaynaklanmaktadır.

Küçük ölçekli sistemlerde belirgin hale gelen kuantum ölçek etkileri, sistemin termodinamik özelliklerini şekil ve ölçeğe bağımlı kılar. Bu bağımlılık; özellikle nano ölçekte gözlenebilen yeni ve ilginç davranışların ortaya çıkmasına yol açar. Bunlar arasında anizotropik gaz basıncı, ölçek ve geometri farkından kaynaklanan gaz difüzyonu, termoelektrik etkilere benzer termoölçek etkilerinin ortaya çıkması ve kütleye bağımlı büyüklüklerin (extensive quantities) toplanabilirlik (additivity) özelliğinin ortadan kalkması sayılabilir [43, 45].

Bu tez çalışmasının temel amacı; nano ölçekte tutuklanmış gazların global ve yerel termodinamik büyüklükleri üzerinde kuantum ölçek etkilerinin incelenebileceği bir model geliştirerek, termodinamik davranışlar üzerinde bu etkilerin hangi mekanizmayla ve hangi büyüklükte gerçekleştiğini belirlemektir. Ayrıca bu etkilerin, sıcaklık, ölçek, şekil vb. kontrol parametreleri ile nasıl ve ne kadar değiştiğini incelemek de tezin temel amacıdır.

1.2. Literatürde Tez Konusu ile İlgili Yapılmış Çalışmalar

Sonlu domende tutuklanmış gazların global termodinamik özelliklerinin domenin şekil ve ölçeğine olan bağımlılığı, nano teknolojidaki gelişmelere paralel olarak özellikle son yıllarda incelenmeye başlanan bir konuyu oluşturmaktadır. Molina 1996 yılındaki çalışmasında sonlu ölçekte bir kap içerisindeki ideal Maxwellian gazın global termodinamik özelliklerini incelemiştir [39]. Gutierrez ve Yanez bir ters problem olarak; sonlu ölçekli bir kaptaki tutuklanmış ideal bir gazın termodinamik özelliklerinden giderek kabın şeklinin kestirilip kestirilemeyeceğini sorusuna cevap aramışlar ve farklı şekle sahip isospektral domenlerin olabileceğini göstermişlerdir [40]. Pathria 1998 yılındaki çalışmasında ise sonlu-ölçek etkileri altındaki 1-boyutlu ideal Bose gazında Bose-Einstein yoğunlaşmasını ele almıştır [41]. Dai ve Xie, 2003 yılında yayınladıkları çalışmalarında 2-boyutlu sonlu bir uzayda ve 3-boyutlu sabit kesitli uzun bir tüp içerisinde tutuklanmış ideal gazların global termodinamik özellikleri üzerinde sınırların ve domende bulunan deliklerin etkisini incelemiştir [42]. Sisman ve Müller dikdörtgen domende tutuklanmış ideal Maxwellian gazların global termodinamik özellikleri üzerinde kuantum ölçek etkilerini ele almışlar ve ideal gazlarda dahi basıncın skaler bir büyüklük yerine tensörel bir büyüklüğe dönüştüğünü ve anizometrik bir dikdörtgende gaz basıncının anizotropik olacağını, ölçek farkının difüzyon için sürücü bir kuvvet olacağını ve termoelektrik etkilere

benzer termoölçek etkilerinin ortaya çıkacağını göstermişlerdir [43]. Yine Dai ve Xie sonlu uzayda ideal gazların global termodinamik özellikleri üzerinde geometrinin etkilerini 2004 yılındaki çalışmalarında ele almışlardır [44]. Sisman tarafından 2004 yılında yayınlanan bir diğer çalışmada ise, küresel ve silindirik domenlerde tutuklanmış Maxwellian ideal gazların global termodinamik özelliklerini türeterek serbest enerjide kuantum ölçek etkilerini temsil eden terimin dikdörtgen, silindir ve küre için ortak bir formda olduğu gösterilmiştir [45]. İdeal gazlarda kuantum yüzey gerilimi ve yol açtığı yanal kuvvetler 2005 yılındaki bir çalışmada Sisman ve diğ. tarafından ele alınmıştır [46]. Dirichlet ve Neumann sınır koşulları için Fermi ve Bose gazlarının global termodinamik özellikleri üzerinde domen sınırlarının etkileri arasındaki fark, Pang vd. tarafından 2006 yılındaki bir çalışmada ele alınmıştır [47].

1.3. Tezin Amacı

Yukarıda özetlenen literatürde yer alan sınırlı sayıdaki bu çalışmalarda; gazların sadece global termodinamik özellikleri ele alınmıştır. Öte yandan gerek yerel denge varsayımına dayanan denge-dışı termodinamik modeller için gerekse global termodinamik özelliklerde şekil ve ölçek bağımlılığının fiziksel mekanizmalarının anlaşılabilmesi için yerel termodinamik özelliklerin incelenmesi de ayrı bir önem taşımaktadır. Termodinamik özelliklerin şekil ve ölçeğe bağımlılığı sadece kuantum ölçek etkilerinden kaynaklanmayıp aynı zamanda domen sınırlarına yakın parçacıkların domen sınırları ile etkileşmesi sonucu da ortaya çıkabilir. Gerek kuantum ölçek etkileri gerekse bu tür bir etkileşme yerel yoğunluk dağılımını değiştirebilir. Dikdörtgen bir domende tutuklanmış ideal Maxwellian bir gazın yerel yoğunluk dağılımı kuantum ölçek etkileri göz önüne alınarak incelenmiş ve klasik beklentilerin aksine domen sınırlarına yakın bölgelerde homojenliğin bozulduğu ve gaz yoğunluğunun sınırlara yaklaştıkça azalarak sıfıra gittiği bir sınır tabakanın var olduğu gösterilmiştir [48]. Tez sahibinin de içinde yer almış olduğu söz konusu çalışmanın başlangıcı, bu tez çalışmasına konu olan problemleri gündeme getirmiştir.

Bu çerçevede bu tez çalışmasının temel amacı; gerek kuantum ölçek etkileri gerekse parçacık-duvar etkileşmeleri nedeniyle gazların yerel yoğunluk dağılımı üzerinde oluşabilecek değişimleri modelleyerek karşılaştırmalı olarak incelemek ve kuantum ölçek etkilerinin gazların yerel yoğunluk dağılımı üzerinde öngörülen etkilerini deneysel olarak doğrulama için bir öneri getirmektir. Bu çalışma sırasında ayrıca

gazların global termodinamik özellikleri üzerinde kuantum ölçek etkilerini keyfi şekilli sonlu domenler için genelleştirilmiş olarak ifade eden bir model de verilmiştir. 105T086 no.lu uluslararası bir TÜBİTAK projesi kapsamında gerçekleşen bu tez çalışmasında elde edilen teorik öngörülerin deneysel doğrulaması için, Physikalisch Technische Bundesanstalt-Berlin (PTB-Berlin) ile işbirliği çerçevesinde bir deney de planlanmış olup gereken nano ölçekli yapılar üretilmiştir.

1.4. Bölümlere Göre Tezin İçeriği

Bölüm 2’de, istatistik termodinamikte gazların global termodinamik özelliklerinin türetimi, kuantum ölçek etkilerinin kökeni ve bazı sonuçları, parçacık-duvar etkileşmelerinin doğası ve modellenmesi ile ilgili konularda temel kavramlar verilmiştir. Bölüm 3’ün ilk kısmında (3.1), kuantum ölçek etkileri göz önüne alınarak Fermi ve Bose gazlarının global termodinamik özellikleri keyfi şekilli bir domen için analitik olarak türetilmiş ve sonrasında klasik (Maxwellian) ve dejenere limitlerdeki durumu ele alınmıştır. İkinci kısımda (3.2) ise yerel yoğunluk dağılımı dikdörtgen domende tutuklanmış Maxwellian gazlar için anlatıldıktan ve kuantum sınır tabakası ile yanal kuvvetlerin varlığı gösterildikten sonra yerel yoğunluğun küresel ve silindirik domenlerdeki analitik ifadeleri türetilerek incelenmiştir. Her üç geometride de kuantum sınır tabakasının kalınlığının aynı olduğu gösterildikten sonra yerel yoğunluğun ve kuantum sınır tabakasının durumu daha farklı geometriler ve nihayetinde düzensiz geometriler için sayısal olarak incelenmiştir. Dikdörtgen geometride tutuklanmış Fermi ve Bose gazları için yerel yoğunluk ifadeleri türetilerek incelenmiş ve dejenere durumlar için analitik ifadeler verilmiştir. Bölüm 3 içerisinde son olarak düzensiz ve keyfi geometrilerde Fermi ve Bose gazının yerel yoğunluk dağılımı sayısal yolla hesaplanarak incelenmiştir. Bölüm 4’de hem klasik hem kuantum gazlarında sadece parçacık-duvar etkileşmesinden kaynaklanan ölçek etkisinin yerel yoğunluk üzerinde yol açtığı değişim modellenmiş ve bu değişim üzerinde kuantum ölçek etkileri incelenmiştir. Bölüm 5’de kuantum sınır tabakasının deneysel doğrulaması için bir öneri getirilmiştir. Son olarak Bölüm 6’da ise, elde edilen sonuçlar üzerine tartışma ve öneriler sunulmaktadır.

2. KONUYA İLİŞKİN TEMEL KAVRAMLAR

Bu bölümde, tez konusuyla ilgili konularda bazı temel bilgilere yer verilmiştir. Bu çerçevede gazların global termodinamik özelliklerinin istatistik termodinamiğin yöntemleri ile nasıl elde edildiği ve nano ölçekte belirginleşen kuantum ölçek etkilerinin nereden kaynaklandığı ve neden olduğu farklılıklar Maxwellian ideal bir gaz örneği üzerinde tartışılmıştır. Bunun yanı sıra, tez içerisinde parçacık-duvar etkileşmelerini ele alırken kullanılan modeller hakkında temel bilgiler sunulmuştur.

2.1. İdeal Gazların Global Termodinamik Özelliklerinin Türetimi, Kuantum Ölçek Etkilerinin Kökeni ve Bazı Sonuçları

Nano ölçekte gazların termodinamik özelliklerinin makro ölçekteki orana farklılaşmasının nedenlerinden biri kuantum ölçek etkisidir. Bu ölçekte parçacıkların termal de Broglie dalgaboyu sistemin karakteristik boyutu ile ($L=V/A$) karşılaştırılabilir olduğundan, gaz atomlarının dalga karakteri önem kazanarak kuantum ölçek etkilerine sebep olur. Kuantum ölçek etkileri nedeniyle termodinamik hal fonksiyonu, gazın içinde bulunduğu bölgenin şekline ve boyutuna bağlı hale gelir [39, 41-46].

Kuantum ölçek etkilerinin nereden kaynaklandığını gösterebilmek amacıyla, boyutları L_x, L_y, L_z olan bir dikdörtgen kutu içerisinde tutuklanmış tek-atomlu ideal Maxwellian gazın termodinamik özelliklerinin türetimi ele alınmıştır [43].

Dikdörtgen bir kutuda tutuklanmış ideal Maxwellian gazlar için parçacık sayısı aşağıdaki ifade ile verilir [49]:

$$N = e^{\mu/k_b T} \sum_r e^{-\varepsilon_r/k_b T} . \quad (2.1)$$

Bu ifadede, μ kimyasal potansiyel, ε_r , r kuantum halinde bulunan gaz parçacığının enerjisi, k_b Boltzmann sabiti, T sıcaklıktır. Denklem (2.1) aşağıdaki şekilde yeniden yazılabilir,

$$N = e^{\Lambda} \zeta . \quad (2.2)$$

Bu ifadede

$$\Lambda = \mu / k_b T \quad (2.3)$$

ve ζ tek parçacık bölüşüm fonksiyonu olup aşağıdaki ifade ile verilir:

$$\zeta = \sum_r e^{-\varepsilon_r / k_b T} . \quad (2.4)$$

Enerji, basınç, entropi gibi birçok termodinamik özellik termodinamik hal fonksiyonlarından hareketle elde edilebilir. Burada termodinamik hal fonksiyonu olarak serbest enerji seçilmiştir. Sistemin serbest enerjisinin hesaplanması diğer termodinamik özelliklerin hesaplanması için yeterlidir. İdeal Maxwellian gazlar için serbest enerji ifadesi aşağıdaki gibi verilir [50]:

$$F = N\mu - Nk_b T . \quad (2.5)$$

Denklem (2.2) ve (2.3) göz önüne alındığında, (2.5) ifadesi aşağıdaki gibi yeniden düzenlenebilir:

$$F = -Nk_b T \left[\ln \left(\frac{\zeta}{N} \right) + 1 \right] . \quad (2.6)$$

Serbest enerjinin hesaplanabilmesi için parçacıkların ε_r enerji özdeğerlerinin bilinmesi ve bu özdeğerler üzerinden toplam olarak ifade edilen bölüşüm fonksiyonunun hesaplanması gerekmektedir. Böylece termodinamik özelliklerin hesaplanması serbest enerjinin bilinmesine, serbest enerjinin bilinmesi ise parçacıkların enerji özdeğer spektrumunun bilinmesi ve (2.4) ile verilen sonsuz toplam ifadesinin hesaplanmasına bağlıdır.

Enerji özdeğerleri Schrödinger dalga denkleminin çözümünden elde edilir. Düzgün (dikdörtgen, silindir ve küre gibi) geometrili sonlu bir domende tutuklanmış bir gaz için, tek parçacık enerji özdeğerleri, domenin sınır şartlarına bağlı olarak belirlenebilmektedir. Boyutları, L_x , L_y ve L_z olan dikdörtgen bir kutu içerisinde tutuklanmış tek atomlu bir gaz parçacığı için zamandan bağımsız Schrödinger denklemi aşağıdaki gibidir [51]:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}) + \varepsilon \psi(\mathbf{x}) = 0. \quad (2.7)$$

Burada m parçacığın kütlesi, ε parçacığın enerjisi, $\hbar = h/2\pi$ indirgenmiş Planck sabiti, ψ ise ε değerine karşılık gelen özfonksiyondur. Bu ifade düzenlenerek aşağıdaki gibi Helmholtz dalga denklemi formunda yeniden yazılabilir,

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{x}) + \kappa^2 \psi(\mathbf{x}) = 0. \quad (2.8)$$

Bu ifadede κ dalga sayısı ile enerji arasındaki ilişki aşağıdaki ifade ile verilir:

$$\kappa \equiv \sqrt{2m\varepsilon}/\hbar. \quad (2.9)$$

Özfonksiyonun mutlak değerinin (modülünün) karesi parçacığın o noktada bulunma olasılık yoğunluğunu verdiği için parçacıkların domen sınırlarından içeriye girme olasılığı bulunmadığı varsayılarak Schrödinger denkleminin çözümü için sınır şartları aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$\psi(0, y, z) = \psi(L_x, y, z) = 0 \quad (2.10)$$

$$\psi(x, 0, z) = \psi(x, L_y, z) = 0 \quad (2.11)$$

$$\psi(x, y, 0) = \psi(x, y, L_z) = 0. \quad (2.12)$$

Helyum gazı göz önüne alındığında, helyum atomlarının yüzeylerden saçılmasına ilişkin deneyler gaz parçacığının katı malzemedeki yapılış bir domen sınırlarına nüfuz etme olasılığının neredeyse hiç olmadığını göstermiştir [52-53]. Bu nedenle de He atomları katı yüzeylerin incelenmesinde sıkça kullanılan ideal parçacıklardan biri olarak ele alınmaktadır. Bu çerçevede (2.10)-(2.12) sınır şartları oldukça gerçekçi sınır şartlarıdır. Schrödinger denklemini çözülerek, özfonksiyonlar,

$$\psi_r(\mathbf{x}) = X_i(x)Y_j(y)Z_k(z) = \left[\sqrt{\frac{2}{L_x}} \sin\left(\frac{\pi x}{L_x} i\right) \right] \left[\sqrt{\frac{2}{L_y}} \sin\left(\frac{\pi y}{L_y} j\right) \right] \left[\sqrt{\frac{2}{L_z}} \sin\left(\frac{\pi z}{L_z} k\right) \right] \quad (2.13)$$

ve özdeğerler,

$$\kappa_x = \frac{\pi}{L_x} i, \kappa_y = \frac{\pi}{L_y} j, \kappa_z = \frac{\pi}{L_z} k \quad (2.14)$$

olarak elde edilir.

Buradan, dalga sayısının karesi aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$\kappa^2 = \kappa_x^2 + \kappa_y^2 + \kappa_z^2 = \kappa_{ijk}^2 = \pi^2 \left[\left(\frac{i}{L_x} \right)^2 + \left(\frac{j}{L_y} \right)^2 + \left(\frac{k}{L_z} \right)^2 \right] \quad (2.15)$$

Bu ifadeye $i, j, k = 1, 2, 3, \dots$ kuantum hal değişkenleri olarak adlandırılır. Denklem (2.9)'dan yararlanarak enerji özdeğerleri aşağıdaki şekilde ifade edilir:

$$\varepsilon_r = \varepsilon_{ijk} = \frac{h^2}{8m} \left[\left(\frac{i}{L_x} \right)^2 + \left(\frac{j}{L_y} \right)^2 + \left(\frac{k}{L_z} \right)^2 \right] \quad (2.16)$$

Bu ifadeye h , Planck sabitidir. Denklem (2.16) parçacığın enerji özdeğerlerinin sürekli değil i, j ve k sayıları ile verilen kesikli değerleri aldığını gösterir.

Denklem (2.16)'dan hareket ederek, denklem (2.4)'de görülen $\varepsilon_r/k_b T$ ifadesi aşağıdaki şekilde verilebilir:

$$\frac{\varepsilon_r}{k_b T} = \frac{\varepsilon_{ijk}}{k_b T} = \frac{h^2}{8mk_b T} \left[\left(\frac{i}{L_x} \right)^2 + \left(\frac{j}{L_y} \right)^2 + \left(\frac{k}{L_z} \right)^2 \right] = (\alpha_x i)^2 + (\alpha_y j)^2 + (\alpha_z k)^2 \quad (2.17)$$

Bu ifadeye,

$$\alpha_x = L_c(T)/L_x \quad (2.18)$$

$$\alpha_y = L_c(T)/L_y \quad (2.19)$$

$$\alpha_z = L_c(T)/L_z \quad (2.20)$$

boyutsuz ters ölçek katsayıları olup, L_c ise parçacıkların en olası de Broglie dalga boyunun yarısı olup parçacıkların termal dalga boyu

$$\lambda_T = h/\sqrt{2\pi mk_b T} \quad (2.21)$$

cinsinden aşağıdaki gibi ifade edilir,

$$L_c(T) = \sqrt{\pi} \lambda_T / 2. \quad (2.22)$$

(2.17) ifadesini denklem (2.4)'de yerine koyarsak aşağıdaki ifadeye ulaşılır,

$$\zeta = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{i=1}^{\infty} \exp\left[-\left\{(\alpha_x i)^2 + (\alpha_y j)^2 + (\alpha_z k)^2\right\}\right] \quad (2.23)$$

veya

$$\zeta = \left[\sum_{k=1}^{\infty} \exp\left[-(\alpha_z k)^2\right] \right] \left[\sum_{j=1}^{\infty} \exp\left[-(\alpha_y j)^2\right] \right] \left[\sum_{i=1}^{\infty} \exp\left[-(\alpha_x i)^2\right] \right]. \quad (2.24)$$

Böylece (2.24) ile bölüşüm fonksiyonu hesaplandığında, μ kimyasal potansiyeli denklem (2.1)'den elde edilerek serbest enerji, F , denklem (2.6)'dan hesaplanır. Serbest enerjiden hareketle de, sistemin diğer bütün termodinamik büyüklükleri elde edilebilir.

(2.24) ifadesindeki toplamların hesaplanabilmesi için α_x , α_y ve α_z ile verilen boyutsuz ters ölçek katsayıları ile ilgili bir analiz yapılmalıdır. Örnek olarak, boyutları $L_x=L_y=L_z=L=1$ cm olan dikdörtgen bir kutuda tutuklanmış ve sıcaklığı $T=300$ K olan ${}_2\text{He}^4$ gazı için $\alpha_x = \alpha_y = \alpha_z = L_c(T)/L = 4.5 \times 10^{-9} \ll 1$ olacaktır. Ters ölçek katsayılarının çok küçük olmasından dolayı, denklem (2.24)'de verilmiş olan toplam içersindeki ifadenin toplam indisi ile çok yavaş değişmesini göz önüne alarak enerji özdeğerlerini sürekli varsaymak ve sonsuz seri toplamlar yerine integral ifadeler yazmak mümkün olacaktır. Ancak, kutunun boyutlarından sadece biri bile mikron ya da mikron altı mertebelerde olduğu zaman, süreklilik yaklaşımının sonuçlarından belirgin sapmalar meydana gelir. Bu nedenle nanoskopik koşullarda, sonsuz toplamların daha hassas hesaplanması zorunludur. Sonsuz toplamı daha doğru hesaplamak için bir yol, Poisson toplama formülünü kullanmaktır [54].

Simetrik bir $f(i)$ fonksiyonu için, Poisson toplama formülü aşağıdaki gibi yeniden düzenlenerek verilebilir.

$$\sum_{i=1}^{\infty} f(i) = \int_0^{\infty} f(i) di - \frac{f(0)}{2} + 2 \sum_{s=1}^{\infty} \int_0^{\infty} f(i) \cos(2\pi s i) di. \quad (2.25)$$

Burada, eşitliğin sağ tarafındaki ilk terim, süreklilik yaklaşımına dayanan integral terimidir. Makro sistemler için ihmal edilebilecek ikinci terim ise, sıfır düzeltme terimidir. Katkısı sıfır düzeltme teriminden çok daha az olduğu için hemen her zaman ihmal edilebilecek olan üçüncü terim ise, kesiklilik düzeltmesi terimidir.

Denklem (2.24) ile verilen bölüşüm fonksiyonunun çarpanları benzer ifadeler olduğundan, denklem (2.25) ile verilen Poisson toplama formülünü sadece bir çarpan için kullanarak bölüşüm fonksiyonunu belirlemek mümkün olacaktır. Benzer çarpanlardan biri için aşağıdaki sonuç elde edilir:

$$\sum_{i=1}^{\infty} \exp[-(\alpha_x i)^2] = \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha_x} - \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha_x} \sum_{s=1}^{\infty} \exp\left[-\left(\frac{\pi s}{\alpha_x}\right)^2\right]. \quad (2.26)$$

Gazların termodinamik özelliklerinde kuantum ölçek etkilerinin araştırılması söz konusu olduğunda, en güçlü aday helyum gazı olmaktadır. Çünkü helyumun de Broglie dalga boyu, aynı sıcaklıktaki diğer gazlarla kıyaslandığında büyük olup hem kendi aralarındaki etkileşmeler hem de duvarlarla etkileşmeleri açısından en zayıf etkileşmeye sahiptir [55,56]. Böylelikle etkileşmelerin kuantum ölçek etkilerini perdeleme olasılığı en aza inerken, büyük dalga boyu nedeniyle de, gazlar içerisinde olası en kuvvetli ölçek etkisini helyum göstermektedir. İdeal tek atomlu gaz için iyi bir aday olan helyum atomlarının farklı sıcaklıklardaki $L_c(T)$ değerleri Tablo-2.1’de verilmiştir.

Tablo 2.1: ${}^4_2\text{He}$ ve ${}^3_2\text{He}$ atomu için farklı sıcaklıklarda L_c değerleri.

T (K)	${}^4_2\text{He}$ için L_c (nm)	${}^3_2\text{He}$ için L_c (nm)
3	0.45	0.52
30	0.14	0.16
300	0.045	0.052

Hidrojen atomunun Bohr yarıçapının yaklaşık olarak 0.05 nm olduğu düşünülürse; nanoteknoloji ile üretilebilecek bir yapı için hemen her durumda $\alpha_x = L_c(T)/L_x \ll 1$ olduğu varsayılabilir. Denklem (2.26)’da verilen ifadede $\alpha_x=0.5$ olarak alınsa dahi, hacimsel terim olan ilk terimin değeri 1.77, sıfır düzeltme terimi olan ikinci terimin değeri 0.5 ve kesiklilik düzeltme terimi olan üçüncü terimin değeri ise 1.27×10^{-17}

olmaktadır. Bu durumda kesiklilik düzeltmesi teriminin katkısı, ikinci terimin yanında kolayca ihmal edilebilir.

Buna göre denklem (2.26) ile verilen ifade, aşağıdaki biçimde yeniden yazılabilir:

$$\sum_{i=1}^{\infty} \exp[-(\alpha_i)^2] \approx \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha} - \frac{1}{2}. \quad (2.27)$$

Denklem (2.27)'den hareketle, denklem (2.24) ile verilen bölüşüm fonksiyonu, $\{\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z\} \ll 1$ olduğu hatırlanarak ve α 'ların yüksek dereceden terimleri ihmal edilerek aşağıdaki biçimde elde edilir:

$$\zeta = \frac{\pi^{3/2}}{8\alpha_x\alpha_y\alpha_z} \left[1 - \frac{\alpha_x + \alpha_y + \alpha_z}{\sqrt{\pi}} \right]. \quad (2.28)$$

Denklem (2.18), (2.19) ve (2.20)'den yararlanarak (2.28) ifadesi aşağıdaki gibi yeniden yazılabilir:

$$\zeta = \frac{\pi^{3/2}V}{8L_c^3(T)} \left[1 - \frac{L_c(T)}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{L_x} + \frac{1}{L_y} + \frac{1}{L_z} \right) \right]. \quad (2.29)$$

Bu ifadede V , domenin hacmidir. Bu ifade denklem (2.6)'da kullanılırsa, sistemin serbest enerjisi aşağıdaki biçimde elde edilmiş olur:

$$F = -Nk_b T \left[\ln \left(\frac{\pi^{3/2}V}{8NL_c^3(T)} \right) + \ln \left(1 - \frac{L_c(T)}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{L_x} + \frac{1}{L_y} + \frac{1}{L_z} \right) \right) + 1 \right]. \quad (2.30)$$

Denklem (2.30)'da, köşeli parantez içindeki ikinci terimi $x \ll 1$ için $\ln(1-x) \approx -x$ yaklaşımı yapılarak serbest enerji ifadesi aşağıdaki biçimde yeniden yazılabilir:

$$F = -Nk_b T \left[\ln \left(\frac{\pi^{3/2}V}{8NL_c^3(T)} \right) + 1 \right] + Nk_b T \frac{L_c(T)}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{L_x} + \frac{1}{L_y} + \frac{1}{L_z} \right). \quad (2.31)$$

Bu ifade, daha özlü bir formda aşağıdaki gibi de yazılabilir:

$$F = f_V(n_{cl}, T)V + f_A(n_{cl}, T)A \quad (2.32)$$

burada $n_{cl} = N/V$, klasik gaz yoğunluğu olup, f_V ve f_A ise

$$f_V(n_{cl}, T) = -n_{cl} k_b T \left[\ln \left(\frac{n_q}{n_{cl}} \right) + 1 \right] \quad (2.33)$$

$$f_A(n_{cl}, T) = n_{cl} k_b T \frac{\lambda_T}{4} \quad (2.34)$$

şeklinde tanımlanır. Denklem (2.33)'de $n_q = 1/\lambda_T^3$ olup kuantum yoğunluk olarak da adlandırılır. Verilen bir sıcaklık ve yoğunluk için, (2.32) ifadesindeki ilk terim hacimle orantılı klasik (bulk) serbest enerjiyi, ikinci terim ise kuantum ölçek etkilerinin neden olduğu yüzeye orantılı serbest yüzey enerjisini temsil eder. İkinci terim; parçacıkların de Broglie dalga boyuna ve domenin yüzey alanına bağlı olması nedeniyle kuantum yüzey enerjisi olarak da adlandırılır [45]. Ayrıca, f_V klasik serbest enerji yoğunluğu, f_A ise kuantum yüzey enerjisi yoğunluğu ya da kuantum yüzey gerilimi olarak adlandırılabilir. Buna göre klasik yüzey enerjisi F_V ve kuantum yüzey enerjisi F_A sırasıyla aşağıdaki gibi yazılır:

$$F_V = -n_{cl} k_b T \left[\ln \left(\frac{n_q}{n_{cl}} \right) + 1 \right] V \quad (2.35)$$

$$F_A = n_{cl} k_b T \frac{\lambda_T}{4} A. \quad (2.36)$$

Sistemin klasik serbest enerjisine kıyasla kuantum yüzey enerjisinin önemini belirleyen (2.36)'nın (2.35)'e oranı $\lambda_T A/V$ ile orantılı olup makro sistemlerde A/V oranının çok küçük olması sebebiyle kuantum yüzey enerjisi ihmal edilebilirken mikro/nano ölçekli sistemlerde önemli hale gelmektedir.

Kuantum yüzey enerjisinin neden olduğu yüzey geriliminin büyüklüğü hakkında bir fikir vermesi açısından sıvı ${}^2\text{He}^4$ 'ün klasik yüzey gerilimi ile kuantum yüzey gerilimini kıyaslamak yararlı olacaktır. 300 K sıcaklık ve 10^5 Pa basınç koşullarında ${}^2\text{He}^4$ gazı, $L_c(T)=0.045$ nm, için kuantum yüzey gerilimi $f_A(n_{cl}, T)=1.3 \times 10^{-6}$ Nm⁻¹ değerinde iken sıvı ${}^2\text{He}^4$ için klasik yüzey gerilimi 3.7×10^{-4} Nm⁻¹ değerine sahiptir [45]. Klasik yüzey gerilimi için verilen değer bir sıvı için verilmiş olduğu göz önüne alınırsa, helyum gazı için verilen kuantum yüzey geriliminin mertebesi daha iyi anlaşılacaktır.

Kuantum ölçek etkisi göz önüne alındığında, nano ölçekli sistemlerde termodinamik özelliklerin, makro ölçekteki özelliklerden oldukça farklı olduğu anlaşılmaktadır. Denklem (2.31) kullanılarak, dikdörtgen bir domende tutuklanmış ideal Maxwellian gaz için bazı termodinamik özelliklerin ifadesi, Tablo 2.2’de verilmiştir.

Tablo 2.2: Dikdörtgen bir domende tutuklanmış ideal Maxwell gazının bazı termodinamik özellikleri.

Klasik terim	Kuantum ölçek etkisi ile gelen düzeltme
$F = -Nk_b T \left[\ln \left(\frac{\pi^{3/2} V}{8NL_c^3(T)} \right) + 1 \right]$	$+ Nk_b T \frac{L_c(T)}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{L_x} + \frac{1}{L_y} + \frac{1}{L_z} \right)$
$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right) = Nk_b \left[\frac{5}{2} + \ln \left(\frac{\pi^{3/2}}{8n_{cl} L_c^3(T)} \right) \right]$	$- \frac{Nk_b}{2} \frac{L_c(T)}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{L_x} + \frac{1}{L_y} + \frac{1}{L_z} \right)$
$E = F + TS = \frac{3}{2} Nk_b T$	$+ \frac{Nk_b T}{2} \frac{L_c(T)}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{L_x} + \frac{1}{L_y} + \frac{1}{L_z} \right)$
$\mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N} \right) = -k_b T \ln \left(\frac{\pi^{3/2}}{8n_{cl} L_c^3} \right)$	$+ k_b T \frac{L_c(T)}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{L_x} + \frac{1}{L_y} + \frac{1}{L_z} \right)$
$P_{xx} = - \frac{1}{L_y L_z} \left(\frac{\partial F}{\partial L_x} \right) = n_{cl} k_b T$	$+ n_{cl} k_b T \frac{L_c}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{L_x}$

Dikdörtgen, silindirik ve küresel domenlerde tutuklanmış ideal Maxwellian gazın global termodinamik özellikleri üzerinde kuantum yüzey enerjisinin etkileri literatürde incelenmiştir [43,45,46]. Kuantum yüzey enerjisinin bir sonucu olarak, sistemin termodinamik özellikleri, domenin ölçek ve şekline de bağlı hale gelmektedir. Aşağıda kuantum yüzey enerjisinin bazı doğal sonuçları verilmektedir.

Boyutları birbirinden farklı ve L_x , L_y ve L_z olan dikdörtgen bir kutudaki ideal Maxwellian gazının basınç ifadesi kuantum yüzey enerjisi etkisiyle aşağıdaki gibi olur:

$$P_{xx} = n_{cl} k_b T + n_{cl} k_b T \frac{L_c(T)}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{L_x} = P_{cl} + P_{xx}^q \quad (2.37)$$

$$P_{yy} = n_{cl}k_bT + n_{cl}k_bT \frac{L_c(T)}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{L_y} = P_{cl} + P_{yy}^q \quad (2.38)$$

$$P_{zz} = n_{cl}k_bT + n_{cl}k_bT \frac{L_c(T)}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{L_z} = P_{cl} + P_{zz}^q. \quad (2.39)$$

Burada $P_{cl}=n_{cl}k_bT$ olup klasik basıncı temsil ederken, P_{xx}^q , P_{yy}^q ve P_{zz}^q , ise sırasıyla x -, y - ve z -doğrultularında kuantum yüzey enerjisi nedeniyle oluşan basınç anizotropilerini temsil eder. Böylece makro ölçekteki durumun tersine, ölçek etkilerinin önemli olduğu nano boyutlarda basıncın skaler bir büyüklük olmaktan çıkarak tensörel bir büyüklüğe dönüştüğü ve domen geometrisindeki anizotropinin basınçta anizotropiye, $P_{xx}^l \neq P_{yy}^l \neq P_{zz}^l$, neden olduğu ve basınçtaki bu anizotropinin de domenin ilgili doğrultularındaki boyutlarıyla ters orantılı olduğu anlaşılmaktadır. Basınç anizotropisinin büyüklüğü hakkında bir fikir verebilmek için boyutları $L_x = 100$ nm, $L_y \gg L_x$ ve $L_z \gg L_x$ olan bir kutuda, $P_{cl}=10^5$ Pa ve $T=300$ K şartlarında tutuklanmış ${}^4\text{He}$ gazı ele alınırsa x -doğrultusunda oluşan basınç anizotropisi $\Delta P_{xx} = P_{xx} - P_{yy} = P_{xx} - P_{zz} = P_{xx} - P_{cl} \approx 23$ Pa olarak bulunur.

Kuantum ölçek etkisinin bir başka sonucu ise, ölçek bağımlı difüzyondur. Hacmi V , sıcaklığı T olan ideal Maxwellian gazla dolu dikdörtgen bir kutu, farklı hacimler oluşturacak biçimde geçirgen bir duvarla x -doğrultusunda, I ve II bölgelerine ayrılmış olsun. Termodinamik denge koşullarında, her iki bölgede bulunan gazın sıcaklıkları ve kimyasal potansiyelleri eşittir. Buna göre, her iki bölgedeki kimyasal potansiyel ifadesi sırasıyla aşağıdaki gibi olacaktır:

$$\mu_I = -k_bT \ln\left(\frac{\pi^{3/2}}{8n_{cl}^I L_c^3(T)}\right) + k_bT \frac{L_c(T)}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{L_x^I} + \frac{1}{L_y} + \frac{1}{L_z}\right) \quad (2.40)$$

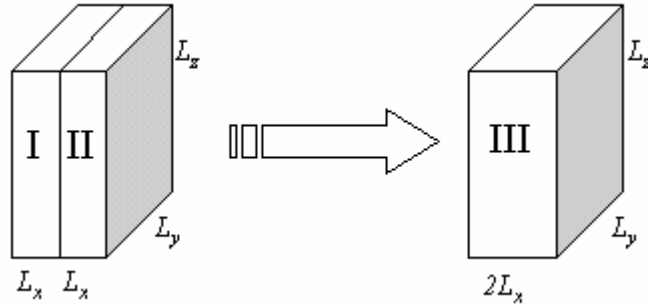
$$\mu_{II} = -k_bT \ln\left(\frac{\pi^{3/2}}{8n_{cl}^{II} L_c^3(T)}\right) + k_bT \frac{L_c(T)}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{L_x^{II}} + \frac{1}{L_y} + \frac{1}{L_z}\right). \quad (2.41)$$

Kimyasal potansiyellerin eşitliği yazılırsa, her iki bölgede bulunan gazın termodinamik denge durumunda yoğunluk oranı için aşağıdaki ifade elde edilir:

$$\frac{n_{cl}^{II}}{n_{cl}^I} \approx 1 + \frac{L_c(T)}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{L_x^I} - \frac{1}{L_x^{II}} \right). \quad (2.42)$$

Buna göre nano ölçekte, sistem termodinamik dengede olduğu halde, II bölgesindeki gaz yoğunluğunun, I bölgesindeki gaz yoğunluğundan daha büyük olduğu anlaşılmaktadır. Böyle bir durumda, eğer I bölgesine dışarıdan parçacık ekleyerek n_{cl}^I yoğunluğunu n_{cl}^{II} yoğunluğuna eşit olmaya zorlarsak, geçirgen duvardan sürekli bir difüzyon meydana gelecektir. (2.42) ifadesi ile verilen yoğunluk oranları parçacığın kütlesinin karekökü ile ters orantılı olan $L_c(T)$ değerine bağlı olduğundan, farklı parçacık kütleleri için farklı olacaktır. Böylece ölçek bağımlı difüzyon yardımıyla, izotop zenginleştirmesinin mümkün olabileceği öngörülebilir.

Kuantum ölçek etkisinin bir diğer doğal sonucu da, toplanabilirlik prensibinin kaybıdır. Boyutları Şekil 2.1’de verilmiş olan ve ideal Maxwellian gazla dolu I, II ve III kutularının geometrik hacimleri $V_I = V_{II} = V_{III}/2 = V$, kutulardaki parçacık sayıları $N_I = N_{II} = N_{III}/2 = N$, gazların yoğunlukları $n_{cl}^I = n_{cl}^{II} = n_{cl}^{III} = n_{cl}$ ve sıcaklıkları $T_I = T_{II} = T_{III} = T$ olsun.



Şekil 2.1 : Ölçek etkileri altında toplanabilirlik özelliğinin sorgulanması.

Klasik termodinamikte toplanabilirlik prensibi gereği, örneğin enerji, $E_{cl}^I + E_{cl}^{II} = E_{cl}^{III}$ ve entropi, $S_{cl}^I + S_{cl}^{II} = S_{cl}^{III}$ olurken, ölçek etkileri göz önüne alındığında, madde miktarına bağımlı termodinamik büyüklüklerde toplanabilirlik özelliğinin bozulduğu aşağıdaki ifadelerden görülmektedir.

$$E_q^I + E_q^{II} = 2 \left[\frac{Nk_b T}{2} \left(\frac{L_c(T)}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{L_x} \right) \right] > E_q^{III} = \frac{Nk_b T}{2} \left(\frac{L_c(T)}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{L_x} \right) \quad (2.43)$$

$$S_q^I + S_q^{II} = 2 \left[-\frac{Nk_b}{2} \left(\frac{L_c(T)}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{L_x} \right) \right] < S_q^{III} = -\frac{Nk_b}{2} \left(\frac{L_c(T)}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{L_x} \right) \quad (2.44)$$

Burada verilen örneklerden hareketle, nano boyutta gazların termodinamik hal fonksiyonlarının sadece sıcaklık ve yoğunluk gibi iki kontrol parametresine değil aynı zamanda ölçek ve geometriye de bağlı olduğu ve böylece ölçek ve geometrinin hal fonksiyonları üzerinde iki yeni kontrol parametresi olarak karşımıza çıktığı anlaşılmaktadır.

2.2. Parçacıklararası Etkileşme Potansiyelleri

Moleküller arası etkileşmenin, uzak mesafelerden çekici yakın mesafelerden ise itici olduğu bilinen bir konudur. İki küresel, kutupsal olmayan (non-polar) molekül arasındaki etkileşme kuvveti, \mathfrak{F} , aralarındaki mesafenin bir fonksiyonudur. Bir çok durumda etkileşme kuvveti yerine etkileşme potansiyeli, U , kullanılır. Bu iki büyüklük arasında aşağıdaki gibi basit bir ilişki vardır [57,58]:

$$\mathfrak{F}(r) = -\frac{dU(r)}{dr} \quad (2.45)$$

$$U(r) = -\int_r^{\infty} \mathfrak{F}(r) dr . \quad (2.46)$$

Kutupsal olmayan moleküller için yaygın olarak kullanılan parçacıklararası potansiyel fonksiyonu Lennard-Jones (12-6) potansiyelidir,

$$U(r) = 4\varepsilon_{LJ} \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right]. \quad (2.47)$$

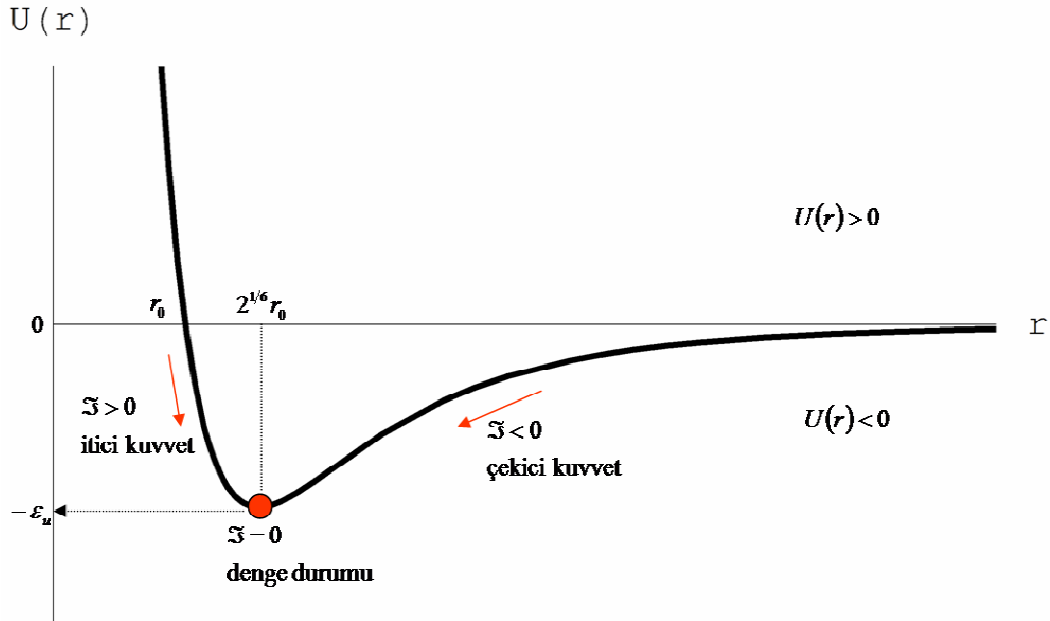
Burada r_0 ve ε_{LJ} parametreleri, sırasıyla uzunluk ve enerji boyutunda olup, etkileşen moleküllere ait karakteristik sabitlerdir. Böylece iki molekül arasındaki etkileşme kuvveti (2.45) yardımıyla,

$$\mathfrak{F}(r) = -24\varepsilon_{LJ} \left[2 \frac{r_0^{12}}{r^{13}} - \frac{r_0^6}{r^7} \right] \quad (2.48)$$

olarak yazılabilir. Denklem (2.48)'den anlaşılacağı gibi büyük mesafelerde ($r \gg r_0$) çekici bileşen olan parantez içindeki ikinci terim baskın olup birbirlerini mesafenin tersinin yedinci kuvvetiyle çekerler. Bu tür bir kuvvet iki kutupsal olmayan molekül arasındaki indüklenmiş dipol-dipol (van der Waals) etkileşmesini tam olarak açıklar. Daha küçük mesafelerde ($r \ll r_0$) ise itici bileşen olan parantez içindeki ilk terim baskın olur ve moleküller birbirlerini mesafenin tersinin onüçüncü kuvveti ile iterler. Bu itme moleküllerin elektron bulutlarının bir araya girmeye zorlanmasına karşılık Pauli dışarlama ilkesi gereğince ortaya çıkan bir kuvvettir.

Bu tür kuvvetler bir çok molekül arasındaki itmeyi iyi bir yaklaşımla açıklar. r_0 , potansiyelin sıfır olduğu parçacıklararası mesafeyi temsil ederken ϵ_{LJ} parametresi ise potansiyel enerjinin minimum değerini temsil eder. Parçacıklararası mesafe $r=2^{1/6}r_0$ olduğunda potansiyel enerji minimum değerine ulaşır ve bu noktada parçacıklar üzerine etki eden net kuvvet de sıfır değerini alır.

Bu etkileşme potansiyeli Şekil 2.2'de temsili olarak gösterilmektedir.



Şekil 2.2: Lennard-Jones (12-6) potansiyeli.

Pratik olarak parçacıklararası kuvvetler, kısa-erimli ve uzun-erimli kuvvetler olarak iki sınıfta düşünülebilir. Kısa-erimli kuvvetler daha ziyade, değerlik kuvvetleri yada kimyasal kuvvetler olarak adlandırılıp, domendeki parçacıklar birbirlerine elektron bulutları çakışacak kadar yakınlaştığında ortaya çıkar. Doğası gereği bu kuvvetler itici ve çoğunlukla asimetriktir. Bu kuvvetler hakkında deneysel olarak bilgi elde edilebilirse de daha ziyade özel moleküler etkileşmeler için, özel kuantum mekanik

hesaplamalar yapılarak elde edilir. Ancak bu hesaplamalar yüksek doğrulukta yapılmalıdır. Öbür taraftan, uzun-erimli kuvvetler ise nispeten daha kesin biçimde hesaplanabilir. Farklı mekanizmalardan gelen katkılarla oluşan uzun-erimli kuvvetler parçacıklararası mesafenin üstel kuvvetleri ile ters orantılıdır. Bu katkıları üç sınıfta incelemek mümkündür: elektrostatik katkılar, indüksiyon katkıları ve dispersiyon katkıları. Bu tez çalışmasına konu olan helyum gibi kutupsal olmayan (non-polar) parçacıklar arasındaki çekici uzun erimli kuvvetler dispersiyon katkıları ile oluşur. Dispersiyon katkıları; parçacıklarda (atom ya da molekül) kararsız yük dağılımı nedeniyle ortaya çıkan ani dipoller (ya da daha yüksek multipoller) arasındaki çekici etkileşimlerdir. Bir atom ya da molekülün elektronları herhangi bir anda ani bir dipol momenti oluşturacak şekilde herhangi bir konfigürasyonda olabilirler. Bu ani dipol momenti bir başka atom ya da molekülde dipol oluşumunu indükler. Bu indüklenmiş dipol de diğer atomdaki ani dipolle bir çekim enerjisi üretmek üzere etkileşir.

Aşağıda, literatürde kullanılan bir kaç tip parçacıklararası potansiyel fonksiyonu, özet olarak verilmektedir [57].

Katı-küre potansiyeli (hard-sphere); parçacıklararası etkileşimlerde göz önüne alınan en basit etkileşme potansiyelidir,

$$U(r) = \begin{cases} \infty, & r \leq r_0 \\ 0, & r > r_0 \end{cases} . \quad (2.49)$$

Bu ifadede r_0 , katı kürenin çapıdır.

Kare-kuyu (square-well) potansiyeli; sıvıları da temsil edebilen en basit etkileşme potansiyelidir,

$$U(r) = \begin{cases} \infty, & r \leq r_0 \\ -\varepsilon_u, & r_0 < r < r_0' \\ 0, & r > r_0' \end{cases} . \quad (2.50)$$

Burada r_0' , çekici etkileşme mesafesi olup katı küre çapının bir kaç katıdır. ε_u , çekici etkileşme potansiyelidir. Kare-kuyu potansiyeli, moleküler etkileşmenin matematik olarak idealize edilmiş bir modelidir.

Yukawa potansiyeli ile kare-kuyu potansiyelinin çekici kısmı değiştirilerek daha gerçekçi hale getirilmiştir. Bu tür bir kaç çeşit potansiyel arasında en önemlisi Yukawa potansiyelidir,

$$U(r) = \begin{cases} \infty, & r \leq r_0 \\ -\frac{\varepsilon_u r_0}{r} \exp\left[-z\left(\frac{r}{r_0} - 1\right)\right], & r > r_0 \end{cases} \quad (2.51)$$

Burada z ayarlanabilir bir parametredir. Bu potansiyelin, parçacıklararası mesafe ile ters orantılı ($1/r$) terimi, iyonik sistemlere de uygulanabileceğini göstermektedir.

Lennard-Jones potansiyeli: Gerçekte parçacıklararası potansiyel teklik içermeyen sürekli bir forma sahiptir. Bu potansiyel aşağıdaki formda bir bağıntı ile ifade edilebilir:

$$U(r) = \varepsilon_{LJ} \left[\left(\frac{m}{n-m} \right) x^{-n} - \left(\frac{n}{n-m} \right) x^{-m} \right]. \quad (2.52)$$

Burada n ve m sabit ve $x=r/r_0$ 'dir. Lennard-Jones potansiyelinin en yaygın formu LJ (12-6) potansiyeli olup aşağıdaki formdadır:

$$U(r) = 4\varepsilon_{LJ} \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right]. \quad (2.53)$$

Kihara potansiyeli; Lennard-Jones potansiyeline alternatif ve biraz daha karmaşık bir potansiyel ifadesidir,

$$U(r) = \begin{cases} \infty, & r \leq d \\ 4\varepsilon_u \left[\left(\frac{r_0 - d}{r - d} \right)^{12} - \left(\frac{r_0 - d}{r - d} \right)^6 \right], & r > d \end{cases} \quad (2.54)$$

Burada d katı kürenin yarıçapı olup, bu mesafede potansiyel $U(d)=\infty$ değerindedir. Kihara potansiyeli, küresel olmayan moleküller için de kullanılır. Kihara potansiyeli kullanıldığında, viriyel katsayılar Lennard-Jones potansiyeline göre daha doğru olarak kestirilebilmektedir.

Bütün bu potansiyel ifadelerinin en büyük teorik zayıflığı, mesafe ile eksponansiyel değişmesi gereken parçacıklararası itmeyi tam doğru biçimde ifade edemiyor olmalarıdır.

Değiştirilmiş Buckingham (exp-6) potansiyeli: Bu potansiyel fonksiyonu Born-Mayer potansiyeli temel alınarak elde edilmektedir. Pratik uygulamalar için aşağıda verilen formda kullanılmaktadır:

$$U(r) = \begin{cases} \infty, & r \leq r_0 \\ \frac{\epsilon_u}{1 - \frac{6}{a}} \left[\frac{6}{a} \exp \left[a \left(1 - \frac{r}{r_0} \right) \right] - \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right], & r > r_0 \end{cases} \quad (2.55)$$

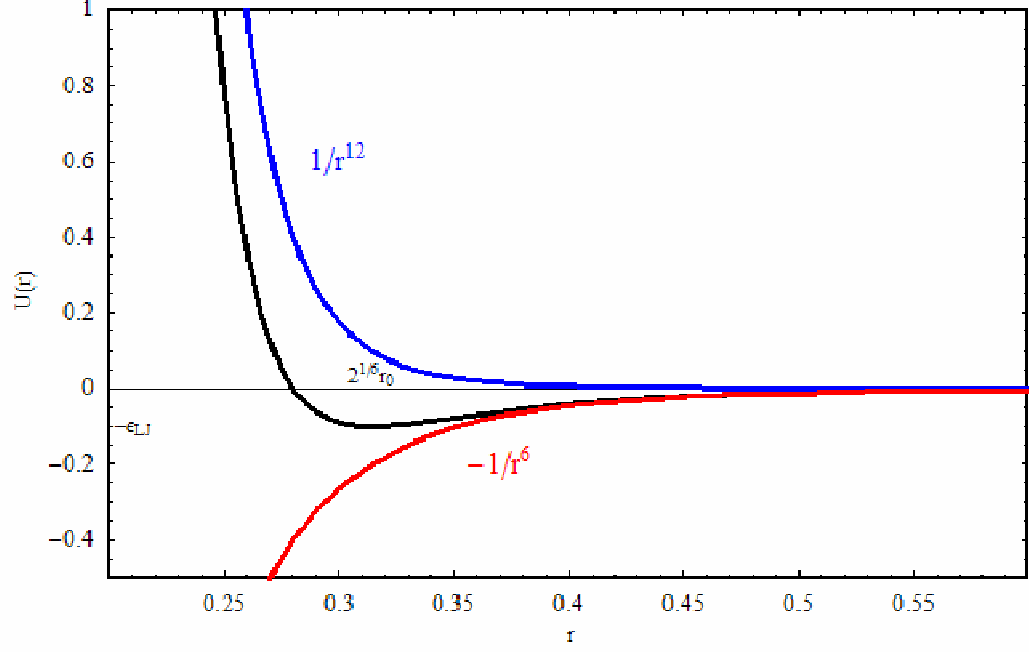
Bu ifadede a , eksponansiyel itmenin dikliğini belirtir.

Morse potansiyeli; diatomik moleküller için en uygun potansiyel fonksiyonudur. Morse potansiyel fonksiyonu aşağıdaki gibi tanımlıdır:

$$U(r) = D_e \left(1 - e^{-a(r-r_0)} \right)^2. \quad (2.56)$$

Burada r atomlar arasındaki mesafe, r_0 kimyasal bağ yapma mesafesi, D_e potansiyel kuyusunun derinliği ve $a = \sqrt{k_e/2D_e}$ ise potansiyel genişliği kontrol parametresi olup k_e kuyunun minimumundaki kuvvet sabitidir.

Küresel simetrik parçacıklar için parçacık-duvar etkileşmelerini temsilen kullanılan potansiyel fonksiyonu, denklem (2.53) ile verilen Lennard-Jones potansiyelidir. Bu potansiyel fonksiyonu ile çekici ve itici bileşenleri Şekil 2.3'de verilmektedir. Parçacıklararası etkileşmenin olması aslında helyumun kusursuz bir inert gaz olmadığını göstermektedir. Düşük sıcaklıklarda helyumun elektronları çekirdek etrafında salınmaya başlar ve atomu bir dipol gibi davranmaya yönlendirir ve atomun etrafında $1/r^3$ ile orantılı geçici bir elektrostatik potansiyel oluşur. Böylece iki parçacık birbirini $1/r^6$ ile orantılı bir etkileşme potansiyeli ile çekerken, birbirine çok yaklaştığında da $1/r^{12}$ ile orantılı bir etkileşme potansiyeli ile iterler.



Şekil 2.3: Lennard-Jones (12-6) potansiyel fonksiyonunun çekici ve itici bileşenleri.

2.3. Parçacık-Duvar Etkileşmelerinin Doğası

En genel durumda parçacık-duvar etkileşmesi esnasında gaz parçacıkları yüzey üzerine adsorbe olabilir, yüzey civarında gezinebilir ya da yüzey molekülleri ile kimyasal bir reaksiyona girebilirler. Yüzey özellikleri ve yüzeyle etkileşme potansiyeli hakkında tam ve doğru bilgi olmaksızın, parçacık-yüzey etkileşmesini modellemek çok karmaşık bir iştir. Bu tez çalışmasında helyum gazı ele alınması dolayısıyla, bağ yapmayan parçacıklarla yüzey etkileşmeleri incelenmiştir.

Literatürde parçacık-duvar etkileşmelerini iki-cisim etkileşmesi gibi ele almak çok yaygın olup, bu etkileşmeler bölüm 2.2’de özet olarak açıklanan parçacıklararası etkileşme potansiyelleri ile temsil edilirler. Bir etkileşme potansiyeli seçmek için iki önemli kriterden biri, seçilen potansiyel fonksiyonuyla elde edilen teorik sonuçların, deneysel sonuçlarla uyum içinde olması, diğeri ise hesaplama zorluğunun olmamasıdır [57,58]. Kullanılan etkileşme potansiyellerinin bir çok avantaj ve dezavantajları bulunmasına karşın, bütün potansiyel fonksiyonlarının asıl dezavantajı, itici terimin doğru olarak temsil edilemiyor ve parçacıkların enerji özdeğerleri için analitik bir ifadenin verilemiyor olmasıdır. Parçacık-yüzey etkileşme potansiyel fonksiyonlarının detaylı olarak incelendiği birçok çalışma mevcuttur [58,69].

Çekici ve itici kuvvetlerin her ikisi birden göz önüne alınca, bağ yapmayan atom-yüzey (örneğin soygaz-katı yüzey) etkileşmeleri için yaygın olarak kullanılan parçacıklararası potansiyel, denklem (2.53) ile verilen Lennard-Jones (12-6) potansiyelidir. Hesaplama yükünü azaltıyor olması da, bu fonksiyonu diğer tip etkileşme potansiyel fonksiyonlarına göre tercih edilir kılmaktadır. Bağ-yapmayan atom-yüzey etkileşmeleri için literatürde bir çok çalışmada, LJ(6-12) potansiyel fonksiyonu ya da farklı versiyonları kullanılmıştır [59-64].

Bir çok klasik ölçek etkisi, gerek deneysel yollar ile, gerekse Doğrudan Simülasyon Monte Carlo (DSMC), Moleküler Dinamik (MD) gibi bir çok nümerik metod kullanılarak da incelenebilir [65-74]. Bu tez çalışmasında ise, verilen bir domende tutuklanmış gaz parçacıklarının özfonksiyonları ve enerji özdeğerleri, parçacıklarla sınırlar arasında L-J potansiyel etkileşmesi alınarak Schrödinger denkleminin sayısal olarak çözümünden elde edilmiş ve gazın yerel yoğunluk dağılımı kuantum ölçek etkileri de göz önüne alınarak hesaplanmıştır.

3. GAZLARIN TERMODİNAMİK ÖZELLİKLERİNDE KUANTUM ÖLÇEK ETKİLERİ

Bu bölümde gazların termodinamik özellikleri üzerinde özellikle nano ölçekte belirgin hale gelen kuantum ölçek etkilerinin modellenmesi ve incelenmesi amaçlanmıştır. Bu çerçevede klasik (Maxwellian) ve kuantum (Fermi ve Bose) gazlarının global termodinamik özellikleri ile yerel yoğunluk dağılımı üzerinde kuantum ölçek etkileri ele alınmıştır. Öncelikle global termodinamik özellikler Weyl konjektürü ele alınarak keyfi şekilli bir domen için analitik olarak türetilmiş ve kuantum gazları için dejenere durumlarda geçerli olan asimptotik analitik bağıntılar elde edilmiştir. Daha sonra hem global özelliklerdeki kuantum ölçek etkilerinin kökenini ortaya koyabilmek ve detaylı bir analizini sunabilmek hem de denge-dışı termodinamik modellerde sıkça kullanılan yerel denge varsayımına dayanan modellere temel teşkil edebilmek amacıyla yerel yoğunluk dağılımı için bir model geliştirilmiştir. Bu model yardımıyla Schrödinger denkleminin analitik çözümünün yapılabildiği bazı düzgün geometriler için yerel yoğunluğa ilişkin analitik ifadeler elde edilirken analitik çözümün mümkün olmadığı geometriler için de sayısal çözümlerle elde edilen yoğunluk dağılımları incelenmiştir. Gazlarda kuantum ölçek etkilerinin gözlenebileceği en uygun aday bölüm 2.1’de anlatılan sebeplerle helyum gazıdır. Asal gaz olması sebebiyle de helyum için ideal gaz varsayımı uygun bir varsayım olarak kullanılmıştır.

3.1. Global Termodinamik Özellikler

Termodinamik denge halindeki bir sistemde, Fermi-Dirac (FD) veya Bose-Einstein (BE) istatistiğine uyan parçacıkların sayısı ve sistemin serbest enerjisi sırasıyla aşağıdaki gibi verilebilir [50]:

$$\left(\begin{array}{c} FD \\ BE \end{array} \right) N = \sum_r \frac{1}{\exp[(\varepsilon_r - \mu)/k_b T] \pm 1}, \quad (3.1)$$

$$\left(\frac{FD}{BE}\right)^F = N\mu \mp k_b T \sum_r \ln[1 \pm \exp[(\mu - \varepsilon_r)/k_b T]]. \quad (3.2)$$

Burada r indisi genelleştirilmiş kuantum hal indisidir. Denklem (3.1)'de ve (3.2)'de verilen bütün enerji özdeğerleri üzerinden toplam ifadesini hesaplamak istatistik mekaniğin temel matematik problemlerinden biridir. Sonlu bir hacimde tutuklanmış ideal gaz parçacıklarının enerji özdeğerleri sadece dikdörtgen bir domen için analitik olarak elde edilebilmekte olup, silindir ve küre gibi düzgün geometrilere dahi analitik ifadeler ancak bazı yaklaşımlar yapılarak elde edilebilir [45]. Daha karmaşık ya da düzensiz geometrilere, enerji özdeğerlerini analitik olarak elde edebilmek ise, henüz mümkün değildir. Öte yandan eğer enerji için hal yoğunluğu biliniyorsa, toplamları kuantum halleri üzerinden yapmak yerine enerji halleri üzerinden yapmak da mümkündür. Böylece enerji özdeğerlerinin analitik olarak elde edilemediği durumlarda hal yoğunluğunun analitik olarak ifadesi analitik bir çözüme ulaşmayı sağlayacaktır.

Sonlu bir domende tutuklanmış parçacığın termal dalga boyu, sistemin ölçülerine göre çok küçük ise, iyi bir yaklaşımla tek-parçacık hal spektrumu sürekli kabul edilebilir. Bu durumda verilen bir özdeğerden küçük hallerin sayısı ve hal yoğunluğu, sınırın şeklinden bağımsız olacak ve örneğin üç boyutta sistemin hacmi ile, iki boyutta ise sistemin alanı ile orantılı olacaktır. Böyle bir varsayımı ilk defa Rayleigh bir çalışmasında kullanmış ancak bu ifade, J. H. Jeans tarafından düzeltilerek Rayleigh-Jeans radyasyon teorisinde kullanılmıştır. Daha sonra bu problem matematikçileri de harekete geçirmiş ve 1911 yılında Weyl tarafından matematik olarak kaba bir biçimde ispatlanmıştır [75]. Weyl'in bu öncü çalışmasından sonra, Kac "Can one hear the shape of a drum?" adlı ters spektral problem çalışmasıyla, \mathbf{R}^2 uzayında, Laplasyen spektrumlarından yararlanarak bir domenin şeklinin belirlenip belirlenemeyeceği sorusuna yanıt aramıştır [76]. Mark Kac'ın bu sorusuna ilişkin çalışmalar halen devam etmektedir [77-83]. Nihayet Ivrii ve Melrose tarafından kesin olarak ispat edilen Weyl varsayımı, ters spektral problemin olumsuz yanıtı olmasına ve bu konudaki çalışmaların devam ediyor olmasına karşın, asimptotik özdeğer spektrumu hesaplamalarında başarıyla kullanılabilir [84-89].

Weyl varsayımına göre, (2.8) ile verilen Helmholtz denkleminin, 3 boyutta, verilen bir κ asimptotik özdeğerinden daha küçük özdeğerlerinin sayısı aşağıdaki ifade ile verilmektedir [50]:

$$\kappa \rightarrow +\infty, \quad \Omega(\kappa) = \frac{V}{6\pi^2} \kappa^3 - \frac{A}{16\pi} \kappa^2 + o(\kappa^2). \quad (3.3)$$

Bu ifade, literatürde 3, 2, ve 1 boyut için ayrı ayrı verilen Weyl varsayımlarından hareketle D boyut için aşağıdaki biçimde genelleştirilebilir:

$$\Omega_D(\kappa) = \frac{V\kappa^3}{6\pi^2} \Theta(D-3) + (-1)^D \frac{A\kappa^2}{4^{D-2}4\pi} \Theta(D-2) + (-1)^{D-1} \frac{C\kappa}{4^{D-1}\pi} \Theta(D-1) + (-1)^{D-2} \frac{N_C}{4^D}. \quad (3.4)$$

Burada V domenin hacmi, A domenin yüzey alanı, C domenin çevre uzunluğu ve N_C ise domendeki köşe, uç veya delik sayısıdır. D domenin boyutu, $\Theta(x)$ ise aşağıda tanımlanan adım fonksiyonudur,

$$\Theta(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0 \\ 1, & x > 0 \end{cases}. \quad (3.5)$$

Bu durumda hal yoğunluğu aşağıdaki biçimde elde edilir:

$$g_D(\kappa) = \frac{d\Omega_D(\kappa)}{d\kappa} = \frac{V\kappa^2}{2\pi^2} \Theta(D-3) + (-1)^D \frac{A\kappa}{4^{D-2}2\pi} \Theta(D-2) + (-1)^{D-1} \frac{C}{4^{D-1}\pi} \Theta(D-1). \quad (3.6)$$

Böylece Denklem (3.1)'de ve (3.2)'de verilen ifadelerde, enerji özdeğerlerine ilişkin kuantum haller üzerinden sonsuz toplamlar bir integral ifadeyle hesaplanabilir olmaktadır. Bu sayede enerji özdeğerlerinin (ya da dalga sayısı özdeğerlerinin) analitik olarak bilinmesi zorunluluğu ortadan kalkar. Buradan hareket ederek, D -boyutlu keyfi şekilli bir domende tutuklanmış bir gazın termodinamik özelliklerinin türetilmesi mümkün olacaktır. 3 boyutlu bir domen için denklem (3.6) ile verilen hal yoğunluğu ifadesinde, sistemin karakteristik boyutu $L = V/A$ parçacıkların termal de Broglie dalga boyuna, λ_T , göre çok büyükse, $L \gg \lambda_T$, sadece ilk terimi almak yeterli olacaktır. Bunun tersi durumda ise ikinci terimin katkısı belirgin hale gelecektir. 3 boyutlu bir sistemde üçüncü terimin katkısı (3.6) bağıntısının hatası mertebesinde olduğundan her zaman ihmal edilebilir [50]. Daha düşük boyutlu sistemlerde de benzer bir mantık izlenir. Nano boyutlarda, D -boyutlu bir sistemin

global termodinamik özellikleri üzerindeki kuantum ölçek etkileri (3.6) ifadesinin D -boyut için elde edilecek formunda daima ikinci terim vasıtasıyla hesaplanabilmektedir.

Denklem (3.6) kullanıldığında hal spektrumu sürekli kabul edildiğinden, enerji özdeğerlerinin ayrık doğası ihmal edilerek denklem (3.1) ve (3.2)'de verilen toplam ifadeleri yerine integraller kullanılabilir olmaktadır. Buna göre denklem (3.1) aşağıdaki gibi yeniden yazılabilir:

$$\left(\frac{FD}{BE}\right)N = \int_0^{\infty} \frac{g_D(\kappa)d\kappa}{\exp[(\varepsilon - \mu)/k_b T] \pm 1}. \quad (3.7)$$

Denklem (3.6)'dan yararlanarak denklem (3.7) hesaplandığında, 3-boyutlu, keyfi şekilli bir domende tutuklanmış gaz için, parçacık sayısı ve serbest enerji ifadesi sırasıyla aşağıdaki şekilde elde edilir (Ek-A):

$$\left(\frac{FD}{BE}\right)N = \mp V n_q Li_{3/2}(\mp e^\Lambda) \left[1 - \frac{\lambda_T A}{4V} \frac{Li_1(\mp e^\Lambda)}{Li_{3/2}(\mp e^\Lambda)} \right], \quad (3.8)$$

$$\left(\frac{FD}{BE}\right) \frac{F}{Nk_b T} = \Lambda - \frac{Li_{5/2}(\mp e^\Lambda)}{Li_{3/2}(\mp e^\Lambda)} \left\{ 1 - \frac{\lambda_T A}{4V} \left[\frac{Li_2(\mp e^\Lambda)}{Li_{5/2}(\mp e^\Lambda)} - \frac{Li_1(\mp e^\Lambda)}{Li_{3/2}(\mp e^\Lambda)} \right] \right\}. \quad (3.9)$$

Bu ifadelerde $Li_m(z)$ fonksiyonları polilogaritmik fonksiyonlar olup aşağıdaki gibi ifade edilmektedir [90]:

$$Li_m(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n^m}. \quad (3.10)$$

Bu fonksiyonların özellikleri Ek-B'de detaylı olarak verilmektedir.

Bu ifadelerde Planck sabiti sıfıra giderken λ_T değeri de sıfıra gider ve böylece kuantum ölçek etkileri ortadan kalkarak makro ölçekte geçerli olan geleneksel ifadelere ulaşılır. Ayrıca bir makro sistemde $\lambda_T A/V \ll 1$ olduğundan (3.8) ve (3.9) ifadelerinde kuantum ölçek etkilerini temsil eden terimler ihmal edilebilir hale gelerek makro ölçekteki klasik ifadelerle ulaşılır.

3.1.1. Klasik (Maxwellian) Gazlar

Yeterince yüksek sıcaklık veya yeterince düşük parçacık yoğunluğu şartlarında, FD ve BE istatistikleri, klasik mekaniğin öngördüğü Maxwell-Boltzmann (MB) istatistiğine dönüşürler. Bu durum $\Lambda \rightarrow -\infty$ limit durumuna karşılık gelir ve bu limit için polilogaritmik fonksiyonların Ek-B'de verilen asimptotik formları aşağıdaki biçimde ifade edilirler:

$$\left(\begin{array}{c} FD \\ BE \end{array} \right) \lim_{\Lambda \rightarrow -\infty} Li_m(\mp e^\Lambda) = \mp e^\Lambda. \quad (3.11)$$

$\Lambda \rightarrow -\infty$ şartı altında, denklem (3.8) ile verilen parçacık sayısı ifadesi aşağıdaki biçime dönüşür:

$$N = V n_q e^\Lambda \left[1 - \frac{\lambda_T A}{4 V} \right]. \quad (3.12)$$

Buradan Λ , $\lambda_T A/V \ll 1$ olduğu göz önüne alınarak $\ln(1+x) \cong x$ yaklaşımıyla aşağıdaki gibi elde edilir:

$$\Lambda = -\ln\left(\frac{n_q}{n_{cl}}\right) + \frac{\lambda_T A}{4 V}. \quad (3.13)$$

Bu ifadeden de yararlanarak, denklem (3.9) ile verilen serbest enerji ifadesi ise $\Lambda \rightarrow -\infty$ şartı altında aşağıdaki gibi olacaktır:

$$F = -n_{cl} k_b T \left[\ln\left(\frac{n_q}{n_{cl}}\right) + 1 \right] V + n_{cl} k_b T \frac{\lambda_T}{4} A. \quad (3.14)$$

Bu ifade Ref. [43]'de verilen serbest enerji ifadesi ile aynıdır. Denklem (3.14) ile verilen serbest enerji ifadesini aşağıdaki gibi yeniden düzenlenebilir:

$$F = F_V + F_A. \quad (3.15)$$

Bu ifadede F_V , hacimsel serbest enerji olup aşağıdaki gibi verilir:

$$F_V = -n_{cl} k_b T \left[\ln\left(\frac{n_q}{n_{cl}}\right) + 1 \right] V. \quad (3.16)$$

F_A ise, makro ölçekte ihmal edilebilen fakat nano ölçekte belirgin hale gelen serbest yüzey enerjisi olup aşağıdaki biçimde ifade edilir:

$$F_A = n_{cl} k_b T \frac{\lambda_T}{4} A. \quad (3.17)$$

Bu terim, parçacıkların de Broglie dalga boyuna ve dolayısıyla Planck sabitine bağlı bir ifade olduğundan kuantum yüzey enerjisi olarak adlandırılır [45]. Klasik yüzey enerjisi, yüzey molekülleri arasındaki kısa-erimli etkileşmelerden kaynaklanıyor olmasına karşın kuantum yüzey enerjisi, parçacıkların dalga karakteri nedeniyle duvarlarla yerel-olmayan (non-local) etkileşmeler nedeniyle ortaya çıkmaktadır. Kuantum yüzey enerjisi yüzey moleküllerinin özelliklerine değil, domenin şekline ve ölçeğine bağlıdır.

Buna göre nano ölçekte, keyfi şekilli bir domende tutuklanmış ideal Maxwellian gazın diğer termodinamik özellikleri de aşağıdaki gibi elde edilir:

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V,N} = Nk_b \left[\ln\left(\frac{n_q}{n_{cl}}\right) + \frac{5}{2} \right] - Nk_b \frac{\lambda_T}{8} \frac{A}{V} \quad (3.18)$$

$$E = F + TS = \frac{3}{2} Nk_b T \left[1 + \frac{\lambda_T}{12} \frac{A}{V} \right] \quad (3.19)$$

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = \frac{3}{2} Nk_b \left[1 + \frac{\lambda_T}{24} \frac{A}{V} \right]. \quad (3.20)$$

Basınç ve basınca bağlı ifadeler ise sistemin içinde bulunduğu domenin geometrik özelliklerine ve deformasyonun detaylarına bağlı olduğundan keyfi şekilli bir domen için genel bir ifade verilmesi mümkün değildir. Ancak geometri ve hacim deformasyonu belirlendikten sonra ifade edilebilir. Örneğin küresel bir domende izomorfik bir deformasyon sadece radyal doğrultuda ve izotropik olarak gerçekleştirilen bir deformasyon olacağından yalnızca radyal basınçtan söz edilebilir. Bu durumda küresel bir domenin izomorfik deformasyonu için basınç ifadesi (3.14)'den hareketle,

$$P_R = -\frac{1}{4\pi R^2} \left(\frac{\partial F}{\partial R}\right) = n_{cl} k_b T \left[1 + \frac{\lambda_T}{4R} \right] \quad (3.21)$$

olarak elde edilirken, silindirik bir domende ise radyal ve aksenal olmak üzere iki yönde iki farklı basınç ifadesi aşağıdaki gibi elde edilir:

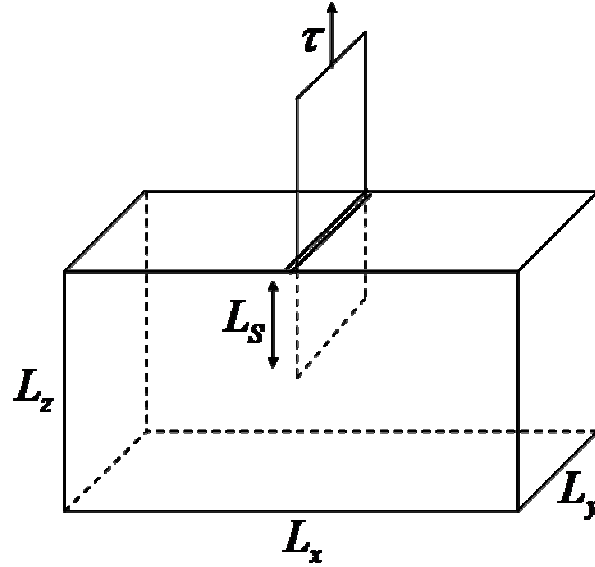
$$P_R = -\frac{1}{2\pi RH} \left(\frac{\partial F}{\partial R} \right) = n_{cl} k_b T \left[1 + \frac{\lambda_T}{4R} \right], \quad (3.22)$$

$$P_H = -\frac{1}{\pi R^2} \left(\frac{\partial F}{\partial H} \right) = n_{cl} k_b T \left[1 + \frac{\lambda_T}{2H} \right]. \quad (3.23)$$

Termodinamik özelliklerde yüzey terimlerinin varlığı makro ölçekte kullanılan ve büyük kolaylıklar sağlayan birçok termodinamik kuralın ve özdeşliğin kaybolmasına yol açar. Bunlardan en önemlisi enerji ve entropi gibi kütleyle bağlı özellikler için toplanabilirlik kuralının kaybıdır. Bir diğeri ise, Gibbs-Duhem özdeşliği geçerliliğini kaybeder. Basıncın skaler bir büyüklük olma özelliğini kaybederek en genelde tensörel bir büyüklüğe dönüşmesi sebebiyle de entalpi, Gibbs serbest enerjisi ve sabit basınçtaki ısı kapasitesi gibi basınca bağlı büyüklükler artık bir skaler değildirler. Makro ölçekte gözlenmeyen bir başka ilginç davranış ise serbest enerjinin yüzey bağımlı terimi nedeniyle ideal gazlarda yanal kuvvetlerin (lateral force) ortaya çıkmasıdır. Maxwellian ideal gazla dolu olan dikdörtgen bir domen Şekil 3.1'deki gibi kalınlığı teorik olarak sıfır olabilen hareketli bir duvar ile ikiye ayrılmış olsun. Serbest enerjinin minimum olma eğilimi kuantum yüzey enerjisini minimum yapmaya çalışırken hareketli duvar üzerinde, yönü domenin dışına doğru olan, bir τ yanal kuvvetinin oluşmasına neden olur. Bu kuvvet (3.14) ifadesinden hareketle aşağıdaki gibi belirlenir:

$$\tau = -\frac{\partial F}{\partial L_s} = -n_{cl} k_b T \frac{\lambda_T}{2} L_y. \quad (3.24)$$

300 K ve 10^5 Pa koşullarında ${}^4\text{He}$ gazı ile dolu dikdörtgen bir domende $L_y=100$ nm için bu kuvvetin değeri yaklaşık $\tau=-25$ pN'dur. Gazların bu klasik olmayan davranışı deneysel olarak gözlenebildiğinde, kuantum yüzey enerjisinin makroskopik manifestosu olacaktır.



Şekil 3.1: Hareketli bir duvar ile ikiye ayrılmış dikdörtgen bir domende yanal kuvvetler.

3.1.2. İdeal Fermi Gazı

İdeal Fermi gazı için üç boyutlu bir sistemdeki parçacık sayısı (3.8) denkleminde aşağıdaki gibi yazılır:

$$N = -Vn_q Li_{3/2}(-e^\Lambda) \left[1 - \frac{\lambda_T}{4} \frac{A}{V} \frac{Li_1(-e^\Lambda)}{Li_{3/2}(-e^\Lambda)} \right]. \quad (3.25)$$

Serbest enerji ifadesi ise (3.9) denkleminde hareketle aşağıdaki gibi verilir:

$$F = Nk_b T \left[\Lambda - \frac{Li_{5/2}(-e^\Lambda)}{Li_{3/2}(-e^\Lambda)} \left\{ 1 - \frac{\lambda_T}{4} \frac{A}{V} \left[\frac{Li_2(-e^\Lambda)}{Li_{5/2}(-e^\Lambda)} - \frac{Li_1(-e^\Lambda)}{Li_{3/2}(-e^\Lambda)} \right] \right\} \right]. \quad (3.26)$$

Buradan hareketle, nano ölçekte, keyfi bir geometride tutuklanmış ideal Fermi gazının bazı termodinamik özellikleri aşağıdaki gibi türetilir:

$$S = Nk_b \left[-\Lambda + \frac{5}{2} \frac{Li_{5/2}(-e^\Lambda)}{Li_{3/2}(-e^\Lambda)} \left\{ 1 - \frac{\lambda_T}{4} \frac{A}{V} \left[\frac{4}{5} \frac{Li_2(-e^\Lambda)}{Li_{5/2}(-e^\Lambda)} - \frac{Li_1(-e^\Lambda)}{Li_{3/2}(-e^\Lambda)} \right] \right\} \right], \quad (3.27)$$

$$E = \frac{3}{2} Nk_b T \frac{Li_{5/2}(-e^\Lambda)}{Li_{3/2}(-e^\Lambda)} \left[1 - \frac{\lambda_T}{4} \frac{A}{V} \left[\frac{2}{3} \frac{Li_2(-e^\Lambda)}{Li_{5/2}(-e^\Lambda)} - \frac{Li_1(-e^\Lambda)}{Li_{3/2}(-e^\Lambda)} \right] \right], \quad (3.28)$$

$$C_V = \frac{3}{2} N k_b \left\{ \begin{array}{l} \frac{5}{2} \frac{Li_{5/2}(-e^\Lambda)}{Li_{3/2}(-e^\Lambda)} \left(1 - \frac{\lambda_T}{4} \frac{A}{V} \left[\frac{8}{15} \frac{Li_2(-e^\Lambda)}{Li_{3/2}(-e^\Lambda)} - \frac{Li_1(-e^\Lambda)}{Li_{3/2}(-e^\Lambda)} \right] \right) \\ - \frac{3}{2} \frac{Li_{3/2}(-e^\Lambda)}{Li_{1/2}(-e^\Lambda)} \left(1 - \frac{\lambda_T}{4} \frac{A}{V} \left[\frac{2}{3} \frac{Li_1(-e^\Lambda)}{Li_{3/2}(-e^\Lambda)} - \frac{Li_0(-e^\Lambda)}{Li_{1/2}(-e^\Lambda)} - \frac{1}{3} \frac{Li_{1/2}(-e^\Lambda)}{Li_{3/2}(-e^\Lambda)} \right] \right) \end{array} \right\}. \quad (3.29)$$

Dejenere ideal Fermi gazlarında $\Lambda \gg 1$ koşulu oluşur. Polilogaritmik fonksiyonların bu limitteki asimptotik ifadesi ise aşağıda verilmektedir. Asimptotik formlar hakkında daha detaylı bilgi Ek-B’de verilmiştir.

$$\Lambda \gg 1 \text{ için, } Li_{d+1}(-e^\Lambda) \approx -\frac{1}{d\Gamma(d)} \left[\frac{\Lambda^{d+1}}{d+1} + \frac{\pi^2}{6} d\Lambda^{d-1} + o(4) \right]. \quad (3.30)$$

Bu ifadede $\Gamma(d)$, gama fonksiyonudur [54,91]. Polilogaritmik fonksiyonların asimptotik ifadeleri kullanılırsa, denklem (3.25) ile verilen parçacık sayısı dejenere ideal fermi gazları için aşağıdaki formda olacaktır:

$$N = \frac{V}{\lambda_T^3} \frac{4\Lambda^{3/2}}{3\sqrt{\pi}} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \frac{1}{\Lambda^2} - \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \frac{1}{\Lambda^{1/2}} \frac{\lambda_T}{4} \frac{A}{V} \right]. \quad (3.31)$$

(3.31) ifadesinden bazı matematiksel işlemler sonucunda Λ büyüklüğü aşağıdaki şekilde elde edilir:

$$\Lambda = \Lambda_F \left(1 - \frac{\pi^2}{12\Lambda_F^2} + \frac{\sqrt{\pi}}{2\Lambda_F^{1/2}} \frac{\lambda_T}{4} \frac{A}{V} \right) = \Lambda_F \left(1 - \frac{\pi^2}{12\Lambda_F^2} + \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\lambda_T^F}{4} \frac{A}{V} \right). \quad (3.32)$$

Bu ifadede,

$$\Lambda_F = \frac{\mu_F}{k_b T}, \quad (3.33)$$

$$\mu_F = \lim_{T \rightarrow 0} \mu = \lim_{n \rightarrow \infty} \mu = \left(\frac{3n_{cl}}{4\pi} \right)^{2/3} \frac{h^2}{2m}, \quad (3.34)$$

$$\lambda_T^F = \frac{h}{2\sqrt{2\pi m k_b T_F}} \quad (3.35)$$

olup T_F ise Fermi sıcaklığı olarak aşağıdaki gibi tanımlıdır:

$$T_F = \frac{\mu_F}{k_b} = \left(\frac{3n_{cl}}{4\pi} \right)^{2/3} \frac{h^2}{2mk_b}. \quad (3.36)$$

Dejenere durum için sistemin serbest enerjisi ise polilogaritmik fonksiyonların asimptotik ifadeleri kullanılarak aşağıdaki biçimde elde edilir:

$$F = \frac{3}{5} Nk_b T_F \left[1 - \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 + \frac{5\sqrt{\pi}}{32} \lambda_T^F \frac{A}{V} - \frac{3\pi^2}{16} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \left(\frac{\sqrt{\pi} \lambda_T^F A}{4V} \right) \right]. \quad (3.37)$$

Bu ifadede parantez içindeki ikinci terim termal düzeltmeyi, üçüncü terim kuantum ölçek düzeltmesini ve dördüncü terim ise termo-ölçek düzeltmesini temsil etmektedirler. Kuantum ölçek etkilerinin termal düzeltmeden daha büyük bir düzeltme getirdiği koşul, denklem (3.31) yardımıyla $\lambda_T A/V > 2\pi^{3/2}/3\Lambda_F^{3/2}$ olarak belirlenir.

(3.37) ifadesinden hareketle, nano ölçekte, keyfi bir geometride tutuklanmış dejenere Fermi gazlarının bazı termodinamik özellikleri aşağıdaki şekilde elde edilir:

$$S = \frac{\pi^2}{2} Nk_b \left(\frac{T}{T_F} \right) \left[1 + \frac{9\sqrt{\pi}}{80} \lambda_T^F \frac{A}{V} \right], \quad (3.38)$$

$$E = \frac{3}{5} Nk_b T_F \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 - \frac{9\pi^{5/2}}{64} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \lambda_T^F \frac{A}{V} + \frac{25\sqrt{\pi}}{96} \lambda_T^F \frac{A}{V} \right], \quad (3.39)$$

$$C_V = Nk_b \left(\frac{T}{T_F} \right) \frac{\pi^2}{2} \left[1 + \frac{27\sqrt{\pi}}{80} \lambda_T^F \frac{A}{V} \right]. \quad (3.40)$$

(3.37)-(3.40) ifadelerinden anlaşılacağı üzere termo-ölçek etkileri sadece serbest enerji ve enerji ifadelerinde görülmekte, entropi ve ısı kapasitesi ifadelerinde ise çok daha yüksek dereceden terimlerde ortaya çıktıkları için ihmal edilebilmektedir.

3.1.3. İdeal Bose Gazı

İdeal Bose gazı için üç boyutlu bir sistemdeki parçacık sayısı (3.8) denkleminde aşağıdaki gibi yazılır:

$$N = Vn_q Li_{3/2}(e^\Lambda) \left[1 - \frac{\lambda_T A}{4V} \frac{Li_1(e^\Lambda)}{Li_{3/2}(e^\Lambda)} \right]. \quad (3.41)$$

Bu ifade 3-boyutlu bir sistemde hacimsel modlardaki (dolayısıyla uyarılmış modlardaki) parçacık sayısını temsil etmekte olup, ikinci terim hacimsel modların hesaplanması sırasında doğru olmayan biçimde dahil olan yüzey modlarını çıkararak gereken düzeltmeyi yapan terimdir.

Bose-Einstein Yoğuşma sıcaklığından daha büyük sıcaklıklar için, serbest enerji ifadesi aşağıdaki şekildedir:

$$F = Nk_b T \left[\Lambda - \frac{Li_{5/2}(e^\Lambda)}{Li_{3/2}(e^\Lambda)} \left\{ 1 - \frac{\lambda_T A}{4V} \left[\frac{Li_2(e^\Lambda)}{Li_{5/2}(e^\Lambda)} - \frac{Li_1(e^\Lambda)}{Li_{3/2}(e^\Lambda)} \right] \right\} \right]. \quad (3.42)$$

Buradan hareketle, nano ölçekte keyfi bir geometride tutuklanmış ideal Bose gazının yoğuşma sıcaklığına kadar, bazı termodinamik özellikleri aşağıdaki gibi elde türetilebilir:

$$S = Nk_b \left[-\Lambda + \frac{5 Li_{5/2}(e^\Lambda)}{2 Li_{3/2}(e^\Lambda)} \left\{ 1 - \frac{\lambda_T A}{4V} \left[\frac{4 Li_2(e^\Lambda)}{5 Li_{5/2}(e^\Lambda)} - \frac{Li_1(e^\Lambda)}{Li_{3/2}(e^\Lambda)} \right] \right\} \right], \quad (3.43)$$

$$E = \frac{3}{2} Nk_b T \frac{Li_{5/2}(e^\Lambda)}{Li_{3/2}(e^\Lambda)} \left[1 - \frac{\lambda_T A}{4V} \left[\frac{2 Li_2(e^\Lambda)}{3 Li_{5/2}(e^\Lambda)} - \frac{Li_1(e^\Lambda)}{Li_{3/2}(e^\Lambda)} \right] \right], \quad (3.44)$$

$$C_V = \frac{3}{2} Nk_b \left\{ \frac{5 Li_{5/2}(e^\Lambda)}{2 Li_{3/2}(e^\Lambda)} \left(1 - \frac{\lambda_T A}{4V} \left[\frac{8 Li_2(e^\Lambda)}{15 Li_{5/2}(e^\Lambda)} - \frac{Li_1(e^\Lambda)}{Li_{3/2}(e^\Lambda)} \right] \right) \right. \\ \left. - \frac{3 Li_{3/2}(e^\Lambda)}{2 Li_{1/2}(e^\Lambda)} \left(1 - \frac{\lambda_T A}{4V} \left[\frac{2 Li_1(e^\Lambda)}{3 Li_{3/2}(e^\Lambda)} - \frac{Li_0(e^\Lambda)}{Li_{1/2}(e^\Lambda)} - \frac{1 Li_{1/2}(e^\Lambda)}{3 Li_{3/2}(e^\Lambda)} \right] \right) \right\}. \quad (3.45)$$

Bose gazlarında, ε_0 yer seviyesi enerjisi olmak üzere $\Lambda \rightarrow \varepsilon_0/k_b T$ koşulu; yer seviyesinde baskın bir toplanmanın olduğu diğer bir deyişle momentum uzayında yer seviyesinde yoğuşmanın (Bose Einstein Condensation) olduğu durumu temsil eder. Λ 'nın maksimum değeri $\varepsilon_0/k_b T$ olup, bu değer için parçacık yoğunluğu sonsuz olduğundan Fermi gazlarından farklı olarak, Bose gazlarında Λ 'nın değeri üstten $\varepsilon_0/k_b T$ ile sınırlıdır. $\lambda_T A/V \ll 1$ olduğu sürece $\varepsilon_0/k_b T \ll 1$ olduğundan yoğuşma

durumu $\Lambda \rightarrow 0$ olarak ele alınabilir ve Bose gazları için $-\infty < \Lambda < 0$ olduğu söylenebilir. Polilogaritmik fonksiyonların $\Lambda \rightarrow 0$ limitindeki asimptotik ifadesi aşağıda verilmektedir. Bu konuda detaylı bilgi Ek-B’de verilmiştir.

$$\Lambda \rightarrow 0 \text{ için, } Li_{m+1}(e^\Lambda) \approx (-\Lambda)^m \Gamma(-m) + \zeta(m+1) + \zeta(m)\Lambda + \frac{1}{2}\zeta(m-1)\Lambda^2 + o(\Lambda^{m+1}). \quad (3.46)$$

Bu ifadede ζ , Riemann zeta fonksiyonu olup aşağıdaki tanıma sahiptir [54,91]:

$$\zeta(x) = \sum_{k=1}^{\infty} k^{-x}. \quad (3.47)$$

Bose gazları için toplam parçacık sayısını, yer seviyesi ve uyarılmış seviyelerdeki parçacık sayılarının toplamı olarak ele almak bazı avantajlar sağlar. Kimyasal potansiyel, parçacık sayısının ve sıcaklığın bir fonksiyonudur. Yüksek sıcaklıklarda yer seviyesindeki ortalama parçacık sayısı birin çok altında olup kimyasal potansiyel şiddetli negatif bir değere sahiptir ($\Lambda \ll -1$, Maxwellian limit). Fakat sıcaklık düşürülürse (yada yoğunluk artırılırsa), uyarılmış seviyelerdeki parçacık sayısı azalarak yer seviyesindeki parçacık sayısında artış eğilimi başlar ve belirli bir kritik sıcaklık değerinde, T_c , uyarılmış seviyedeki parçacıkların sayısı sistemdeki toplam parçacık sayısına eşit olur. Bu sıcaklık değerinin altına inildiğinde yer seviyesinde bulunan parçacık sayısı birin üzerinde değerler almaya başlayarak azalan sıcaklıkla hızla artar. Bu olaya Bose-Einstein Yoğuşması (BEC) adı verilir [50].

Toplam parçacık sayısı aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$N = N_{\varepsilon=\varepsilon_0} + N_{\varepsilon>\varepsilon_0} = N_0 + N_e. \quad (3.48)$$

Burada N_0 , yer seviyesindeki ($\varepsilon=\varepsilon_0$) parçacık sayısını ve N_e ise, uyarılmış seviyelerdeki ($\varepsilon>\varepsilon_0$) parçacık sayısını vermektedir.

Denklem (3.41) ile verilen ifade uyarılmış seviyedeki parçacıkların sayısını temsil etmekte olup artan Λ değeri ile beklenen şekilde artarak belirli bir değere ulaştıktan sonra daha büyük Λ değerleri ile hatalı bir sonuç vererek azalmaya başlamaktadır. (3.41)’in geçerliliğini yitirdiği bu Λ değeri, denklemin türevi alınarak polilogaritmaların asimptotik değerleri kullanılıp sifıra eşitlenirse $\Lambda_S = -\left(\lambda_T A / 4\sqrt{\pi V}\right)^2$ olarak bulunur. Λ_S , sistemin 3-boyutlu davranıştan 2-boyutlu

davranışa geçtiği noktayı göstermektedir. Sistem Λ_S değerine karşılık gelen kritik yoğunluğa (yada kritik sıcaklığa) ulaştığında, sistemdeki toplam parçacık sayısı için denklem (3.41) kullanılmaya devam edilirse hacimsel modlardan (her üç doğrultuda da momentum bileşenleri yer seviyesi bileşenlerinden yüksek olan modlar) yüzey modlarına (momentum bileşenlerinden biri yer seviyesi değerine sahip) geçerek yüzey modlarında birikmeye başlayacak parçacıkların sayısı N_S , dikkate alınmamış olacaktır. Bu sebeple, kimyasal potansiyel Λ_S değerine ulaştığında, (3.40) denklemi geçerliliğini yitirir. Böylece Λ_S parçacıkların hacimsel modlar yerine yüzey modlarında birikmeye başladığı ve böylece sistemin 3-boyutlu sistem davranışından 2-boyutlu sistem davranışına geçtiği özel bir sürecin başladığı noktayı belirler. Bir başka deyişle, bu nokta birkaç süreçten oluşan BEC sürecinin ilk basamağıdır. Bu aşamada denklem (3.6) ile verilen hal yoğunluğu ifadesi 2-boyutlu bir sistem için yeniden düzenlenip yeni kimyasal potansiyel ifadesi elde edilmelidir.

Buna göre denklem (3.41)'de polilogaritmik fonksiyonların $\Lambda \rightarrow 0$ limitindeki asimptotik ifadeleri kullanılarak, üç boyutlu bir sistemde yüzey modlarında yoğunlaşmanın başladığı kritik parçacık sayısı aşağıdaki şekilde elde edilebilir:

$$N = N_c = N_c^{cl} \left[1 - \frac{2\sqrt{\pi} \sqrt{-\Lambda}}{\zeta(3/2)} + \frac{\lambda_T}{4} \frac{A}{V} \frac{\ln(-\Lambda)}{\zeta(3/2)} \right]. \quad (3.49)$$

Bu ifadede N_c^{cl} , ölçek etkilerinin olmaması durumunda elde edilen kritik parçacık sayısı olup $N_c^{cl} = V n_q \zeta(3/2)$ şeklinde tanımlanır [49,50]. Λ_S değeri (3.49)'da kullanılarak, kritik sıcaklık aşağıdaki gibi elde edilir:

$$T_c = T_c^{cl} \left[1 + \frac{\lambda_T^c}{3\zeta(3/2)} \frac{A}{V} \left[1 - \ln \left(\frac{\lambda_T^c}{4\sqrt{\pi}} \frac{A}{V} \right) \right] \right]. \quad (3.50)$$

Bu ifadede, T_c^{cl} , literatürde ölçek etkileri göz önüne alınmadan elde edilen BEC sıcaklığını göstermekte olup,

$$T_c^{cl} = \frac{h^2}{2\pi m k_b} \left[\frac{n_{cl}}{\zeta(3/2)} \right]^{2/3}, \quad (3.51)$$

şeklinde tanımlanır [49,50], λ_T^c ise parçacıkların T_c sıcaklığındaki termal de Broglie dalga boyunu göstermektedir. Oysa, denklem (3.51)'e göre, kuantum ölçek etkileri gözönüne alındığında yoğunlaşmanın daha yüksek bir kritik sıcaklıkta ve yüzey modlarında başladığı anlaşılmaktadır.

Kritik sıcaklıktan daha düşük sıcaklıklarda sistemdeki parçacık sayısı, (3.49) ile değil denklem (3.48) ile belirlenmektedir. Buna göre kritik sıcaklık altında $N > N_c$ olacağından parçacıklar yer seviyesinde toplanmaya başlayacaktır. Ancak kritik sıcaklık altında yer seviyesinde bulunan parçacıkların entropisi sıfıra eşit olduğundan yer seviyesindeki parçacıkların serbest enerjisi yer seviyesi enerjisine eşittir. Yer seviyesi enerjisi ise $\lambda_T A/V \ll 1$ olduğu sürece sıfır kabul edilebileceğinden yer seviyesindeki parçacıkların serbest enerjisi sıfıra eşit olmak durumundadır. Buna göre kritik sıcaklık altında bulunan sistemin serbest enerjisi, sadece uyarılmış seviyelerde bulunan parçacıkların serbest enerjisine eşit olacaktır. Kritik sıcaklık ve altında uyarılmış hacimsel modlardaki parçacıkların sayısını (3.49)'da Λ_S 'in değeri kullanılarak belirlenir. Bose gazı için serbest enerji, (3.42) ifadesinde polilogaritmik fonksiyonların asimptotik ifadeleri ile Λ_S 'in değeri kullanılarak ve (3.49)'dan yararlanarak aşağıdaki biçimde ifade edilir:

$$F_c = -N_c^{cl}(T)k_b T \frac{\zeta(5/2)}{\zeta(3/2)} \left[1 - \frac{\lambda_T^c}{3\zeta(3/2)} \frac{A}{V} \ln \left(\lambda_T^c \frac{A}{V} \right) \right] = F_c^{cl} \left[1 - \frac{\lambda_T^c}{3\zeta(3/2)} \frac{A}{V} \ln \left(\lambda_T^c \frac{A}{V} \right) \right]. \quad (3.52)$$

(3.52) ifadesinden görüldüğü gibi dejenere Bose gazının serbest enerjisi ölçek etkileri nedeniyle büyümektedir. Makro ölçekte $\lambda_T^c A/V \rightarrow 0$ olduğundan ölçek etkileri önemini yitirir ve literatürde dejenere Bose gazı için ölçek etkileri göz önüne alınmadan verilen serbest enerji ifadesine ulaşılır [49,50]. Bose gazının diğer termodinamik özellikleri ise (3.52) ile verilen serbest enerjiden türetilir.

3.2. Yerel Termodinamik Özellikler

Literatürde kuantum ölçek etkilerinin, gazların global termodinamik özelliklerine katkısına ilişkin çalışmalar oldukça yeni olup, yerel özellikler üzerine ise henüz yeterince çalışılmamıştır [48]. Ref.[48]'de verilen çalışmada, dikdörtgen bir domende tutuklanmış Maxwell gazı için yoğunluk dağılımının termodinamik dengede dahi homojen olmadığı, yoğunluğun domen sınırlarına yakın bir bölgede

azalarak sıfıra gittiği ve homojenliğin bozulduğu bir sınır tabakanın varlığı gösterilmiştir. Böylece, domen içindeki gaz parçacıklarının tüm hacmi doldurmak yerine, geometrik hacimden daha küçük bir etkin hacmi işgal ettiği anlaşılmıştır. Etkin hacmin tanımı; ölçek etkili termodinamik özelliklerin ölçek etkisiz klasik ifadelerinden, klasik yoğunluk yerine etkin yoğunluk kullanılarak, doğrudan elde edilmesini sağlamak ve termodinamik büyüklüklerin şekil ve ölçek bağımlılığını yalın ve açık bir biçimde açıklamaktadır. Bu tabakanın kalınlığı, parçacıkların termal de Broglie dalga boyu mertebesinde olup, $\hbar \rightarrow 0$ durumunda sıfıra gittiği için, kuantum sınır tabakası olarak adlandırılmıştır. Gaz yoğunluğunun homojen olmadığı bu tabaka ancak nano ölçeklerde önemli hale gelmektedir.

Yerel özelliklerin incelenmesi, gerek yerel denge şartlarını temel alan denge-dışı termodinamik modeller için gerekse kuantum ölçek etkilerinin global termodinamik özellikler üzerindeki etkilerinin mekanizmasını ve fiziksel temellerini anlayabilmek için oldukça önemlidir. Bu çerçevede bu bölümde, düzenli ve düzensiz sonlu geometrilerde tutuklanmış Maxwellian, Fermi ve Bose gazlarının yerel yoğunluk dağılımı türetilmiş ve yerel yoğunluk üzerindeki kuantum ölçek etkileri bazı özel durumlar için analitik olarak diğer durumlarda ise sayısal olarak incelenmiştir.

3.2.1. Maxwellian Gazlarda Yerel Yoğunluk Dağılımı

İdeal Maxwellian bir gaz için, \mathbf{x} -konumunda merkezlenmiş bir dV differansiyel yerel hacmi içinde ve r kuantum halinde bulunan parçacıkların sayısı aşağıdaki gibi ifade edilebilir:

$$dN_r = N \left[\frac{\exp(-\varepsilon_r/k_b T)}{\sum_r \exp(-\varepsilon_r/k_b T)} \right] \left[|\psi_r(\mathbf{x})|^2 dV \right]. \quad (3.53)$$

Burada N , tüm tutuklama hacmindeki parçacık sayısı, ε_r , r kuantum halinde bulunan parçacıkların enerjileri, ψ_r , r kuantum haliyle ilişkili özfonksiyonlardır. İlk parantezdeki terim, bir parçacığın r kuantum halinde bulunma olasılığını (termodinamik olasılık), ikinci parantezdeki terim ise parçacığın \mathbf{x} -konumunda merkezlenmiş bir dV hacminde bulunma olasılığını (kuantum olasılık) vermektedir. Burada sistemin ergodik olduğu kabul edilmektedir. Böylece, (3.53)'den hareketle, r kuantum haline sahip yerel parçacık yoğunluğu ise,

$$n_r(\mathbf{x}) = \frac{dN_r}{dV} = N \frac{\exp(-\varepsilon_r/k_b T) |\psi_r(\mathbf{x})|^2}{\sum_r \exp(-\varepsilon_r/k_b T)} \quad (3.54)$$

olarak yazılabilir. Yerel yoğunluk ise bütün kuantum halleri üzerinden toplam alınarak aşağıdaki biçimde elde edilir:

$$n(\mathbf{x}) = \sum_r n_r(\mathbf{x}) = N \frac{\sum_r \exp(-\varepsilon_r/k_b T) |\psi_r(\mathbf{x})|^2}{\sum_r \exp(-\varepsilon_r/k_b T)} = N \langle |\psi_r(\mathbf{x})|^2 \rangle. \quad (3.55)$$

Burada $\langle |\psi_r(\mathbf{x})|^2 \rangle$ terimi kuantum olasılık yoğunluğunun ensemble (topluluk) ortalamasını temsil eder. $\langle \dots \rangle$ işlemi ile ensemble ortalama temsil edilmektedir. (3.55) ifadesi, domenin şekli ve sınır şartları gibi global özellikleri ile yoğunluk gibi yerel bir özellik arasındaki ilişkiyi göstermektedir.

3.2.1.1. Dikdörtgen Domende Tutuklanmış Bir Maxwell Gazın Yerel Yoğunluk Dağılımı

Schrödinger denkleminin enerji özdeğerleri ile özfonksiyonlarının analitik olarak bilinebilmesi dolayısıyla, dikdörtgen geometriye sahip bir domen özel bir önem taşır. Böylece dikdörtgen bir domende tutuklanmış bir Maxwell gazında yerel yoğunluğu (3.55) ifadesi ile analitik olarak hesaplayabilmek imkanı doğar. Böyle bir analitik sonuç bu tez sahibinin de katıldığı bir çalışmanın sonucu olarak literatürde yayınlanmıştır [48]. Söz konusu çalışma, Maxwell gazlarında yerel yoğunlukla ilgili modelleme ve karşılaştırma için bir temel teşkil etmesi dolayısıyla, bu alt bölümde tekrar irdelenmiştir. Boyutları L_x , L_y ve L_z olan dikdörtgen bir kutuda tutuklanmış gaz parçacıkları için enerji özdeğerleri denklem (2.16) ile verilmektedir. Özfonksiyonlar ise aşağıdaki gibidir [51]:

$$\psi_r(\mathbf{x}) = \left[\sqrt{\frac{2}{L_x}} \sin\left(\frac{\pi x}{L_x} i\right) \right] \left[\sqrt{\frac{2}{L_y}} \sin\left(\frac{\pi y}{L_y} j\right) \right] \left[\sqrt{\frac{2}{L_z}} \sin\left(\frac{\pi z}{L_z} k\right) \right]. \quad (3.56)$$

Denklem (3.55)'de paydadaki toplam tek parçacık bölüşüm fonksiyonu olup, dikdörtgen geometri için genel ifadesi denklem (2.24)'de, işlem sonucu ise (2.28)'de verilmiştir. (3.55)'de paydaki toplam ise (3.56) ve (2.17)'nin yardımıyla,

$$\sum_r \exp(-\varepsilon_r/k_b T) |\psi_r(\mathbf{x})|^2 = \frac{8}{L_x L_y L_z} \left[\sum_{i=1}^{\infty} e^{-(\alpha_x i)^2} \sin^2\left(\frac{\pi x}{L_x} i\right) \right] \times \left[\sum_{j=1}^{\infty} e^{-(\alpha_y j)^2} \sin^2\left(\frac{\pi y}{L_y} j\right) \right] \left[\sum_{k=1}^{\infty} e^{-(\alpha_z k)^2} \sin^2\left(\frac{\pi z}{L_z} k\right) \right] \quad (3.57)$$

olarak yazılır. Köşeli parantezler içindeki ifadelerin katkısı aşağıdaki şekilde hesaplanır:

$$\sum_{i=1}^{\infty} \exp[-(\alpha_x i)^2] \sin^2\left(\frac{\pi x}{L_x} i\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{4\alpha_x} \sigma_x(\tilde{x}), \quad (3.58)$$

$$\sum_{j=1}^{\infty} \exp[-(\alpha_y j)^2] \sin^2\left(\frac{\pi y}{L_y} j\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{4\alpha_y} \sigma_y(\tilde{y}), \quad (3.59)$$

$$\sum_{k=1}^{\infty} \exp[-(\alpha_z k)^2] \sin^2\left(\frac{\pi z}{L_z} k\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{4\alpha_z} \sigma_z(\tilde{z}). \quad (3.60)$$

Bu ifadelerde $\tilde{x} = x/L_x$, $\tilde{y} = y/L_y$ ve $\tilde{z} = z/L_z$ boyutsuz koordinatlar olup, σ değerleri ise aşağıdaki biçimde ifade edilirler:

$$\sigma_x(\tilde{x}) = \left[1 - \exp\left[-\left(\frac{\pi \tilde{x}}{\alpha_x}\right)^2\right] \right] \left[1 - \exp\left[-\left(\frac{\pi(1-\tilde{x})}{\alpha_x}\right)^2\right] \right], \quad (3.61)$$

$$\sigma_y(\tilde{y}) = \left[1 - \exp\left[-\left(\frac{\pi \tilde{y}}{\alpha_y}\right)^2\right] \right] \left[1 - \exp\left[-\left(\frac{\pi(1-\tilde{y})}{\alpha_y}\right)^2\right] \right], \quad (3.62)$$

$$\sigma_z(\tilde{z}) = \left[1 - \exp\left[-\left(\frac{\pi \tilde{z}}{\alpha_z}\right)^2\right] \right] \left[1 - \exp\left[-\left(\frac{\pi(1-\tilde{z})}{\alpha_z}\right)^2\right] \right]. \quad (3.63)$$

(2.28), (3.57)-(3.63) ifadelerinin (3.55)'de kullanılmasıyla yerel yoğunluk ifadesi aşağıdaki biçimde elde edilir:

$$n(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}) = n_{cl}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}) \frac{n_x(\tilde{x})}{\left(1 - \frac{\lambda_T}{2L_x}\right)} \frac{n_y(\tilde{y})}{\left(1 - \frac{\lambda_T}{2L_y}\right)} \frac{n_z(\tilde{z})}{\left(1 - \frac{\lambda_T}{2L_z}\right)}. \quad (3.64)$$

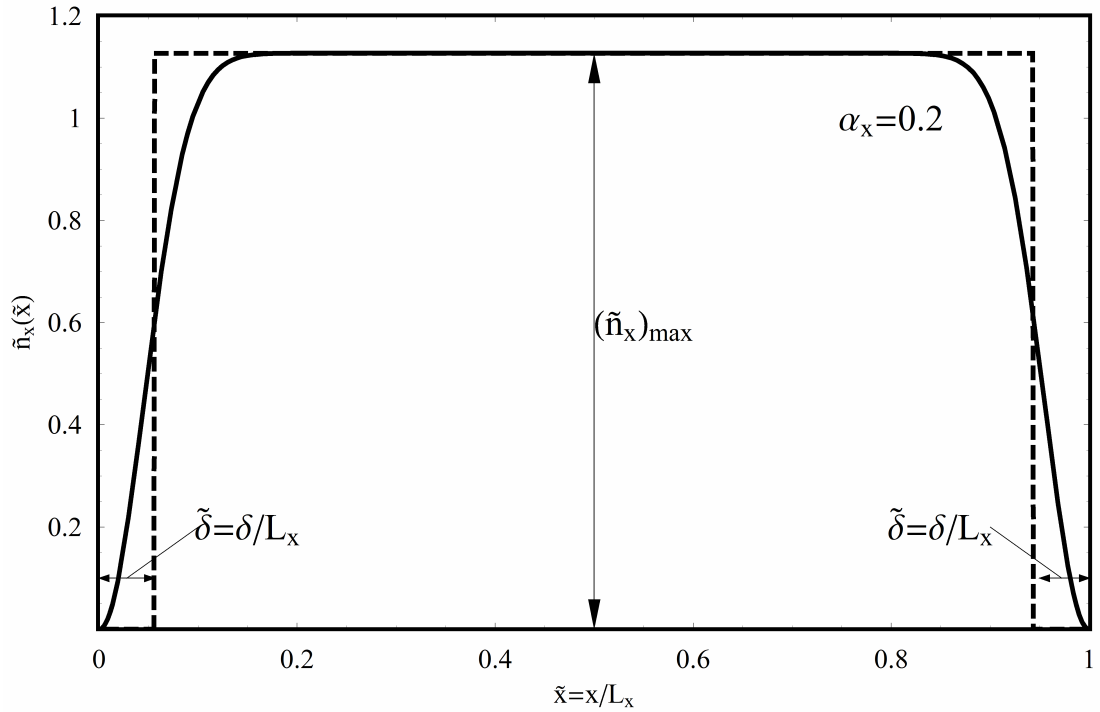
Burada $n_{cl} = N/V = N/L_x L_y L_z$ dir.

Boyutsuz yoğunluk dağılımı ise,

$$\tilde{n}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}) = \frac{n(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z})}{n_{cl}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z})} = \tilde{n}_x(\tilde{x})\tilde{n}_y(\tilde{y})\tilde{n}_z(\tilde{z}) \quad (3.65)$$

şeklinde yazılabilir. Bu ifadeden boyutsuz yoğunluğun bir değerini almadığı böylece yoğunluğun klasik yoğunluktan farklı olduğu anlaşılmaktadır.

\tilde{x} -yönündeki boyutsuz yoğunluk dağılımı $\tilde{n}_x(\tilde{x})$ ile temsil edilmekte olup Şekil 3.2’de sürekli çizgi ile gösterilmektedir.



Şekil 3.2: \tilde{x} -doğrultusunda boyutsuz yoğunluk dağılımı.

Şekil 3.2’den, parçacıkların tutuklanma domenin tamamını doldurmak yerine, sınırlardan uzaklaşarak geometrik hacminden daha küçük bir hacme dağıldıkları anlaşılmaktadır. Domen sınırlarında, yoğunluğun sıfıra gittiği bir tabakanın varolduğu görülmektedir. Bu tabakanın kalınlığına ait bir ifade verebilmek için, dağılımın genliği ve domen integrali aynı olan ve Şekil 3.2’de kesikli çizgi ile gösterilen, basitleştirilmiş bir yoğunluk dağılımı ile yaklaşım yapılabilir. $\tilde{n}_x(\tilde{x})$ ele alındığında, x-yönündeki boyutsuz yoğunluk dağılımının genliği ve domen integrali sırasıyla aşağıdaki değerlere sahiptir:

$$(\tilde{n}_x)_{\max} = \tilde{n}(1/2) = \frac{[1 - \exp(-\pi^2/4\alpha_x^2)]^2}{1 - \frac{\lambda_T}{2L_x}} \approx \frac{1}{1 - \frac{\lambda_T}{2L_x}}, \quad (3.66)$$

$$\int_0^1 \tilde{n}_x(\tilde{x}) d\tilde{x} = 1. \quad (3.67)$$

Basitleştirilmiş dağılımın sıfırdan farklı olduğu bölgenin genişliği $\tilde{L}_x^{eff} = L_x^{eff}/L_x$ ile gösterilirse, basitleştirilmiş dağılımın domen integrali aşağıdaki gibi ifade edilir:

$$(\tilde{n}_x)_{\max} \tilde{L}_x^{eff} = 1. \quad (3.68)$$

Buradan hareketle basitleştirilmiş dağılımın genişliği,

$$\tilde{L}_x^{eff} = \frac{1}{(\tilde{n}_x)_{\max}} = 1 - \frac{\lambda_T}{2L_x} \quad (3.69)$$

olarak elde edilir. Diğer yandan Şekil 3.2'den, boyutsuz basitleştirilmiş yoğunluk dağılımının genişliğinin,

$$\tilde{L}_x^{eff} = 1 - 2\tilde{\delta} \quad (3.70)$$

olarak da yazılabileceği görülmektedir. Burada $\tilde{\delta} = \delta/L_x$, sınır tabakanın boyutsuz kalınlığı olup sınır tabakanın kalınlığı δ ise, denklem (3.69) ve (3.70)'eşitliğinden,

$$\delta = \frac{\lambda_T}{4} \quad (3.71)$$

olarak bulunur. Denklem (3.70) ve (3.71)'den yararlanarak etkin uzunluk L_x^{eff} , aşağıdaki biçimde elde edilir:

$$L_x^{eff} = L_x - 2\delta = L_x - \frac{\lambda_T}{2}. \quad (3.72)$$

Benzer sonuçlar y ve z -yönleri için de elde edilir. Tüm yönlerde sınır tabakanın kalınlığının aynı ve denklem (3.71) ile verilen değere eşit olduğu anlaşılmaktadır.

Denklem (3.72) ile verilen etkin uzunluk tanımından hareket ederek, aşağıdaki gibi bir etkin hacim tanımı yapılabilir:

$$V_{eff} = L_x^{eff} L_y^{eff} L_z^{eff} = V \left[1 - \frac{A}{V} \delta \right]. \quad (3.73)$$

Buradan parçacıkların etkin yoğunluğu ise,

$$n_{eff} = \frac{N}{V_{eff}} = \frac{n_{cl}}{1 - \frac{A}{V} \delta} \quad (3.74)$$

olarak elde edilir. Denklem (3.74), (2.35) ile verilen ölçek etkisiz serbest enerji ifadesinde kullanılırsa, aşağıdaki ifade elde edilir:

$$F = -Nk_b T \left[\ln \left(\frac{n_q}{n_{eff}} \right) + 1 \right] = -Nk_b T \left[\ln \left(\frac{n_q}{n_{cl}} \right) + 1 \right] + Nk_b T \frac{\lambda_T}{4} \frac{A}{V}. \quad (3.75)$$

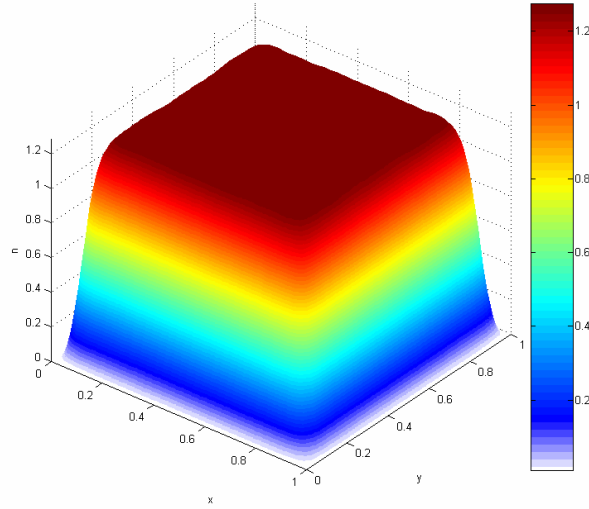
Bu ifade, ölçek etkili serbest enerji ifadesi ile özdeştir. Böylece yerel yoğunluk incelemesi, homojen olmayan yoğunluk dağılımını ve kuantum sınır tabakasının varlığını göstermiş ve buradan hareketle tanımlanan etkin uzunluk ve etkin hacim kavramları da ortalama etkin yoğunluğu ortaya koymuştur. Etkin yoğunluk ise, klasik termodinamik ifadelerden, doğrudan doğruya ölçek etkili ifadelere ulaşmayı ve kuantum ölçek etkilerinin daha detaylı olarak anlaşılmasını sağlamıştır. Ayrıca gazın neden bir kuantum yüzey enerjisine sahip olduğu da, yüzeye yakın bölgelerdeki bu yoğunluk düşüşü ile fiziksel olarak bir açıklama bulmaktadır. Bu sonuçlardan hareketle aynı tip gaz içeren makro ve nano ölçekli iki ayrı kap birbirlerine bağlandığında, termodinamik denge durumunda geometrik yoğunlukların ($n_{cl}=N/V$) değil etkin yoğunlukların eşit olacağı açıktır. Bu durumda geometrik yoğunluklar (ya da görünür yoğunluklar) termodinamik denge durumunda eşit olmayacak ve nano ölçekli kaptaki görünür yoğunluk makro ölçekteki kabın yoğunluğundan daha küçük olacaktır. Böylece (2.42) ifadesinin nedeni de anlaşılmiş olmaktadır.

Makro ölçekte önemsiz olan fakat nano ölçekli belirgin hale gelen kuantum yüzey gerilimi ise denklem (3.75)'ten hareketle aşağıdaki gibi ifade edilir:

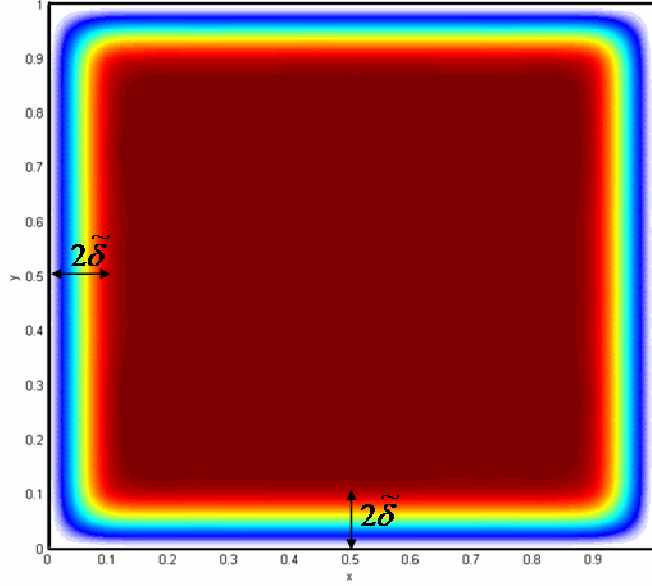
$$\sigma = \left(\frac{\partial F}{\partial A} \right)_{V,T} = n_{cl} k_b T \frac{\lambda_T}{4} = n_{cl} k_b T \delta. \quad (3.76)$$

300 K ve 10^5 Pa koşullarında ${}^4\text{He}$ gazı için $\sigma=10^{-6} \text{ Nm}^{-1}$ civarındadır.

Şekil 3.2’de yoğunluk dağılımı tek boyutta gösterilmiştir. İki boyutlu kare bir domende tutuklanmış ideal bir Maxwell gazının boyutsuz yoğunluk dağılımı Şekil 3.3 ve Şekil 3.4’de verilmiştir. Bu grafikler Schrödinger denkleminin sayısal çözümünden (Ek-C) elde edilen özdeğer ve özfonksiyonların (3.55) ifadesinde kullanılması ve toplamların da sayısal olarak hesaplanması sonucu üretilmişlerdir. Öte yandan kare domen için analitik çözüm (3.65) ile verilmiş olup Şekil 3.3 ve Şekil 3.4’de verilen sonuçların analitik sonuçlarla karşılaştırılması sayısal çözümlerin maksimum hatasının % 0.01’in altında kaldığını göstermiştir. Sayısal çözümün bu başarısından hareketle analitik çözümün mümkün olmadığı geometrilerde yoğunluk dağılımının incelenmesi için sayısal çözümlerden yararlanmak mümkündür.



Şekil 3.3: Kare şekilli bir domende tutuklanmış ideal Maxwell gazının $\alpha=0.2$ için boyutsuz yoğunluk dağılımı.



Şekil 3.4: Şekil 3.3’de verilen yoğunluk dağılımının ve sınır tabakanın üstten görünümü.

3.2.1.2. Küresel Domende Tutuklanmış Bir Maxwell Gazında Yerel Yoğunluk Dağılımı

Önceki alt bölümde dikdörtgen geometrili domen için elde edilen yerel yoğunluk dağılımı ve kuantum sınır tabaka kalınlığının, farklı şekle sahip domenlerde aynı değere sahip genel bir sonuç olup olmadığını anlamak amacıyla, burada küresel bir domende tutuklanmış bir Maxwell gazının yoğunluk dağılımı incelenmiştir. Küresel koordinatlarda zamandan bağımsız Schrödinger denklemi aşağıdaki gibidir [51]:

$$\left\{ -\frac{\hbar}{2m} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] + U(r) \right\} \psi(r) = \varepsilon_{nlm} \psi(r). \quad (3.77)$$

$U(r)$ dış potansiyelinin olmadığı, R yarıçaplı bir küresel kuyuda tutuklanmış ideal tek atomlu bir Maxwell gazı için enerji özdeğerleri aşağıdaki gibidir [51]:

$$\varepsilon_{nlm} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{x_{nl}}{R} \right)^2. \quad (3.78)$$

Burada x_{nl} , l -inci mertebeden küresel Bessel fonksiyonlarının n -inci dereceden kökleridir. Bu kökler ancak sayısal olarak hesaplanabilir. Sonsuz küresel kuyu için dalga fonksiyonları ise aşağıdaki gibidir:

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = A_{nl} j_l \left(\frac{x_{nl}}{R} r \right) Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (3.79)$$

Bu ifadeye, A_{nl} normalizasyon sabiti, j_l küresel Bessel fonksiyonları, Y_{lm} ise küresel harmoniklerdir. A_{nl} normalizasyon sabiti, normalizasyon koşulundan hareketle,

$$A_{nl}^2 = \frac{2}{R^3 j_{l+1}^2(x_{nl})} \quad (3.80)$$

olarak elde edilir [51]. Matematiksel işlem kolaylığı açısından, küresel Bessel fonksiyonları normal Bessel fonksiyonlarına çevrilirse, özfonksiyonların mutlak değerinin karesi aşağıdaki yazılır:

$$|\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)|^2 = \frac{2}{rR^2} \frac{J_{l+\frac{1}{2}}^2 \left(\frac{x_{nl}}{R} r \right)}{J_{l+\frac{3}{2}}^2(x_{nl})} Y_{lm}^2(\theta, \phi). \quad (3.81)$$

Bu ifade denklem (3.53)'de kullanılırsa, dV differansiyel yerel hacmi içinde ve r kuantum halinde bulunan parçacıkların sayısı için

$$dN_{nlm} = N \frac{e^{-\varepsilon_{nlm}/k_b T}}{\sum_{n,l,m} e^{-\varepsilon_{nlm}/k_b T}} \frac{2}{rR^2} \left[\frac{J_{l+\frac{1}{2}}^2 \left(\frac{x_{nl}}{R} r \right)}{J_{l+\frac{3}{2}}^2(x_{nl})} \right]^2 Y_{lm}^2(\theta, \phi) dV \quad (3.82)$$

elde edilir. Verilen bir kuantum halinde bulunan yerel parçacık yoğunluğu,

$$n_{nlm}(r, \theta, \phi) = \frac{dN_{nlm}}{dV} = N \frac{e^{-\varepsilon_{nlm}/k_b T}}{\sum_{n,l,m} e^{-\varepsilon_{nlm}/k_b T}} \frac{2}{rR^2} \left[\frac{J_{l+\frac{1}{2}}^2 \left(\frac{x_{nl}}{R} r \right)}{J_{l+\frac{3}{2}}^2(x_{nl})} \right]^2 Y_{lm}^2(\theta, \phi) \quad (3.83)$$

olmaktadır. Radyal yoğunluğu ifade etmek üzere yoğunluğun açısal koordinatlar üzerinden ortalaması yazılırsa,

$$n_{nlm}(r) = \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} n_{nlm}(r, \theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi}{\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta d\phi} \quad (3.84)$$

ve

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} Y_{lm}^2(\theta, \phi) d\theta \sin \theta = 1 \quad (3.85)$$

olduğu göz önüne alınırsa $\{n, l, m\}$ değişken seti ile verilen kuantum halinde bulunan parçacık yoğunluğunun radyal dağılımı

$$n_{nlm}(r) = \frac{N}{\zeta} \frac{1}{2\pi r R^2} e^{-\varepsilon_{nlm}/k_b T} \left[\frac{J_{l+\frac{1}{2}}\left(\frac{x_{nl}}{R} r\right)}{J_{l+\frac{3}{2}}(x_{nl})} \right]^2 \quad (3.86)$$

olarak elde edilir. (3.86) ifadesi bütün kuantum halleri üzerinden toplandığında, yoğunluk ifadesi aşağıdaki gibi olur:

$$n(r) = \sum_{nlm} n_{nlm} = \frac{N}{\zeta} \frac{1}{2\pi r R^2} \sum_{n,l} (2l+1) e^{-\left(\frac{\alpha_R x_{nl}}{\pi}\right)^2} \left[\frac{J_{l+\frac{1}{2}}\left(\frac{x_{nl}}{R} r\right)}{J_{l+\frac{3}{2}}(x_{nl})} \right]^2. \quad (3.87)$$

Bu ifadede,

$$\alpha_R = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\lambda_T}{R}, \quad (3.88)$$

$$\zeta = \sum_{n,l,m} e^{-\left(\frac{\alpha_R x_{nl}}{\pi}\right)^2} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left[-\left(\frac{\alpha_R x_{nl}}{\pi}\right)^2\right] \quad (3.89)$$

şeklinde tanımlanmıştır. Denklem (3.89) ile verilen tek parçacık bölüşüm fonksiyonu Bessel fonksiyonlarının köklerini içermekte olup literatürde aşağıdaki şekilde verilir [45]:

$$\zeta = \frac{\pi^{5/2}}{6\alpha_R^3} \left[1 - \frac{3\alpha_R}{2\sqrt{\pi}} \right]. \quad (3.90)$$

Bu ifade (3.87)'de kullanılırsa, boyutsuz yoğunluk dağılımı aşağıdaki gibi elde edilir:

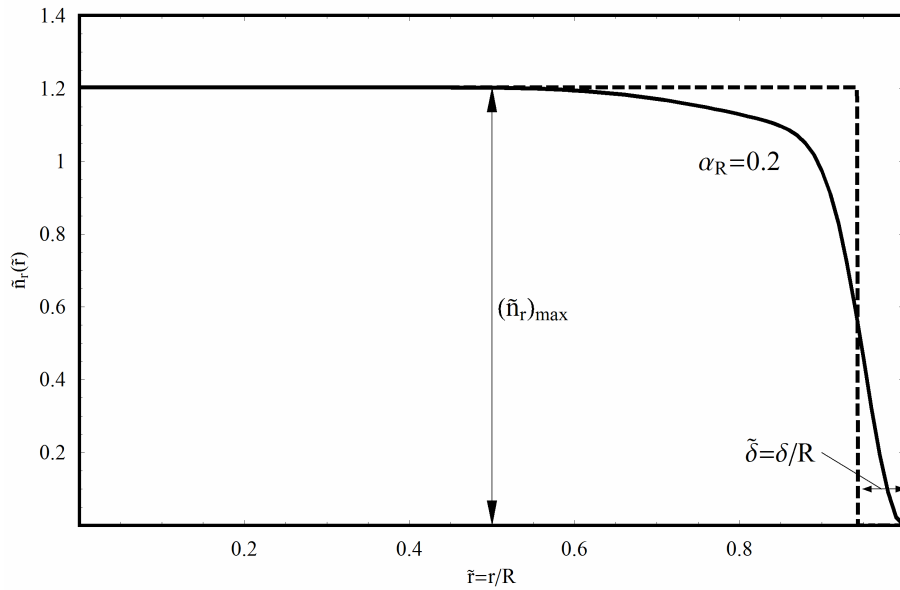
$$\tilde{n}_r(\tilde{r}) = \frac{n_r(r)}{n_{cl}} = \frac{1}{1 - \frac{3\alpha_R}{2\sqrt{\pi}}} \left[\frac{4\alpha_R^3}{\pi^{5/2}} \frac{f(\alpha_R, \tilde{r})}{\tilde{r}} \right]. \quad (3.91)$$

Burada $\tilde{r} = r/R$ boyutsuz radyal koordinat olup, klasik yoğunluk n_{cl} ve $f(\alpha_R, \tilde{r})$ fonksiyonu sırasıyla

$$n_{cl} = \frac{N}{\frac{4}{3}\pi R^3}, \quad (3.92)$$

$$f(\alpha_R, \tilde{r}) = \sum_{n,l} (2l+1) e^{-\left(\frac{\alpha_R x_{nl}}{\pi}\right)^2} \left[\frac{J_{l+\frac{1}{2}}(x_{nl} \tilde{r})}{J_{l+\frac{3}{2}}(x_{nl})} \right]^2 \quad (3.93)$$

şeklinde tanımlıdır. $f(\alpha_R, \tilde{r})$ fonksiyonu Bessel fonksiyonlarını ve köklerini içermesi dolayısıyla ancak sayısal olarak hesaplanabilir. Şekil 3.5'de küresel domende tutuklanmış bir ideal Maxwell gazında radyal yöndeki yoğunluk dağılımı verilmektedir.



Şekil 3.5: $\alpha_R=0.2$ için radyal yönde boyutsuz yoğunluk dağılımı.

Yoğunluk dağılımının genliğini bulabilmek için çok sayıda Bessel fonksiyonunun kökü hassas bir şekilde elde edilerek denklem (3.91)'de köşeli parantez ile verilen ifade sayısal olarak hesaplanır. Yoğunluk dağılımının maksimumun değeri ($\tilde{r} = 0$) için,

$$\lim_{\tilde{r} \rightarrow 0} \frac{4\alpha^3}{\pi^{5/2}} \frac{f(\alpha, \tilde{r})}{\tilde{r}} = 1 \quad (3.94)$$

elde edilerek boyutsuz yoğunluk dağılımının genliği,

$$(\tilde{n})_{\max} = \tilde{n}(0) = \frac{1}{1 - \frac{3\alpha_R}{2\sqrt{\pi}}} \quad (3.95)$$

olarak elde edilir. Sınır tabakası kalınlığı için analitik bir ifade elde edebilmek amacıyla, yoğunluk dağılımı, bir adım fonksiyonu ile temsil edilebilir. Bu basitleştirilmiş dağılımın genliği ve domen integrali, gerçek dağılımınki ile aynı olmalıdır. Yoğunluk dağılımının genliği (3.95)'de verilen değere eşit olup, domen integrali ise,

$$N = \int_0^R 4\pi r^2 n(r) dr = \frac{N}{V} R^3 \int_0^1 4\pi \tilde{r}^2 \tilde{n}_r(\tilde{r}) d\tilde{r} \quad (3.96)$$

özdeşliğinden hareketle,

$$\int_0^1 4\pi \tilde{r}^2 \tilde{n}_r(\tilde{r}) d\tilde{r} = \frac{4}{3} \pi \quad (3.97)$$

olarak bulunur. Böylece (3.96) ve (3.97) yardımıyla, adım fonksiyonu ile temsil edilen basitleştirilmiş dağılımın domen integrali,

$$\int_0^{R_{eff}} 4\pi \tilde{r}^2 (\tilde{n}_r)_{\max} d\tilde{r} = \frac{4}{3} \pi R_{eff}^3 (\tilde{n}_r)_{\max} \quad (3.98)$$

olarak elde edilir. Denklem (3.97) ve (3.98)'in eşit olma koşulundan hareket ederek, etkin yarıçap aşağıdaki gibi elde edilir:

$$\tilde{R}_{eff} \approx 1 - \frac{\alpha_R}{2\sqrt{\pi}}. \quad (3.99)$$

Şekil 3.3'den, tanımı gereğince, etkin küre yarıçapının aşağıdaki gibi olduğu görülmektedir:

$$\tilde{R}_{eff} = 1 - \tilde{\delta}_R. \quad (3.100)$$

Bu ifadede, $\tilde{\delta}_R$, boyutsuz sınır tabaka kalınlığı olup $\tilde{\delta}_R = \delta/R$ şeklinde ifade edilmektedir.

Denklem (3.99) ve (3.100)'ün eşitliğinden hareket ederek, sınır tabaka kalınlığı,

$$\delta = \frac{R\alpha_R}{2\sqrt{\pi}} \quad (3.101)$$

olarak bulunur. Denklem (3.88)'den yararlanarak δ aşağıdaki gibi yeniden yazılabilir:

$$\delta = \frac{\lambda_T}{4}. \quad (3.102)$$

Bu ifadenin, dikdörtgen domen için denklem (3.71)'de elde edilmiş δ değeriyle aynı olduğu görülmektedir ki, bu sonuç kuantum sınır tabakası kalınlığının gazın tutuklandığı domenin geometrisinden bağımsız olabileceğine işaret etmektedir.

3.2.1.3. Silindirik Domende Tutuklanmış Bir Maxwell Gazında Yerel Yoğunluk Dağılımı

Kuantum sınır tabakası kalınlığının geometriden bağımsız olabileceğine işaret eden (3.102) sonucunun silindirik geometride de değişmez olup olmayacağına araştırılması ve böylece sonucun genel bir sonuç olabileceği yönündeki izlenimi kuvvetlendirmek amacıyla bu alt bölümde silindirik geometride tutuklanmış Maxwell gazı durumu ele alınmıştır. Sonsuz kuyu potansiyelle temsil edilen silindirik bir domen için zamandan bağımsız Schrödinger denklemi,

$$\left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \psi + \kappa^2 \psi = 0 \quad (3.103)$$

olarak yazılır. Burada κ dalga sayısı olup enerji ile $\varepsilon = \hbar^2 \kappa^2 / 2m$ şeklinde ilişkilidir. Çapı R ve yüksekliği H olan silindirik domende bulunan parçacıkların dalga sayısı özdeğerleri aşağıdaki gibi verilir [45]:

$$\kappa_{nmq}^2 = \frac{x_{nm}^2}{R^2} + \left(\frac{\pi}{H} q \right)^2. \quad (3.104)$$

Burada x_{nm} , m -inci mertebeden Bessel fonksiyonlarının n -inci dereceden kökleri olup, $q=1,2,3,\dots$ şeklinde pozitif tam sayılardır. Buna göre boyutsuz enerji özdeğerleri,

$$\frac{\varepsilon_{nmq}}{k_b T} = \left(\alpha_R \frac{x_{nm}}{\pi} \right)^2 + (\alpha_H q)^2 \quad (3.105)$$

şeklinde yazılır. Burada, $\alpha_R = L_c/R$ ve $\alpha_H = L_c/H$ olarak tanımlıdır.

(3.103) denkleminin özfonksiyonları ise,

$$\psi_{nmq}(r, \phi, z) = \sqrt{\frac{2}{\pi R^2 H}} \sin\left(\frac{\pi z}{H} q\right) \frac{J_m\left(\frac{r}{R} x_{nm}\right)}{J_{m+1}(x_{nm})} e^{im\phi} \quad (3.106)$$

şeklinde bulunur. Buna göre (3.55) denkleminde hareketle silindirik bir domen için verilen bir kuantum durumundaki parçacık yoğunluğu aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$n_{nmq}(r, \phi, z) = N \frac{e^{-\varepsilon_{nmq}/k_b T}}{\sum_{n,m,q} e^{-\varepsilon_{nmq}/k_b T}} \frac{2}{\pi R^2 H} \sin^2\left(\frac{\pi z}{H} q\right) \left[\frac{J_m\left(\frac{r}{R} x_{nm}\right)}{J_{m+1}(x_{nm})} \right]^2 e^{2im\phi}. \quad (3.107)$$

Radyal ve aksenal yoğunluğu ifade etmek üzere yoğunluğun açısal koordinat üzerinden ortalaması yazılır,

$$n_{nmq}(r, z) = \frac{\int_0^{2\pi} n_{nmq}(r, \phi, z) d\phi}{\int_0^{2\pi} d\phi} \quad (3.108)$$

ve

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{2im\phi} d\phi = 1 \quad (3.109)$$

olduğu göz önüne alınırsa $\{n, m, q\}$ değişken seti ile verilen kuantum halinde bulunan parçacık yoğunluğunun radyal ve aksenal dağılımı için,

$$n_{nmq}(r, z) = \frac{N}{\zeta} \frac{2}{\pi R^2 H} e^{-\varepsilon_{nmq}/k_b T} \left[\frac{J_m\left(\frac{r}{R} x_{nm}\right)}{J_{m+1}(x_{nm})} \right]^2 \sin^2\left(\frac{\pi z}{H} q\right) \quad (3.110)$$

elde edilir. Burada ζ tek parçacık bölüşüm fonksiyonu olup aşağıdaki ifade ile verilir:

$$\zeta = \sum_{n,m,q} e^{-\left[(\alpha_H q)^2 + \left(\alpha_R \frac{x_{nm}}{\pi}\right)^2\right]} \quad (3.111)$$

Bütün kuantum halleri üzerinden toplayarak, silindirik bir domende tutuklanmış ideal Maxwell gazında yoğunluk dağılımı aşağıdaki gibi bulunur:

$$n(r, z) = \sum_{n,m,q} n_{nmq}(r, z) = \frac{2N}{\zeta \pi R^2 H} \sum_{n,m,q} e^{-\left[(\alpha_H q)^2 + \left(\alpha_R \frac{x_{nm}}{\pi}\right)^2\right]} \left[\frac{J_m\left(\frac{r}{R} x_{nm}\right)}{J_{m+1}(x_{nm})} \right]^2 \sin^2\left(\frac{\pi z}{H} q\right). \quad (3.112)$$

(3.111) denklemi için Poisson toplama formülünü kullanarak, $\{\alpha_R, \alpha_H\} \ll 1$ şartı altında ve α 'ların yüksek dereceden terimleri ihmal edilerek, bölüşüm fonksiyonu literatürdeki bir başka çalışmada aşağıdaki gibi verilir [45]:

$$\zeta \approx \frac{\pi^{5/2}}{8\alpha_R^2 \alpha_H} \left(1 - \frac{\alpha_R + \alpha_H}{\sqrt{\pi}}\right). \quad (3.113)$$

Denklem (3.113), denklem (3.116)'da kullanılarak boyutsuz yoğunluk ifadesi,

$$\tilde{n}(\tilde{r}, \tilde{z}) = \frac{n(r, z)}{n_{cl}} = \frac{f_r(\tilde{r}) f_z(\tilde{z})}{\left(1 - \frac{\alpha_R}{\sqrt{\pi}}\right) \left(1 - \frac{\alpha_H}{\sqrt{\pi}}\right)} = \tilde{n}_r(\tilde{r}) \tilde{n}_z(\tilde{z}) \quad (3.114)$$

şeklinde elde edilir. Bu ifadede $\tilde{r} = r/R$, $\tilde{z} = z/H$ ve $n_{cl} = N/\pi R^2 H$ klasik yoğunluk olup, $f_r(\tilde{r})$ ve $f_z(\tilde{z})$ fonksiyonları ise aşağıda tanımlanmıştır:

$$f_r(\tilde{r}) = \frac{4\alpha_R^2}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-\left(\alpha_R \frac{x_{nm}}{\pi}\right)^2} \left[\frac{J_m(x_{nm}\tilde{r})}{J_{m+1}(x_{nm})} \right]^2 \quad (3.115)$$

$$f_z(\tilde{z}) = \left(1 - e^{-(\tilde{z}/\alpha_H)^2}\right) \left(1 - e^{-[\pi(1-\tilde{z})/\alpha_H]^2}\right). \quad (3.116)$$

Sayısal hesaplamalar $\tilde{z} \rightarrow 1/2$ ve $\tilde{r} \rightarrow 0$ limit değerleri için f_r ve f_z fonksiyonlarının bir değerini aldığını göstermektedir. Buna göre dağılımların genlikleri aşağıdaki gibi elde edilir:

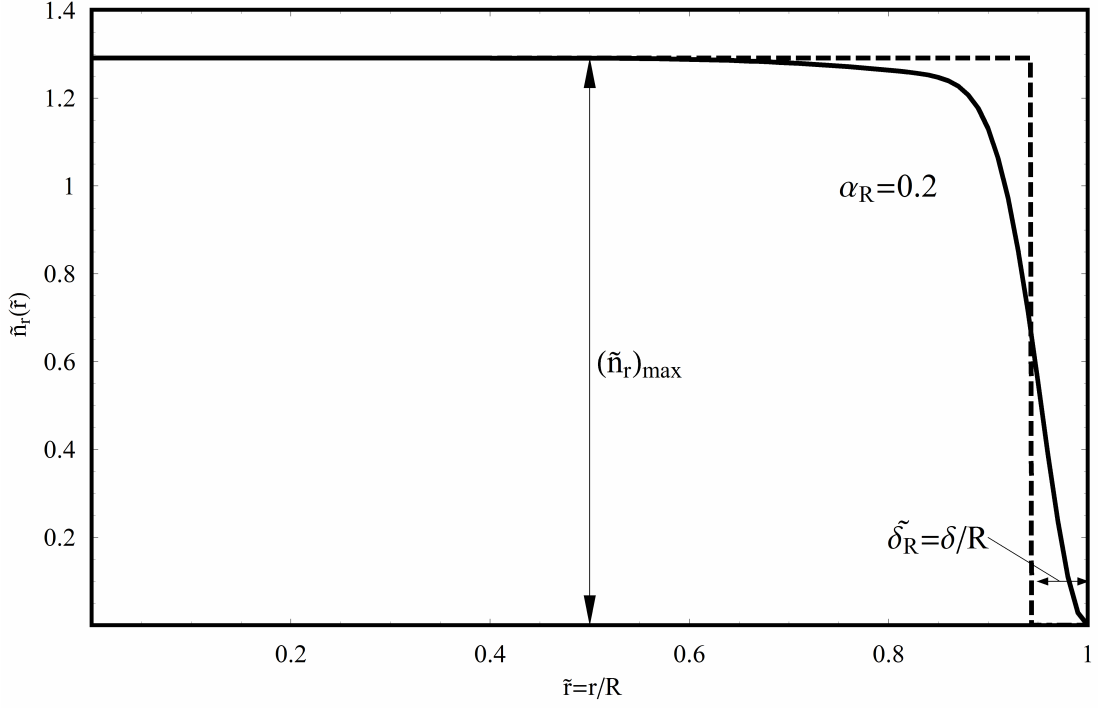
$$(\tilde{n}_r)_{\max} = \tilde{n}_r(\tilde{r} = 0) = \frac{1}{1 - \frac{\alpha_R}{\sqrt{\pi}}} \quad (3.117)$$

$$(\tilde{n}_z)_{\max} = \tilde{n}_z(\tilde{z} = 1/2) = \frac{1}{1 - \frac{\alpha_H}{\sqrt{\pi}}}. \quad (3.118)$$

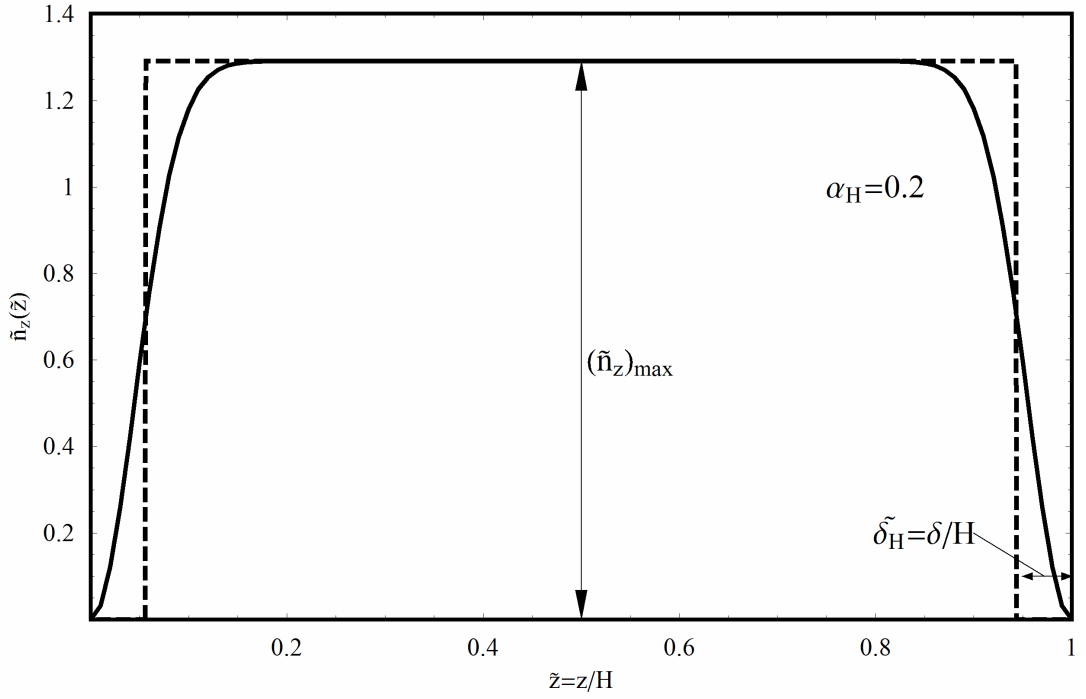
Gerçek dağılımın domen integrasyonu ise aşağıdaki gibi elde edilir:

$$\int_0^1 \int_0^1 2\pi\tilde{r}\tilde{n}_r(\tilde{r})\tilde{n}_z(\tilde{z})d\tilde{z}d\tilde{r} = \pi. \quad (3.119)$$

(3.114) ifadesinden elde edilen boyutsuz yoğunluğun radyal ve aksenal dağılımı sırasıyla Şekil 3.6 ve Şekil 3.7'de verilmektedir. Domen sınırlarındaki sınır tabakası nedeniyle parçacık yoğunluğunun domen sınırlarında sıfıra gittiği görülmektedir. Bu tabakanın kalınlığını hesaplamak amacıyla dikdörtgen ve küresel geometrilerde yapıldığı gibi dağılım basitleştirilmiş olarak bir adım fonksiyonuyla temsil edilebilir.



Şekil 3.6: Silindirik domende tutuklanmış ideal Maxwell gazının radyal yönde boyutsuz yoğunluk dağılımı.



Şekil 3.7: Silindirik domende tutuklanmış ideal Maxwell gazının aksenal yönde boyutsuz yoğunluk dağılımı.

Şekil 3.6 ve Şekil 3.7’de kesikli çizgi ile gösterilen adım fonksiyonu için domen integrasyonu aşağıdaki gibi verilir:

$$\int_0^{\tilde{R}_{eff}} \int_0^{\tilde{H}_{eff}} 2\pi \tilde{r} (\tilde{n}_r)_{\max} (\tilde{n}_z)_{\max} d\tilde{z} d\tilde{r} = \pi \tilde{R}_{eff}^2 H_{eff} \frac{1}{1 - \frac{\alpha_R}{\sqrt{\pi}}} \frac{1}{1 - \frac{\alpha_H}{\sqrt{\pi}}}. \quad (3.120)$$

(3.119) ve (3.120) denklemlerinin eşitliğinden hareket ederek domenin boyutsuzlaştırılmış etkin boyutları aşağıdaki gibi elde edilir:

$$\tilde{R}_{eff} \cong 1 - \frac{\alpha_R}{2\sqrt{\pi}}, \quad (3.121)$$

$$\tilde{H}_{eff} = 1 - \frac{\alpha_H}{\sqrt{\pi}}. \quad (3.122)$$

Şekil 3.6 ve Şekil 3.7 incelendiğinde boyutsuzlaştırılmış etkin yarıçap ve etkin yükseklik sırasıyla

$$\tilde{R}_{eff} = 1 - \tilde{\delta}_R, \quad (3.123)$$

$$\tilde{H}_{eff} = 1 - 2\tilde{\delta}_H \quad (3.124)$$

olarak yazılır. Denklem (3.121)-(3.124) göz önüne alındığında sınır tabaka kalınlıkları aşağıdaki gibi elde edilmiş olur:

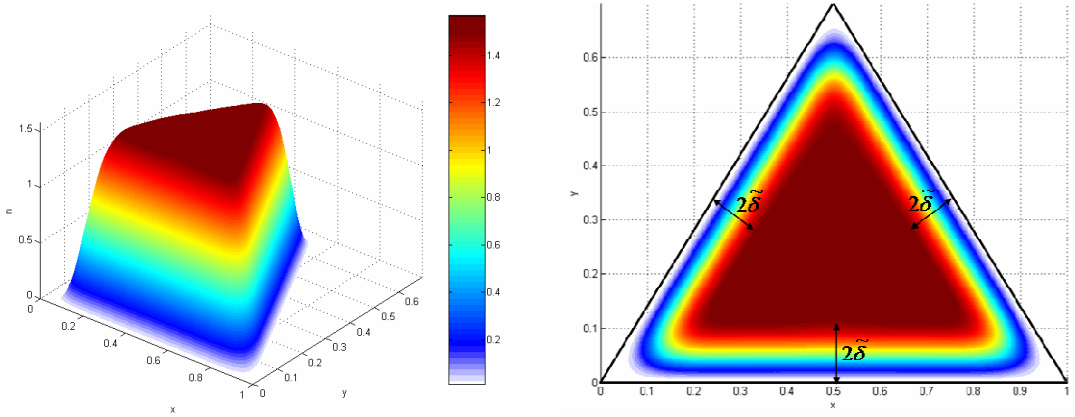
$$\delta_R = \frac{\lambda_T}{4}, \quad (3.125)$$

$$\delta_H = \frac{\lambda_T}{4}. \quad (3.126)$$

Sonuç olarak, yerel yoğunluk dağılımının farklı geometrilerdeki incelemeleri, dikdörtgen, küresel ya da silindirik domenlerde, Schrödinger denkleminin çözümünden gelen özdeğer ve özfonksiyonlar çok farklı olsalar dahi kuantum sınır tabakasının karakterinin değişmediği ve domenin şeklinden bağımsız olarak yüzeyi takip eden aynı kalınlıkta bir kuantum sınır tabakasının var olduğunu göstermektedir. Birbirinden oldukça farklı olan geometrilerde kuantum sınır tabakasının aynı kalınlıkta olması bunun genel bir sonuç olacağı düşüncesini şiddetle desteklemektedir.

3.2.1.4. Farklı Geometriye Sahip Domenlerde Tutuklanmış Maxwell Gazında Yerel Yoğunluk Dağılımı

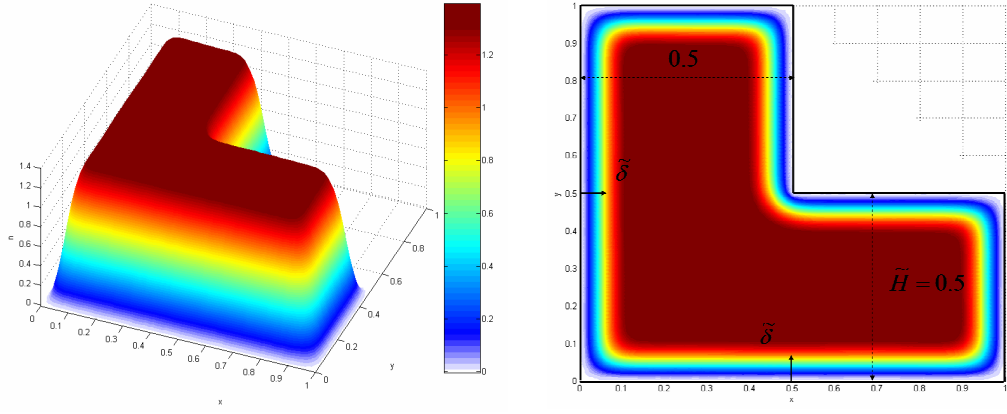
Schrödinger denkleminin enerji özdeğerlerini ve özfonksiyonlarını analitik olarak elde etmenin mümkün olmadığı domenlerde sınır tabakanın incelenebilmesi için bu alt bölümde yerel yoğunluk, Schrödinger denkleminin sayısal çözümünden elde edilen çok sayıdaki özdeğer ve özfonksiyon kullanılarak sayısal olarak hesaplanmıştır. Bu çalışma sırasında domenin boyutları genelde en büyük uzunluğuna bölünerek boyutsuzlaştırılmıştır. Şekil 3.8’de üçgen şekilli bir domende tutuklanmış bir ideal Maxwellian gazın yoğunluk dağılımı verilmektedir. Kuantum sınır tabakasının, aynı kalınlığını koruyarak, domenin yüzeyini takip ettiği ve köşe noktalarda yüzeyin keskin geçişlerini yumuşak bir biçimde izlediği görülmektedir.



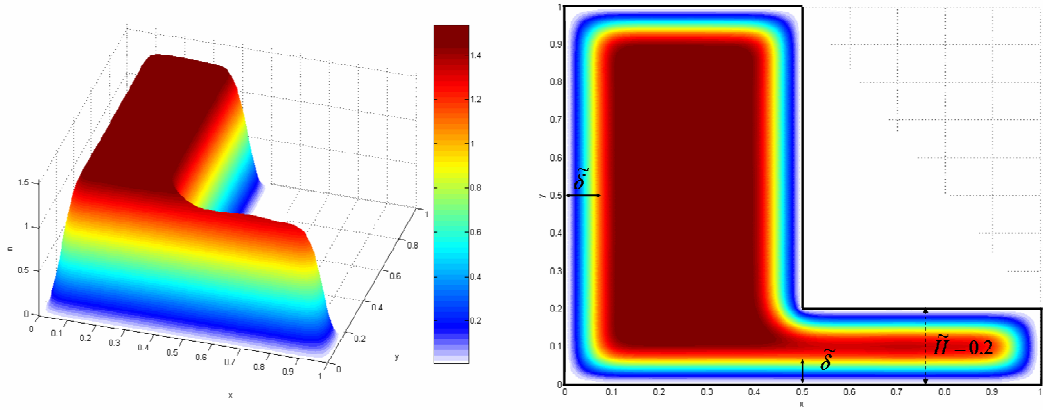
Şekil 3.8: Üçgen şekilli bir domende tutuklanmış ideal Maxwell gazının $\alpha=0.2$ için boyutsuz yoğunluk dağılımı.

Tek bölge düzenli geometrilerde olduğu gibi çok bölge düzensiz geometrilerde de kuantum sınır tabakasının karakterinin değişmediği aşağıdaki örnekler incelendiğinde görülmektedir. Şekil 3.9a, 9b, 9c ve 9d’de kuantum sınır tabakası kalınlığına, $\tilde{\delta}$, kıyasla farklı kanal yüksekliğine, \tilde{H} , sahip L-şekilli domenlerde yoğunluk dağılımı görülmektedir. Sınır tabakanın diğer şekillerde olduğu gibi yüzeyi takip ettiği, keskin köşeleri de yine eğrisel biçimde izlediği anlaşılmaktadır. $4\tilde{\delta} < \tilde{H}$ durumunda gazın kanal içerisinde de varlığını sürdürdüğü ve buradaki yerel yoğunluğun bağlantılı olduğu geniş bölgedeki yoğunlukla aynı olduğu da gözlenmektedir, Şekil 3.9a. $4\tilde{\delta} \cong \tilde{H}$ durumunda ise gazın kanal içerisindeki varlığı devam etmekle beraber buradaki yerel yoğunluğun geniş bölgedeki yoğunluktan daha küçük değerler almaya başladığı görülmektedir, Şekil 3.9b. $4\tilde{\delta} > \tilde{H}$ durumunda gazın kanal içerisinde neredeyse

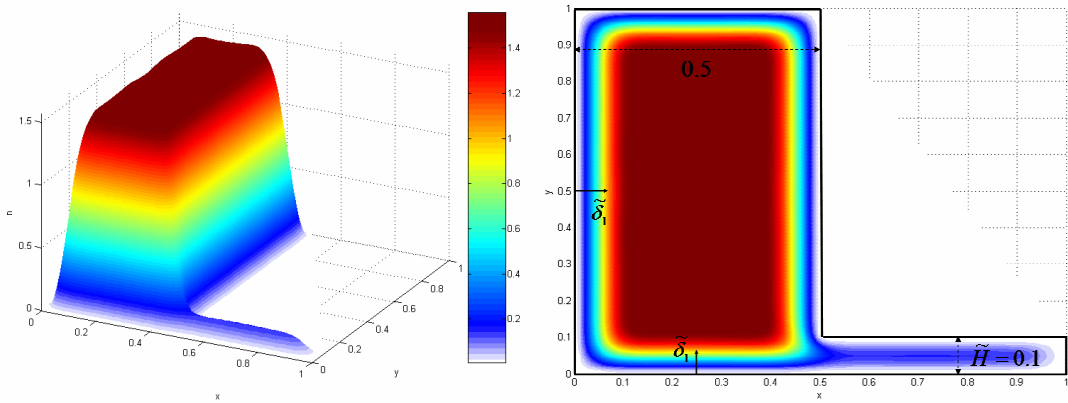
tamamen boşaldığı ve buradaki yerel yoğunluğun geniş bölgedeki yoğunluktan çok daha küçük değerler aldığı anlaşılmaktadır, Şekil 3.9c. Şekil 3.9d’de ise $4\tilde{\delta} \gg \tilde{H}$ olması nedeniyle dar bölgenin tümüyle boşaldığı gazın bu bölge hiç yokmuş gibi sadece geniş bölgeyi doldurduğu gözlenmektedir.



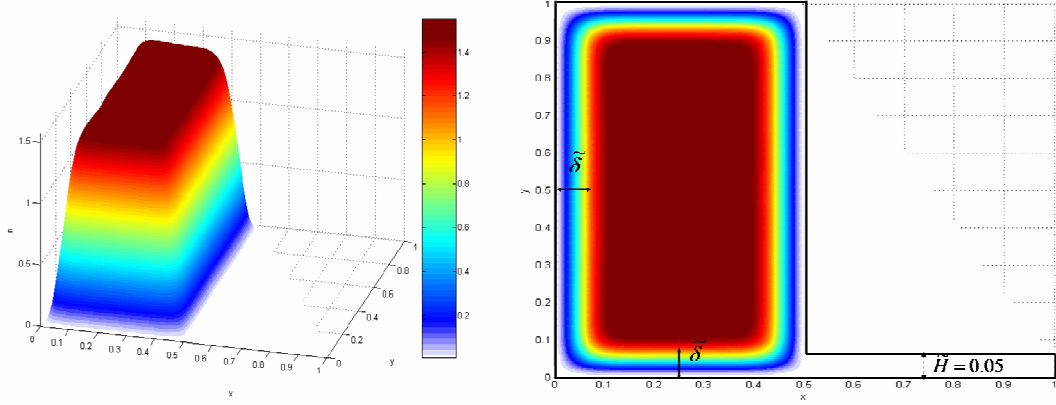
Şekil 3.9a: L-şekilli domende yoğunluk dağılımı, $4\tilde{\delta} < \tilde{H}$.



Şekil 3.9b: L-şekilli domende yoğunluk dağılımı, $4\tilde{\delta} \cong \tilde{H}$.

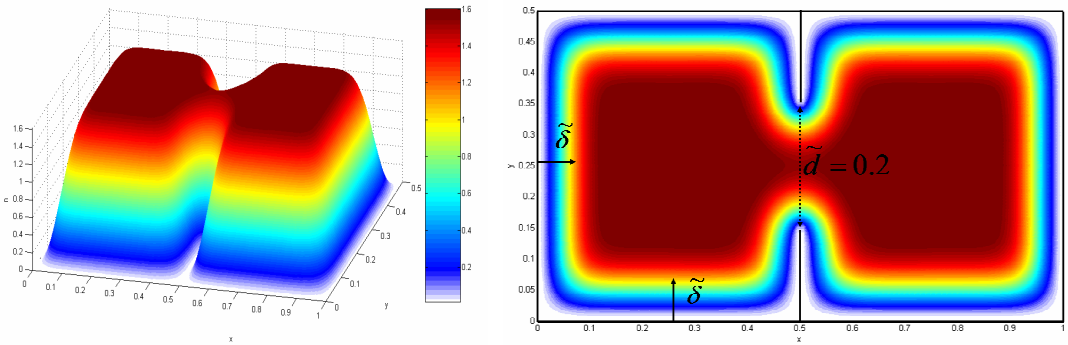


Şekil 3.9c: L-şekilli domende yoğunluk dağılımı, $4\tilde{\delta} > \tilde{H}$.

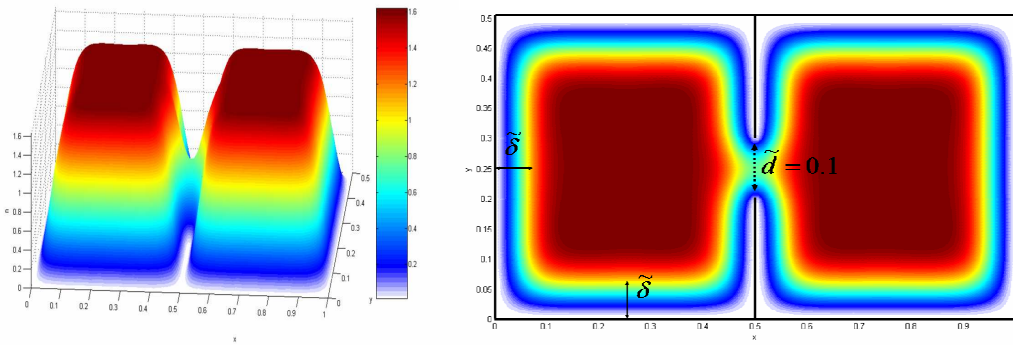


Şekil 3.9d L-şekilli domende yoğunluk dağılımı, $4\tilde{\delta} \gg \tilde{H}$.

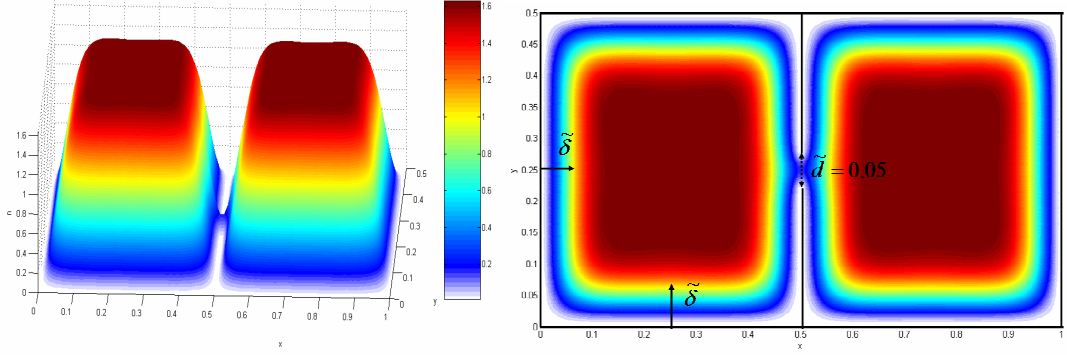
Şekil 3.10a, 10b ve 10c'de üzerinde delik bulunan bir perde yardımıyla birbirinden ayrılmış iki kare domendeki yoğunluk dağılımı görülmektedir. Kuantum sınır tabakasının kalınlığı ile delik çapı arasındaki büyüklük sıralamasının dağılımı nasıl değiştirdiği açıkça görülmektedir. Sınır tabakanın kalınlığından daha geniş olan bölgelerde tabakanın tüm yüzeyi takip ettiği, daha küçük olan bölgelerde ise tabakanın inceldiği ve nihayetinde pratik olarak koparak birbirine bağlı domenlerin iki ayrı bağımsız domenin yoğunluk dağılımına sahip olduğu anlaşılmaktadır.



Şekil 3.10a: Birbirine bağlı iki kare domende yoğunluk dağılımı, $4\tilde{\delta} > \tilde{d}$.

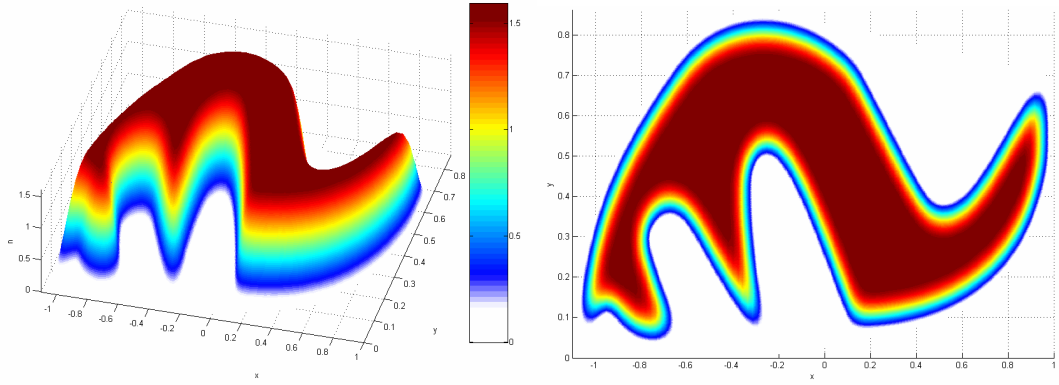


Şekil 3.10b: Birbirine bağlı iki kare domende yoğunluk dağılımı, $4\tilde{\delta} < \tilde{d}$.



Şekil 3.10c: Birbirine bağlı iki kare domende yoğunluk dağılımı, $4\tilde{\delta} \ll \tilde{d}$.

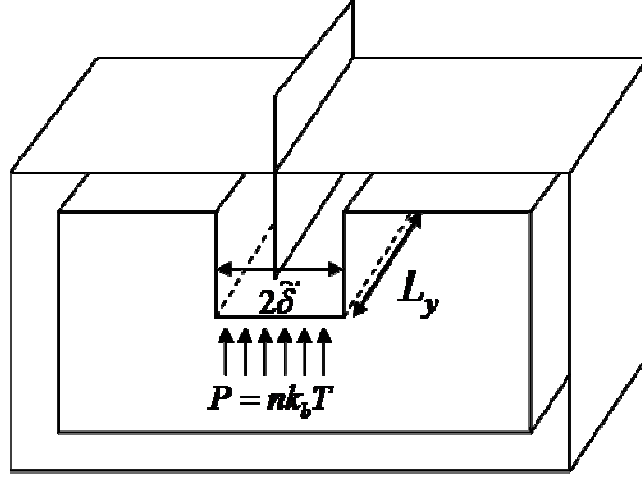
Yukarıda tek ve çok bölgeli fakat düzenli geometrilerde tutuklanmış ideal Maxwell gazlarının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımları verilmiştir. Şekil 3.11’de ise düzensiz bir domende tutuklanmış gazın yoğunluk dağılımı verilmektedir. Diğer şekillerde olduğu gibi sınır tabakanın yüzeyi takip ettiği açık olarak görülmektedir.



Şekil 3.11: Keyfi şekilli bir domende yoğunluk dağılımı.

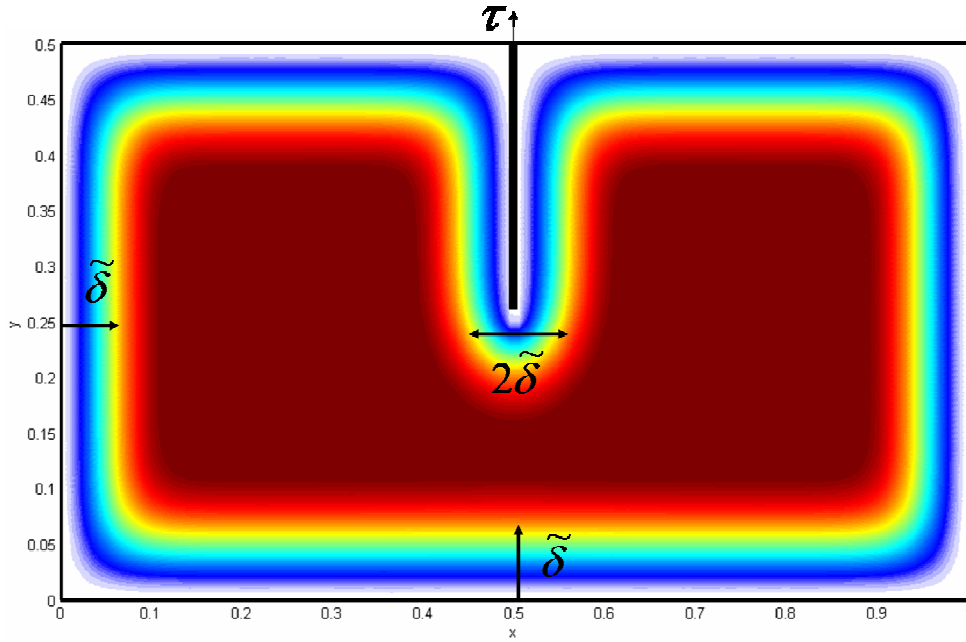
Sonuç olarak sayısal çözüm gerektiren şekle sahip domenlerdeki bu incelemeler, Maxwell gazında yerel yoğunluk dağılımının analitik çözümlerin yapılabildiği şekle sahip domenlerdeki yerel yoğunluk dağılımı ile aynı karakterde olduğu ve kuantum sınır tabakasının tüm geometrilerde yüzeyi takip ettiği, domenin, tabakanın kalınlığından küçük bölgelerinde ise yerel gaz yoğunluğunun düştüğü, çok küçük bölgelerin ise gazdan tamamen arındığı görülmüştür. Sınır tabaka kalınlığının tüm geometrilerde aynı olduğu böylelikle analitik çözümlerdeki sınır tabaka kalınlığını veren ifadenin genel bir ifade olduğu anlaşılmaktadır.

Kuantum sınır tabakasının varlığı Bölüm 3.1.1’de ele alınan ve Şekil 3.1’de temsili olarak gösterilerek denklem (3.24) ile verilen yanal kuvvetler için de çok daha net bir açıklama getirmektedir. Şekil 3.1’de resmedilen problem kuantum sınır tabakası göz önüne alınarak Şekil 3.12’de yeniden gösterilmiştir.



Şekil 3.12: Kuantum yüzey gerilimi nedeniyle hareketli duvar üzerinde oluşan yanıl kuvvetler.

Sıfır kalınlığa sahip hareketli bir duvar dahi kuantum sınır tabakası nedeniyle 2δ kalınlığına sahip bir duvar gibi işlev görmekte ve bu nedenle de söz konusu hareketli duvarın maruz kalacağı kuvvet basit bir şekilde normal kuvvetler yardımıyla $\tau = -p2\delta L_y = -n_{cl}k_b T 2\delta L_y = -n_{cl}k_b T L_y \lambda_T / 2$ olarak ifade edilebilir. Bu ifade (3.24) ifadesinin aynı olup, kuantum ölçek etkisi sonucu gazlarda ortaya çıkan yanıl kuvvetlerin mekanizmasını açıklamaktadır. Şekil 3.12’de gösterilen domenin iki boyutlu kesitinde yoğunluk dağılımı da Şekil 3.13’de görülmektedir.



Şekil 3.13: Hareketli bir duvar ile ikiye ayrılmış dikdörtgen kutuda ideal Maxwell gazının yerel yoğunluk dağılımı, $\alpha=0.2$.

3.2.2. Fermi Gazında Yerel Yoğunluk Dağılımı

İdeal bir Fermi gazı için, \mathbf{x} -konumunda merkezlenmiş bir dV differansiyel yerel hacmi içinde ve r kuantum halinde bulunan parçacıkların sayısı aşağıdaki gibi verilebilir:

$$dN_r = N \left[\frac{1}{\exp(-\Lambda + \varepsilon_r/k_b T) + 1} \right] \left[|\psi_r(\mathbf{x})|^2 dV \right]. \quad (3.127)$$

r kuantum haline sahip yerel parçacık yoğunluğu ise,

$$n_r(\mathbf{x}) = \frac{dN_r}{dV} = N \frac{|\psi_r(\mathbf{x})|^2}{\exp(-\Lambda + \varepsilon_r/k_b T) + 1} \frac{1}{\sum_r \frac{1}{\exp(-\Lambda + \varepsilon_r/k_b T) + 1}} \quad (3.128)$$

olarak yazılır. Bütün kuantum halleri üzerinden toplam alınarak, Fermi gazları için yerel yoğunluk,

$$n(\mathbf{x}) = \sum_r n_r(\mathbf{x}) = N \frac{\sum_r \frac{|\psi_r(\mathbf{x})|^2}{\exp(-\Lambda + \varepsilon_r/k_b T) + 1}}{\sum_r \frac{1}{\exp(-\Lambda + \varepsilon_r/k_b T) + 1}} \quad (3.129)$$

biçimde ifade edilir. Dikdörtgen bir domende Fermi gazının yerel yoğunluğu için analitik bir ifade elde edebilmek mümkün olacaktır. Analitik bir ifade fiziksel davranışın detayları ve yoğunluğun kontrol parametrelerine fonksiyonel bağımlılığı hakkında daha fazla bilgi taşıyacağı için önem taşımaktadır.

3.2.2.1. Dikdörtgen Domende Tutuklanmış Fermi Gazında Yerel Yoğunluk Dağılımı

Boyutları L_x , L_y ve L_z olan dikdörtgen bir domende tutuklanmış ideal Fermi gazının yoğunluk dağılımının belirlenebilmesi için denklem (3.129)'da verilen ε_r enerji özdeğerleri ve ψ_r özfonksiyonları dikdörtgen bir domen için sırasıyla denklem (2.16) ve denklem (3.56)'daki gibidir. Buradan hareketle (3.129) ifadesi aşağıdaki şekilde boyutsuz bir formda yazılabilir:

$$\tilde{n}(x, y, z) = \frac{n(\mathbf{x})}{N/V} = \frac{n(\mathbf{x})}{n_{cl}} = \frac{8 \sum_{\{i,j,k\}=1}^{\infty} \frac{\sin^2\left(\frac{\pi}{L_x} xi\right) \sin^2\left(\frac{\pi}{L_y} yj\right) \sin^2\left(\frac{\pi}{L_z} zk\right)}{\exp[-\Lambda + (\alpha_x i)^2 + (\alpha_y j)^2 + (\alpha_z k)^2] + 1}}{\sum_{\{i,j,k\}=1}^{\infty} \frac{1}{\exp[-\Lambda + (\alpha_x i)^2 + (\alpha_y j)^2 + (\alpha_z k)^2] + 1}}. \quad (3.130)$$

(3.130) ifadesinin analitik olarak hesaplanabilmesi için tek boyutlu formu esas alınmalıdır. Kuantum sınır tabakasının ve yoğunluk dağılımının tek boyutlu domende tutuklanmış Maxwell gazındaki karakteri ile, 2 ve 3-boyutlu dikdörtgen ve hatta keyfi şekilli domenlerde tutuklanmış gazlardaki karakterinin aynı olduğunun önceki bölümde bulunmuş olması, burada da tek boyutlu inceleme ile elde edilecek karakterin daha yüksek boyutlu ve hatta keyfi şekillerde de aynı kalacağı düşüncesini beslemektedir. Bu aşamada tek boyut için elde edilen sonuçlar, tezin bir sonraki alt bölümünde daha yüksek boyutlu ve karmaşık geometriler için yapılan sayısal çözümlerinin sonuçları ile karşılaştırılarak test edilmiş ve bu düşüncenin doğruluğu gösterilmiştir. Denklem (3.130) bir boyut için aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$\tilde{n}(x) = \frac{2 \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\sin^2\left(\frac{\pi x}{L_x} i\right)}{\exp[-\Lambda + (\alpha_x i)^2] + 1}}{\sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{\exp[-\Lambda + (\alpha_x i)^2] + 1}}. \quad (3.131)$$

(3.131) ifadesinin dahi analitik çözümü ancak şiddetli dejenere Fermi gazları için elde edilebilir. Buna göre Poisson toplama formülü kullanılarak denklem (3.131)'de paydadaki terim aşağıdaki gibi hesaplanabilir:

$$\sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{\exp[-\Lambda + (\alpha_x i)^2] + 1} = -\frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha_x} Li_{1/2}[-e^{\Lambda}] - \frac{1}{2} \frac{1}{\exp[-\Lambda] + 1}. \quad (3.132)$$

Denklem (3.131)'in payı ise $\Lambda \rightarrow \infty$ (şiddetli dejenere) şartı altında aşağıdaki gibi hesaplanır:

$$\sum_{i=1}^{\infty} \frac{\sin^2\left(\frac{\pi x}{L_x} i\right)}{\exp[-\Lambda + (\alpha_x i)^2] + 1} \xrightarrow{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{\sqrt{\Lambda}}{2\alpha_x} \left[1 - \frac{\alpha_x}{2\pi\sqrt{\Lambda}} \frac{L_x}{x} \sin\left(\frac{2\pi\sqrt{\Lambda}}{\alpha_x} \frac{x}{L_x}\right) \right] \left[1 - \frac{\alpha_x}{2\pi\sqrt{\Lambda}} \frac{L_x}{L_x - x} \sin\left(\frac{2\pi\sqrt{\Lambda}}{\alpha_x} \frac{L_x - x}{L_x}\right) \right]. \quad (3.133)$$

Şiddetli dejenerasyon koşullarında polilogaritmik fonksiyonların Ek-B’de verilen asimptotik değerleri kullanılarak (3.132) ifadesi aşağıdaki gibi yeniden yazılır:

$$\frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha_x} Li_{1/2}(e^\Lambda) - \frac{1}{2} \frac{1}{e^{-\Lambda} + 1} \rightarrow \frac{\sqrt{\Lambda}}{\alpha_x} - \frac{1}{2}. \quad (3.134)$$

(3.133) ve (3.134) ifadeleri kullanılarak denklem (3.131) ile verilen boyutsuz yoğunluk dağılımı ifadesi,

$$\tilde{n}(\tilde{x}) = \frac{n(\tilde{x})}{n_{cl}} = \frac{\left[1 - \frac{\alpha_x^F}{2\pi} \frac{1}{\tilde{x}} \sin\left(\frac{2\pi}{\alpha_x^F} \tilde{x}\right) \right] \left[1 - \frac{\alpha_x^F}{2\pi} \frac{1}{1-\tilde{x}} \sin\left(\frac{2\pi}{\alpha_x^F} (1-\tilde{x})\right) \right]}{1 - \frac{\alpha_x^F}{2}} \quad (3.135)$$

olarak elde edilir. Bu ifadeye $\tilde{x} = x/L_x$ olup, α_x^F ise aşağıdaki gibi tanımlıdır:

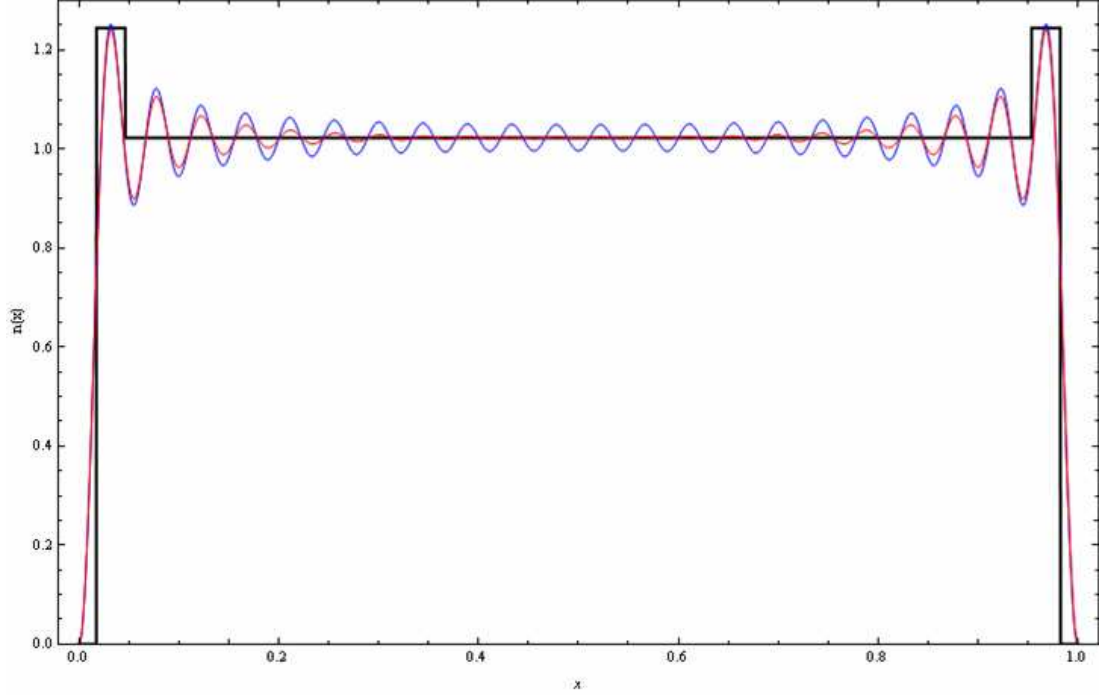
$$\alpha_x^F = \frac{\alpha_x}{\sqrt{\Lambda_F}} = \frac{\lambda_T \sqrt{\pi}}{2L_x \sqrt{\Lambda_F}} = \frac{\lambda_T^F \sqrt{\pi}}{2L_x}. \quad (3.136)$$

Burada $\lambda_T^F = \lambda_T / \sqrt{\Lambda_F}$ şeklindedir.

Buna göre (3.135) ifadesi aşağıdaki şekilde yeniden yazılabilir:

$$\tilde{n} = \frac{n(x)}{n_{cl}} = \frac{\left[1 - \frac{\lambda_T^F}{4\sqrt{\pi}} \frac{1}{x} \sin\left(\frac{4\sqrt{\pi}}{\lambda_T^F} x\right) \right] \left[1 - \frac{\lambda_T^F}{4\sqrt{\pi}} \frac{1}{L_x - x} \sin\left(\frac{4\sqrt{\pi}}{\lambda_T^F} (L_x - x)\right) \right]}{1 - \frac{\lambda_T^F \sqrt{\pi}}{4L_x}}. \quad (3.137)$$

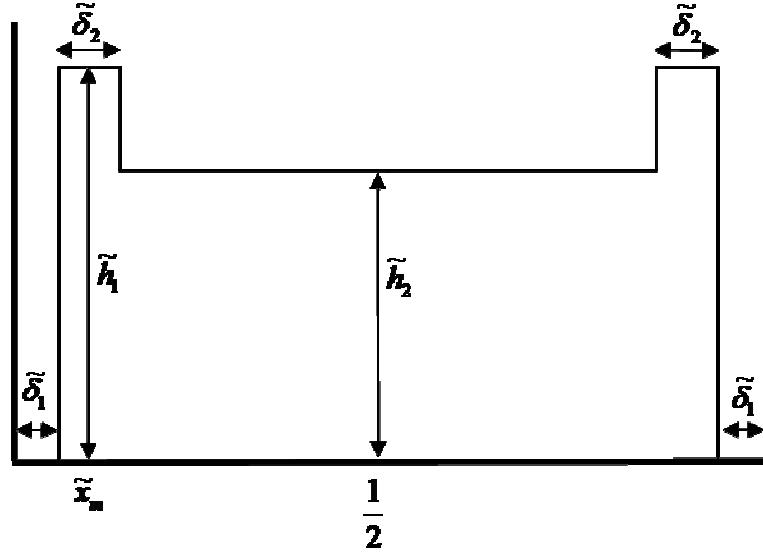
Denklem (3.131) ile verilen yoğunluk dağılımı ifadesi, sayısal olarak yüksek doğrulukta hesaplanarak Şekil 3.14’de kırmızı çizgi ile verilmiştir. Mavi çizgi ise, şiddetli dejenerasyon koşulu altında analitik olarak elde edilen (3.135) ifadesiyle verilen dağılımı göstermektedir.



Şekil 3.14: Dejenere Fermi gazında yerel yoğunluk dağılımı, $\alpha^F=0.2$, $\Lambda=20$.

Grafik için kullanılan Λ değeri çok büyük olmamasına (dejenerasyonun çok şiddetli olmamasına) karşın analitik ifade, domen sınırlarına yakın bölgelerde gerçek dağılımı oldukça iyi bir şekilde temsil edebilmektedir. Diğer taraftan domenin orta bölgelerinde, gerçek dağılımdaki salınımlar hızla sönerken analitik ifadenin temsil ettiği dağılımda bu sönüm aynı hızda olmamakta bununla birlikte salınının ortalama değeri, gerçek dağılımdaki ile birebir aynı değeri almaktadır.

Şekil 3.14'de kırmızı çizgi ile verilen gerçek dağılımı karakterize edebilmek için, şekilde siyah çizgi ile verilen yerel olarak homojenize edilmiş yoğunluk dağılımından hareket edilebilir. Gerçek ve basitleştirilmiş dağılımların domen integrallerinin aynı olması ve büyük genlikli ilk salınım ile daha sonraki salınımların sönerek yakınsadığı değer de aynı olması, basitleştirilmiş dağılımı kullanabilmenin koşullarıdır. Bu koşullar kullanılarak, basitleştirilmiş yoğunluk dağılımı Şekil 3.15'de dağılımı karakterize eden büyüklüklerle, daha detaylı bir biçimde verilmektedir.



Şekil 3.15: Dejenere Fermi gazında yerel yoğunluk dağılımı için basitleştirilmiş dağılım.

Basitleştirilmiş dağılımın $\tilde{\delta}_1$, $\tilde{\delta}_2$, \tilde{h}_1 ve \tilde{h}_2 karakteristikleri aşağıda hesaplanmıştır.

Domen integralinin bire eşit olması zorunluluğundan,

$$(1 - 2\tilde{\delta}_1)\tilde{h}_2 + 2\tilde{\delta}_2(\tilde{h}_1 - \tilde{h}_2) = 1 \quad (3.138)$$

yazılabilir. Ayrıca,

$$\tilde{\delta}_1 = \tilde{x}_m - \frac{\tilde{\delta}_2}{2} \quad (3.139)$$

olduğundan (3.138)'den

$$\tilde{\delta}_2 = \frac{1 - (1 - 2\tilde{x}_m)\tilde{h}_2}{2\tilde{h}_1 - \tilde{h}_2} \quad (3.140)$$

olarak elde edilir. \tilde{x}_m ise (3.135) ifadesinin \tilde{x} 'ya göre türevi sifira eşitlenerek elde edilen denklemin en küçük kökü olarak bulunur. $\tilde{h}_1 = n(\tilde{x}_m)$ ve $\tilde{h}_2 = n(1/2)$ şeklinde elde edilir. Bu işlemler sonucunda,

$$\tilde{h}_1 = \frac{1.2172}{1 - \frac{\alpha_x^F}{2}} \quad (3.141)$$

$$\tilde{h}_2 = \frac{1}{1 - \frac{\alpha_x^F}{2}} \quad (3.142)$$

$$\tilde{\delta}_1 = \alpha_x^F 0.3909 \quad (3.143)$$

$$\tilde{\delta}_2 = \alpha_x^F 0.6485 \quad (3.144)$$

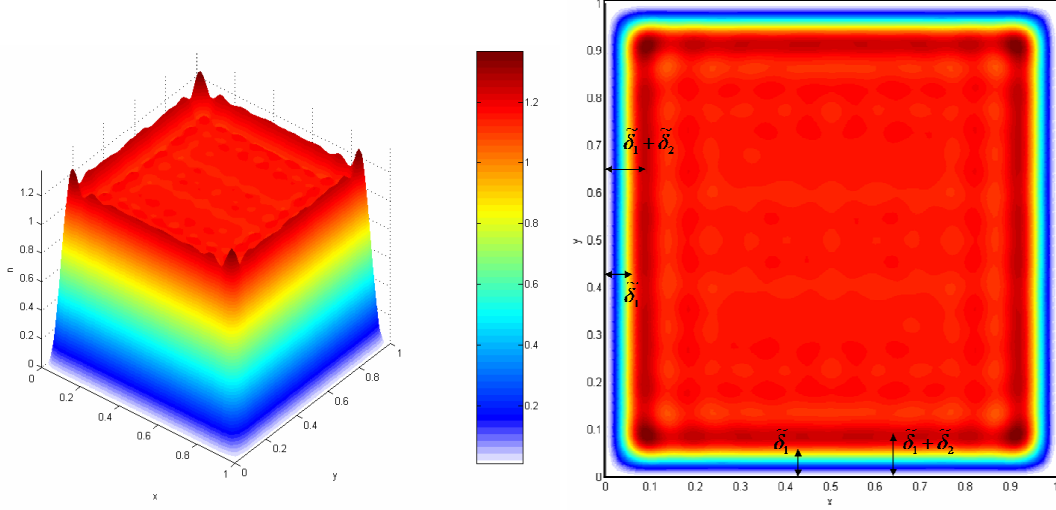
olarak bulunur. Şekil 3.14'deki dağılım termodinamik denge durumunda Fermi tipi ideal gazların dağılımının homojen olmaması bir yana yoğunlukta salınımlar olacağını da göstermektedir. Öte yandan homojen olmayan bu durumu ve salınımların karakteristiklerini temsil eden (3.141)-(3.144) ifadeleri makro ölçekte bu sıra dışı davranışların bir önemini olmayacağını ve ancak nano ölçekte önem kazanacağını anlatmaktadır. 3 boyutlu domende de her bir doğrultu için benzer dağılımlar ve bağıntılar elde edilir. Dejenere Fermi gazındaki bu salınımlar, özellikle elektronların safsızlıklardan olan saçılmaları nedeniyle oluşan Friedel salınımları ile benzer bir temele sahiptir [92-94]. Çünkü sistemin ötelemeye karşı invaryant olmaması Friedel salınımlarının temel sebebini oluşturur. Burada parçacığın saçılması safsızlık yerine sınırlardan olmaktadır.

3.2.2.2. Farklı Geometriye Sahip Domenlerde Tutuklanmış Fermi Gazında Yerel Yoğunluk Dağılımı

Tek boyutlu bir domende ideal Fermi gazlarının yerel yoğunluk dağılımına ilişkin önceki alt bölümde yapılan bu incelemeden sonra aşağıda bazı tek ve çok bölgeli ve düzenli ve düzensiz geometrilerde ideal Fermi gazlarının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımları (3.129) ifadesi ile hesaplanmış ve incelenmiştir. Bu sonuçlar Schrödinger denkleminin ilgili domenlerdeki çözümlerinden elde edilen özdeğer ve özfonksiyonların (3.129) ifadesinde kullanılmasıyla elde edilmiş ve klasik yoğunluğa bölünerek boyutsuzlaştırılmışlardır. Hesaplamalar sırasında $\alpha = 0.2$ olarak alınmış olup, dejenerasyon koşullarını sağlamak amacıyla $\Lambda = 5$ değeri kullanılmıştır.

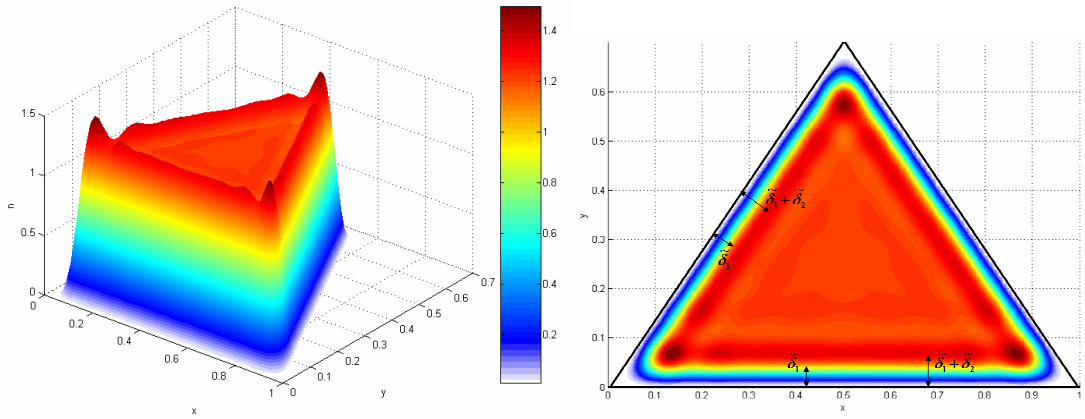
Şekil 3.16'da kare domen için yoğunluk dağılımı verilmiştir. Kuantum sınır tabakasının yüzeyden dik mesafeyle değişiminin tek boyutta elde edilen analitik çözümün öngördüğü şekilde olduğu açık olarak görülmektedir. Kare domen için 2-boyutlu yoğunluk dağılımının her bir doğrultu için geçerli olan tek boyutlu yoğunluk

dağılımlarının çarpımları ile elde edilebileceği anlaşılmaktadır. Köşelerde oluşan kuvvetli piklerin nedeni de her bir doğrultuya ait köşe piklerinin çarpımı ile açıklanabilir. Ayrıca analitik modelle öngörülen yoğunluk salınımları da açık olarak gözlenmektedir.



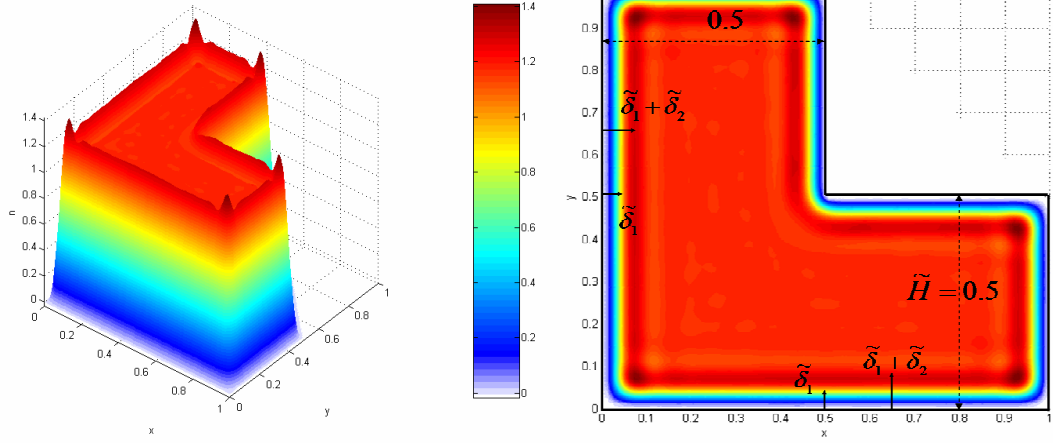
Şekil 3.16: Kare domende dejenere Fermi gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı.

Şekil 3.17’de ise benzer davranışlar üçgen geometri için de görülmektedir. Kuantum sınır tabakasının domenin keskin noktalarında yoğunluk piklerine yol açtığı görülmektedir.

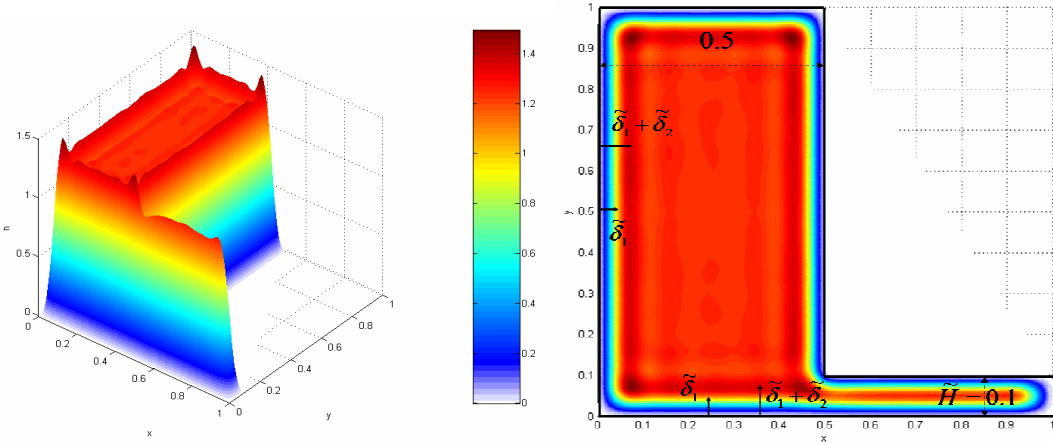


Şekil 3.17: Üçgen domende dejenere Fermi gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı.

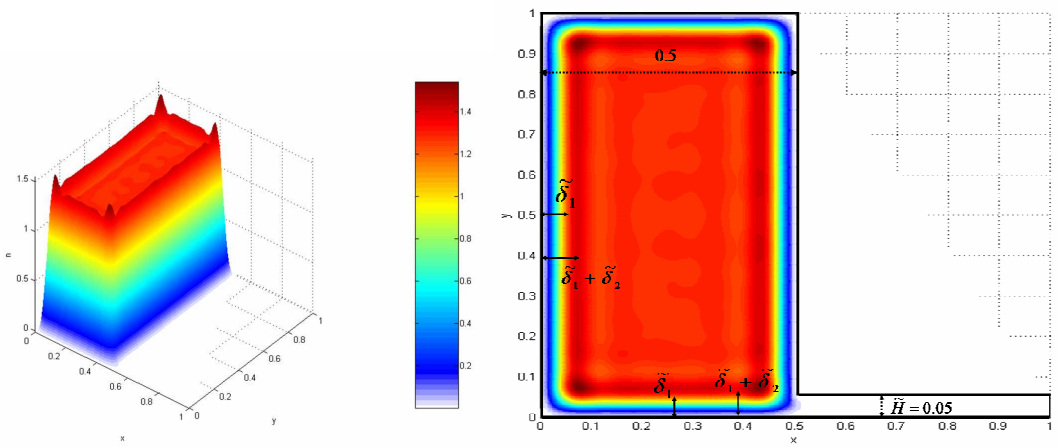
Şekil 3.18a, 18b ve 18c’de farklı kanal yüksekliğine, \tilde{H} , sahip L-şekilli domenlerde yoğunluk dağılımı görülmektedir. Kanal yüksekliği sınır tabaka kalınlığına kıyasla küçük kaldığında, gazın Maxwell gazında olduğu gibi, ortamı terk ettiği anlaşılmaktadır.



Şekil 3.18a: L-şekilli domende dejenerere Fermi gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $5(\tilde{\delta}_1 + \tilde{\delta}_2) \cong \tilde{H}$.

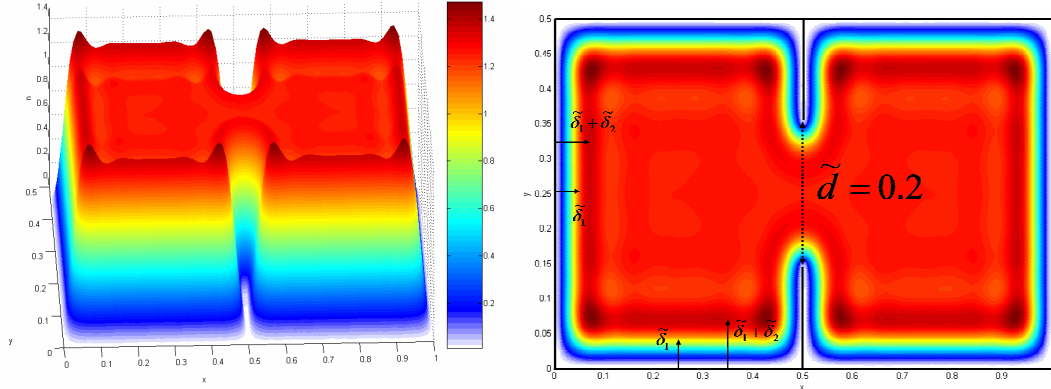


Şekil 3.18b: L-şekilli domende dejenerere Fermi gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $(\tilde{\delta}_1 + \tilde{\delta}_2) \cong \tilde{H}$.

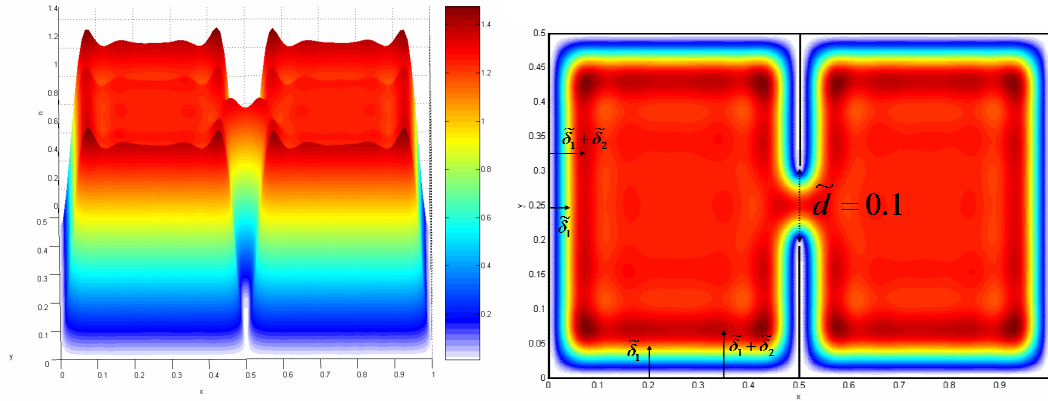


Şekil 3.18c: L-şekilli domende dejenerere Fermi gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $(\tilde{\delta}_1 + \tilde{\delta}_2) \cong 2\tilde{H}$.

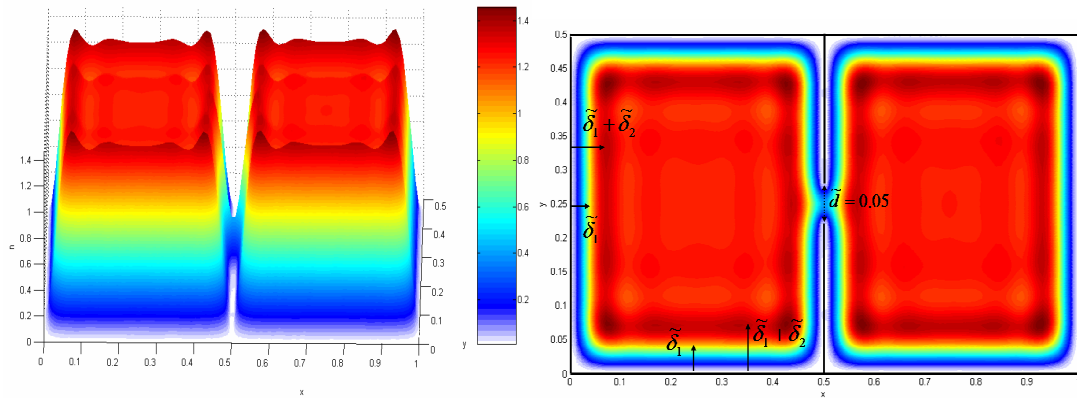
Birbirine bağıli kare kutular örneđi Őekil 3.19a, 19b ve 19c'de ve keyfi geometrideki yođunluk dađılımını da Őekil 3.20'de verilmiŐtir.



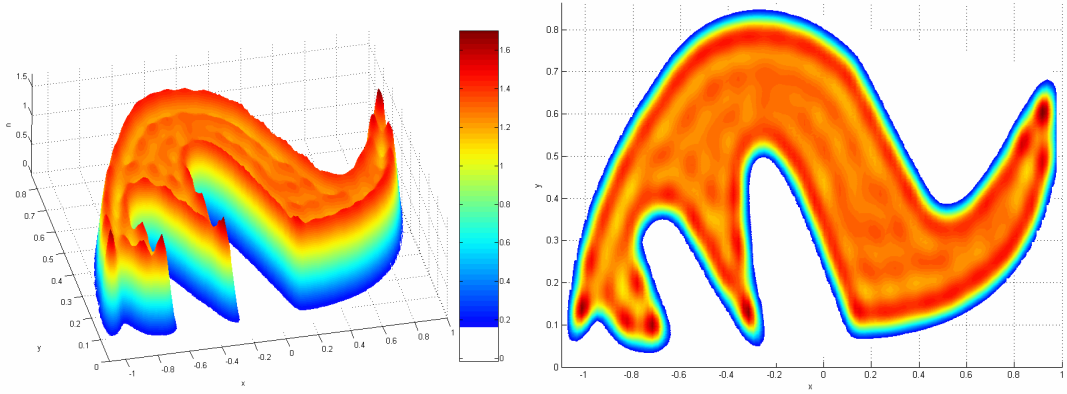
Őekil 3.19a: Birbirine bağıli iki kare domende dejenere Fermi gazının boyutsuz yerel yođunluk dađılımını, $2(\tilde{\delta}_1 + \tilde{\delta}_2) \cong \tilde{d}$.



Őekil 3.19b: Birbirine bağıli iki kare domende dejenere Fermi gazının boyutsuz yerel yođunluk dađılımını, $(\tilde{\delta}_1 + \tilde{\delta}_2) \cong \tilde{d}$.



Őekil 3.19c: Birbirine bağıli iki kare domende dejenere Fermi gazının boyutsuz yerel yođunluk dađılımını, $(\tilde{\delta}_1 + \tilde{\delta}_2) \cong 2\tilde{d}$.



Şekil 3.20: Keyfi şekilli bir domende dejenere Fermi gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı.

3.2.3. Bose Gazında Yerel Yoğunluk Dağılımı

Bose gazında yerel yoğunluk dağılımı,

$$n(\mathbf{x}) = \sum_r n_r(\mathbf{x}) = N \frac{\sum_r \frac{|\psi_r(\mathbf{x})|^2}{\exp(-\Lambda + \varepsilon_r/k_b T) - 1}}{\sum_r \frac{1}{\exp(-\Lambda + \varepsilon_r/k_b T) - 1}} \quad (3.145)$$

ile ifade edilir. Bose gazının yerel yoğunluğu için analitik bir ifade ancak dikdörtgen bir domen için mümkün olacaktır. Analitik bir ifade ile yoğunluğun kontrol parametrelerine fonksiyonel bağımlılığı elde edilmiş olacaktır.

3.2.3.1. Dikdörtgen Domende Tutuklanmış Bose Gazında Yerel Yoğunluk Dağılımı

Dikdörtgen domende tutuklu bir ideal Bose gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı denklem (2.16) ve (3.56) yardımıyla aşağıdaki yazılır:

$$\tilde{n}(x, y, z) = \frac{n(x, y, z)}{N/V} = \frac{n(x, y, z)}{n_{cl}} = \frac{8 \sum_{\{i,j,k\}=1}^{\infty} \frac{\sin^2\left(\frac{\pi}{L_x} xi\right) \sin^2\left(\frac{\pi}{L_y} yj\right) \sin^2\left(\frac{\pi}{L_z} zk\right)}{\exp[-\Lambda + (\alpha_x i)^2 + (\alpha_y j)^2 + (\alpha_z k)^2] - 1}}{\sum_{\{i,j,k\}=1}^{\infty} \frac{1}{\exp[-\Lambda + (\alpha_x i)^2 + (\alpha_y j)^2 + (\alpha_z k)^2] - 1}} \quad (3.146)$$

Dejenere Fermi gazında olduğu gibi Bose gazında da tek boyutlu bir domendeki çözüm 3-boyutlu domendeki çözüm için bir temel oluşturur. Tek boyutlu uzayda bu ifade aşağıdaki gibidir:

$$\tilde{n}(x) = \frac{2 \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\sin^2\left(\frac{\pi}{L_x} xi\right)}{\exp[-\Lambda + (\alpha_x i)^2] - 1}}{\sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{\exp[-\Lambda + (\alpha_x i)^2] - 1}}. \quad (3.147)$$

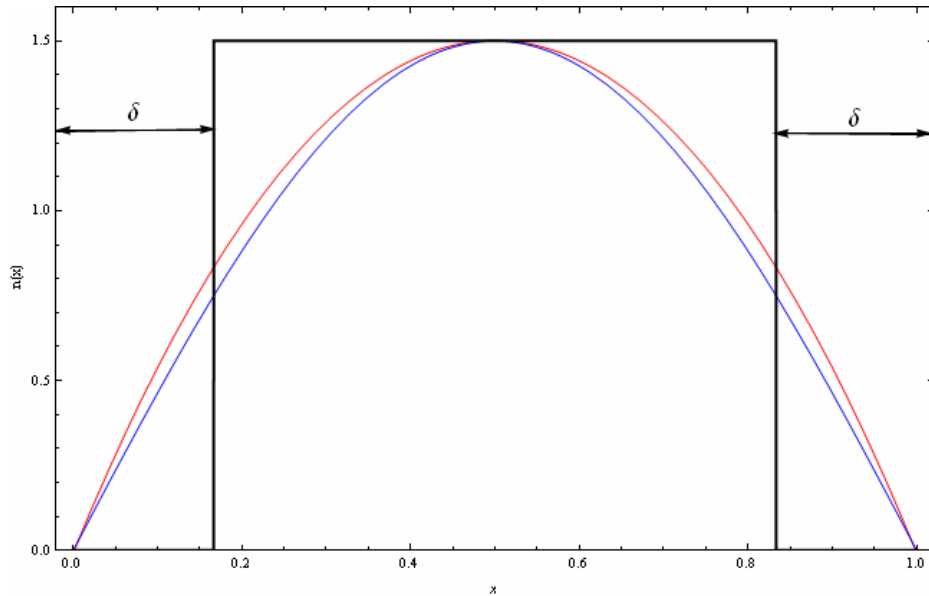
Denklem (3.147), ancak dejenere Bose gazları için analitik bir ifadeye dönüşür. Buna göre Poisson toplama formülü kullanılarak denklem (3.147)'de paydadaki terim aşağıdaki gibi hesaplanabilir:

$$\sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{\exp[-\Lambda + (\alpha_x i)^2] - 1} = -\frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha_x} Li_{1/2}[e^{\Lambda}] - \frac{1}{2} \frac{1}{\exp[\Lambda] + 1}. \quad (3.148)$$

Buradan hareketle denklem (3.147) ile verilen boyutsuz yoğunluk dağılımı, $\Lambda \rightarrow 0$ (şiddetli dejenere) şartı altında,

$$\tilde{n}(\tilde{x}) = \frac{3}{2} \sin(\pi \tilde{x}) \quad (3.149)$$

olarak elde edilir. Denklem (3.147) ile verilen yoğunluk dağılımı ifadesi, sayısal olarak yüksek doğrulukta hesaplanarak Şekil 3.21'de kırmızı çizgi ile verilmiştir. Mavi çizgi ise, şiddetli dejenere koşulu altında analitik olarak elde edilen (3.149) ifadesiyle verilen dağılımı temsil etmektedir.



Şekil 3.21: Dejenere Bose gazında yerel yoğunluk dağılımı, $\alpha=0.01$, $\Lambda=-10^{-6}$.

Gerçek dağılımın karakteristiklerini analitik olarak ifade edebilmek amacıyla, genliği ve domen integrali gerçek dağılıminkine eşit olan homojenize dağılım ise Şekil 3.21’de siyah çizgiyle gösterilmektedir. Kuantum sınır tabakası kalınlığını tanımlama olanağı sağlayan bu basitleştirilmiş homojen dağılımda tabaka kalınlığı,

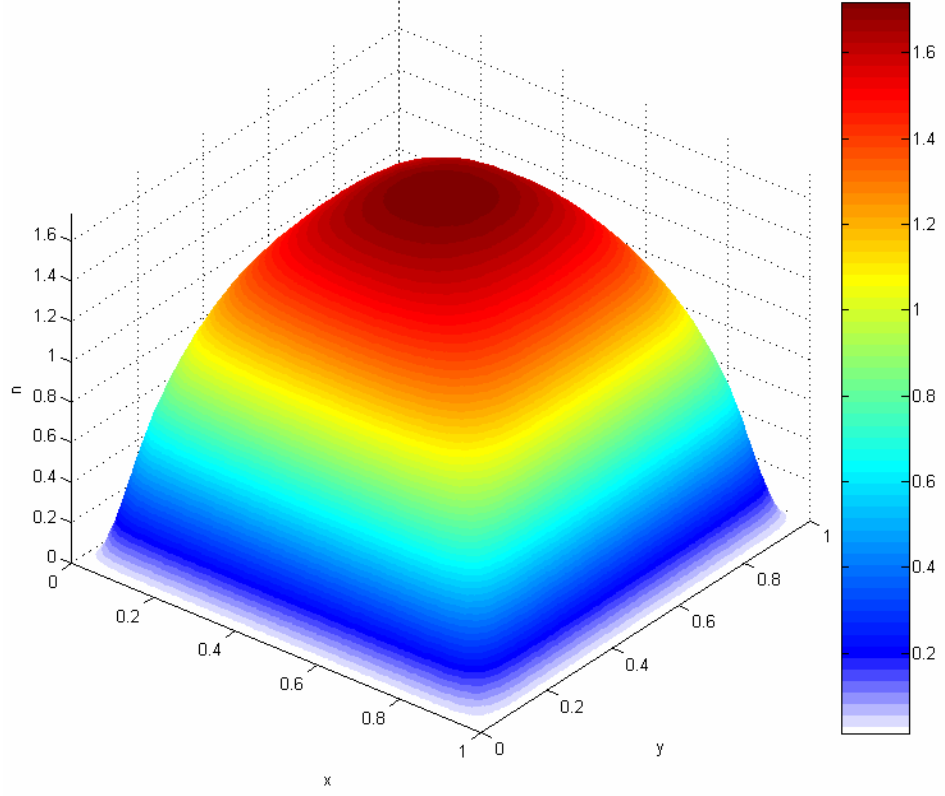
$$\tilde{\delta} = \frac{\delta}{L_x} = \frac{1}{6} \quad (3.150)$$

olarak elde edilir.

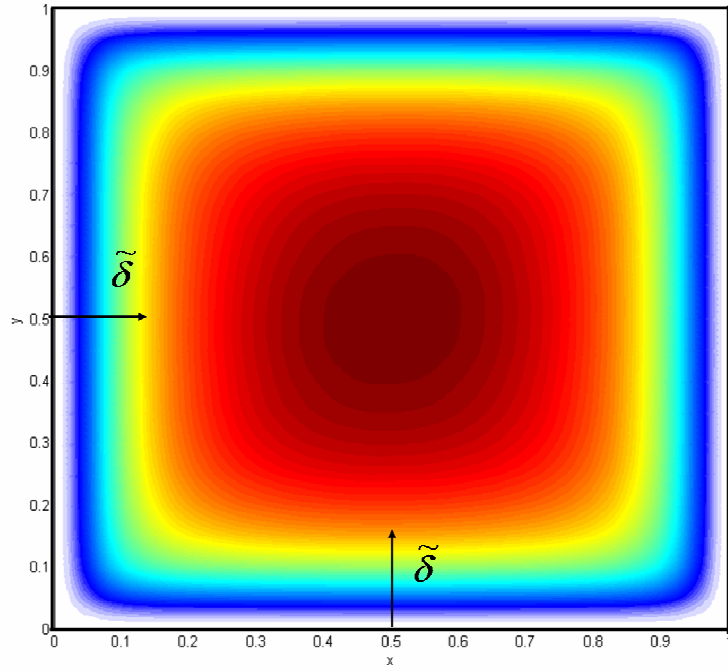
3.2.3.2. Farklı Geometriye Sahip Domenlerde Tutuklanmış Bose Gazında Yerel Yoğunluk Dağılımı

Tek boyutlu domen için yapılan yukarıdaki incelemeden sonra Fermi ve Maxwell gazında olduğu gibi, bazı tek ve çok bölgeli ve düzenli ve düzensiz geometrilere tutuklanmış ideal Bose gazlarının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımları (3.145) ifadesi ile hesaplanmış ve incelenmiştir. Bu sonuçlar yine Schrödinger denkleminin ilgili domenlerdeki sayısal çözümlerinden elde edilen özdeğer ve özfonksiyonların (3.145) ifadesinde kullanılmasıyla elde edilmiş ve klasik yoğunluğa bölünerek boyutsuzlaştırılmışlardır. Hesaplamalar sırasında $\alpha = 0.2$ olarak alınmış olup, dejenerasyon koşullarını sağlamak amacıyla $\Lambda = -0.01$ değeri kullanılmıştır.

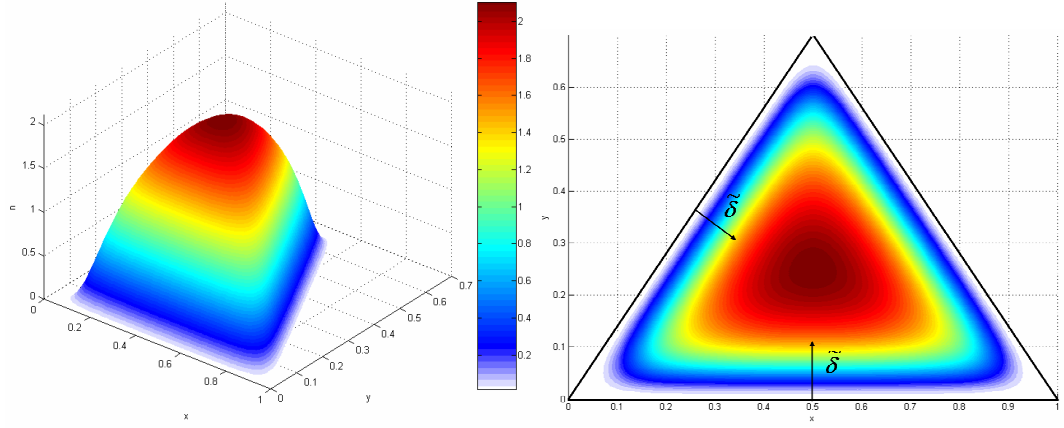
Sayısal hesaplamalar sonucu kare domen için bulunan boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı Şekil 3.22 ve Şekil 3.23’de görülmektedir. Kuantum sınır tabakasının yüzeyden dik mesafeye değişiminin, tek boyutta analitik çözümün öngördüğü biçimde olduğu ve dağılımın Şekil 3.21’de görülen dağılıma sahip olduğu anlaşılmaktadır. Böylece kare domen için yoğunluk dağılımının, her bir doğrultu için geçerli olan tek boyutlu yoğunluk dağılımlarının çarpımları ile elde edilebileceği anlaşılmaktadır. Şekil 3.24’de ise benzer durum üçgen geometri için görülmektedir.



Şekil 3.22: Kare domende dejenere Bose gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı.

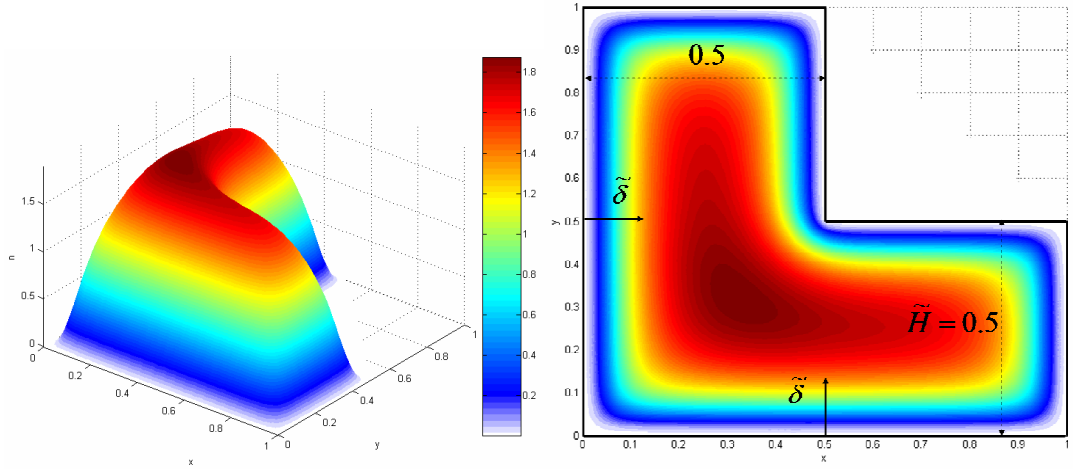


Şekil 3.23: Şekil 3.22'nin ve kuantum sınır tabakalarının üstten görünüşü.

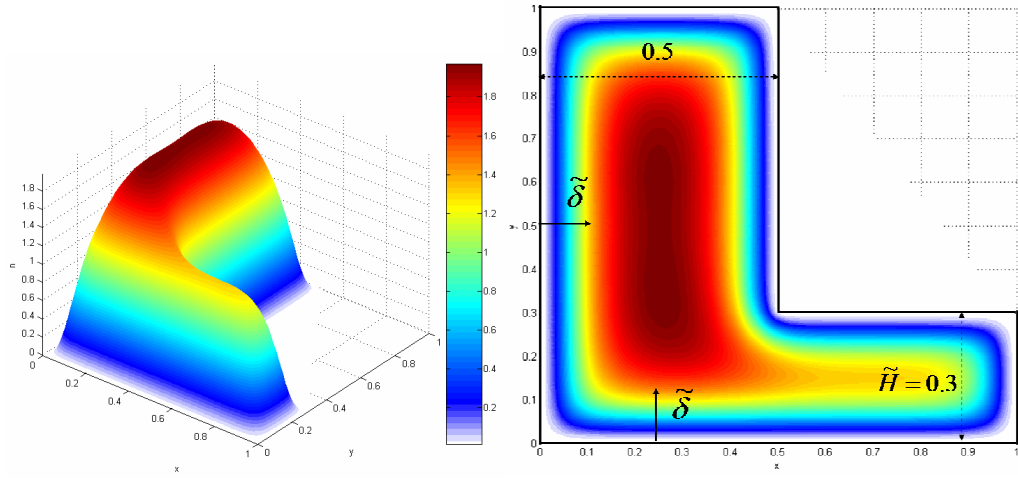


Şekil 3.24: Üçgen domende dejenere Bose gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı.

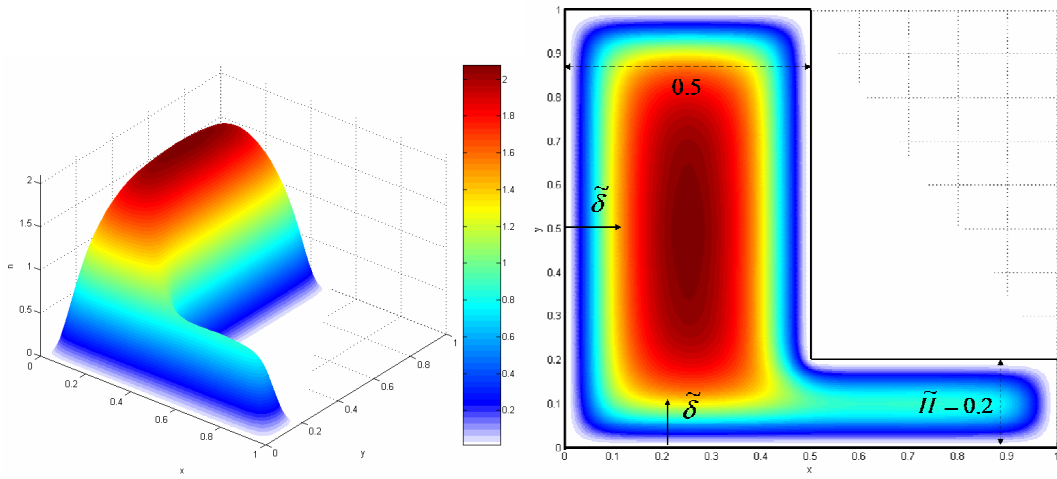
Farklı kanal yüksekliğine, \tilde{H} , sahip L-şekilli domende yoğunluk dağılımları ise Şekil 3.25a, 25b, 25c, 25d ve 25e’de görülmektedir. Yine benzer durumlar Şekil 3.26a, 26b ve 26c’de de bağlantılı kare domenlerde görülmektedir. Şekil 3.27 ise keyfi şekilli domendeki yoğunluk dağılımını göstermektedir.



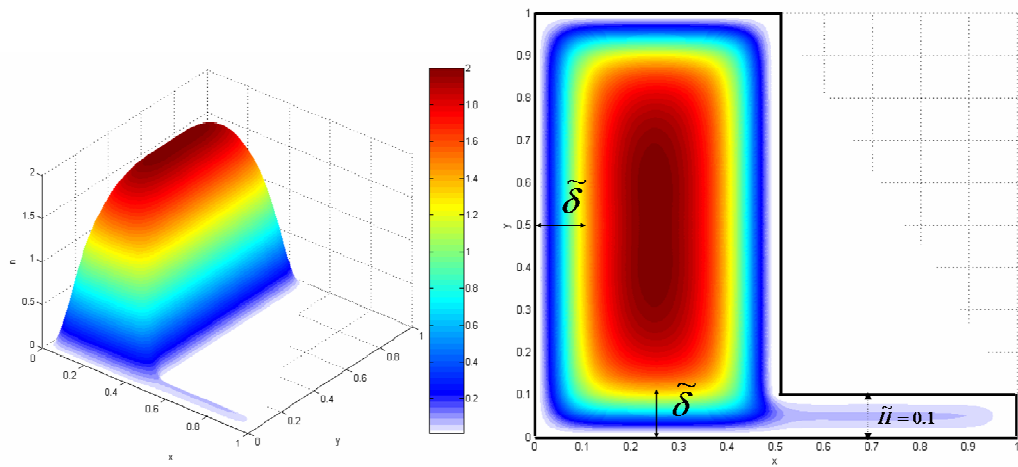
Şekil 3.25a: L-şekilli domende dejenere Bose gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $4\tilde{\delta} \cong \tilde{H}$.



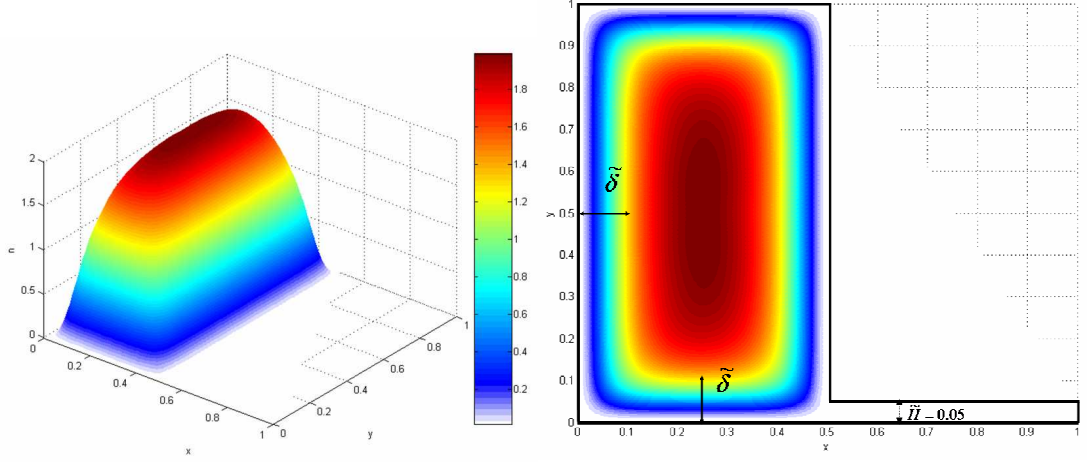
Şekil 3.25b: L-şekilli domende dejenere Bose gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $3\tilde{\delta} \cong \tilde{H}$.



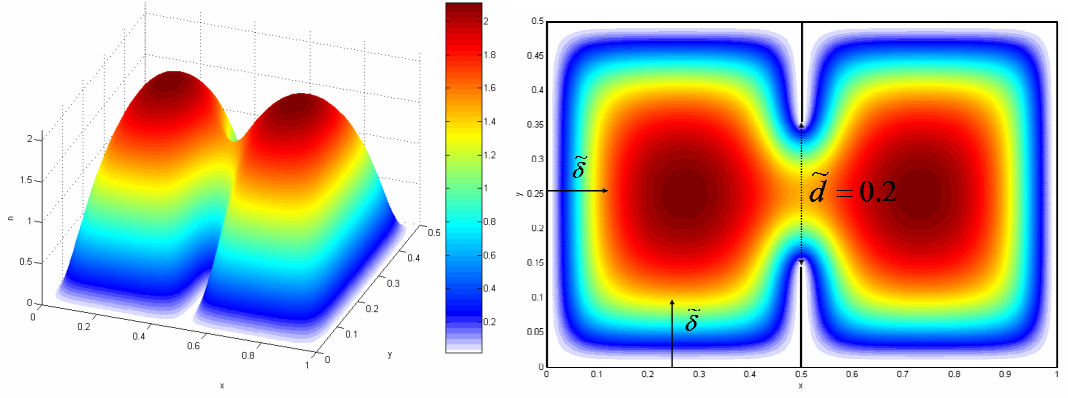
Şekil 3.25c: L-şekilli domende dejenere Bose gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $2\tilde{\delta} \cong \tilde{H}$.



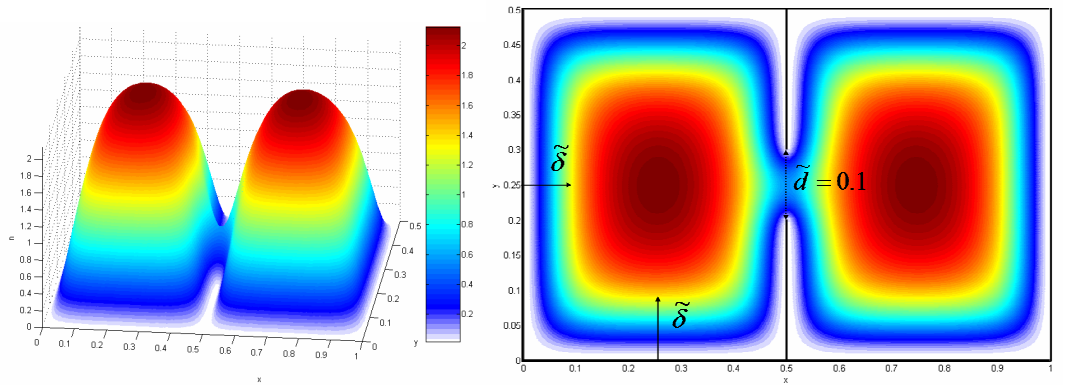
Şekil 3.25d: L-şekilli domende dejenere Bose gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $\tilde{\delta} \cong \tilde{H}$.



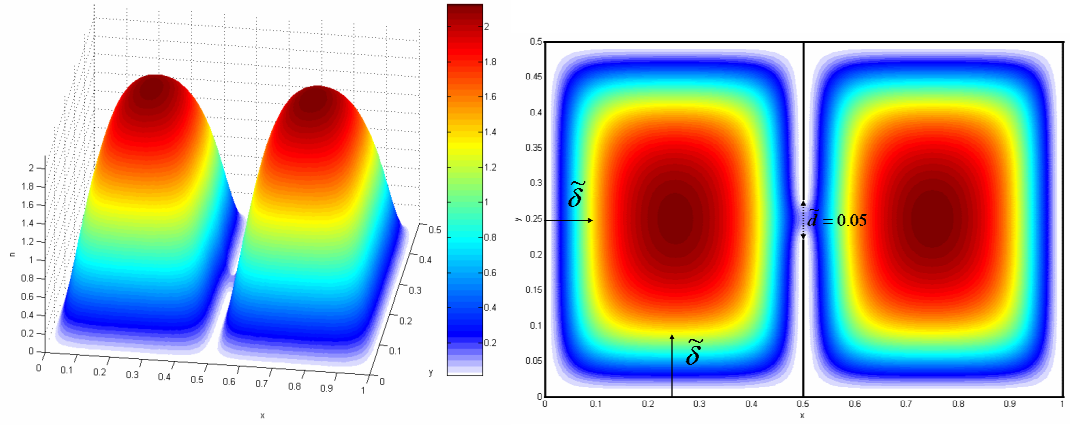
Şekil 3.25e: L-şekilli domende dejenere Bose gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $\tilde{\delta} \cong 2\tilde{H}$.



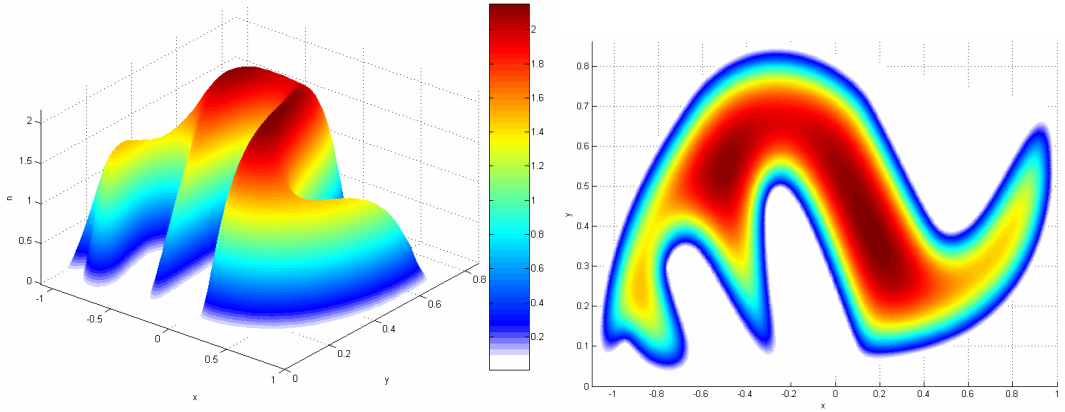
Şekil 3.26a: Birbirine bağlı iki kare domende dejenere Bose gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $2\tilde{\delta} \cong \tilde{d}$.



Şekil 3.26b: Birbirine bağlı iki kare domende dejenere Bose gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $\tilde{\delta} \cong \tilde{d}$.



Şekil 3.26c: Birbirine bağlı iki kare domende dejenerer Bose gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $\tilde{\delta} \cong 2\tilde{d}$.



Şekil 3.27: Keyfi şekilli bir domende dejenerer Bose gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı.

Sonuç olarak görüldüğü gibi dejenerer Bose gazında sınır tabakasının kalınlığı nedeniyle domenin çok daha fazla bir bölümünde gaz yoğunluğu oldukça düşük kalmaktadır. Ayrıca Bose gazında kuantum sınır tabakasının daha kalın olması nedeniyle dar bölgelerden gazın çok daha etkin biçimde boşaldığı anlaşılmaktadır.

4. KLASİK VE KUANTUM GAZLARINDA PARÇACIK-DUVAR ETKİLEŞMESİNE BAĞLI ÖLÇEK ETKİLERİ

Sistemi oluşturan parçacıklarla sistemi sınırlayan duvarların parçacıkları arasında gerçekleşen etkileşmeler, yerel yoğunluğun sınırlara yakın bölgede değişmesine ve böylece yerel yoğunluk üzerinde kuantum ölçek etkileri dışında bir başka ölçek etkisinin oluşmasına yol açar. Bu etkileşmenin yerel yoğunluk üzerinde yol açtığı değişimin modellenmesi, nano ölçekte gazların termodinamik özelliklerinde belirgin hale gelecek ölçek etkilerinden bir diğerini anlamayı ve kuantum ölçek etkilerinin deneysel olarak doğrulanmasına ilişkin çalışmalara yol gösterici bir alt yapının oluşturulmasını sağlayacaktır. Bu bölümde bu amaçla parçacık-duvar etkileşmeleri göz önüne alınarak gerek klasik (Maxwell) gerekse de kuantum gazlarında yerel yoğunluk değişimleri Schrödinger denkleminin sayısal çözümünden gelen özdeğer ve özfonksiyonlar kullanılarak hesaplanmış ve incelenmiştir. Farklı sıcaklık değerleri için sadece bu etkileşmeye bağlı yerel yoğunluk değişimleri ile kuantum ölçek etkilerinin de göz önüne alınmasıyla elde edilen yoğunluk değişimleri karşılaştırılmıştır. Parçacık-duvar etkileşmeleri için yaygın olarak kullanılan potansiyel enerji fonksiyonu, bölüm 2.2’de verilen Lennard-Jones, LJ(12-6), etkileşme potansiyelidir [59-64]. Bu nedenle bu bölümde yapılan hesaplamalarda LJ(12-6) potansiyeli kullanılmıştır.

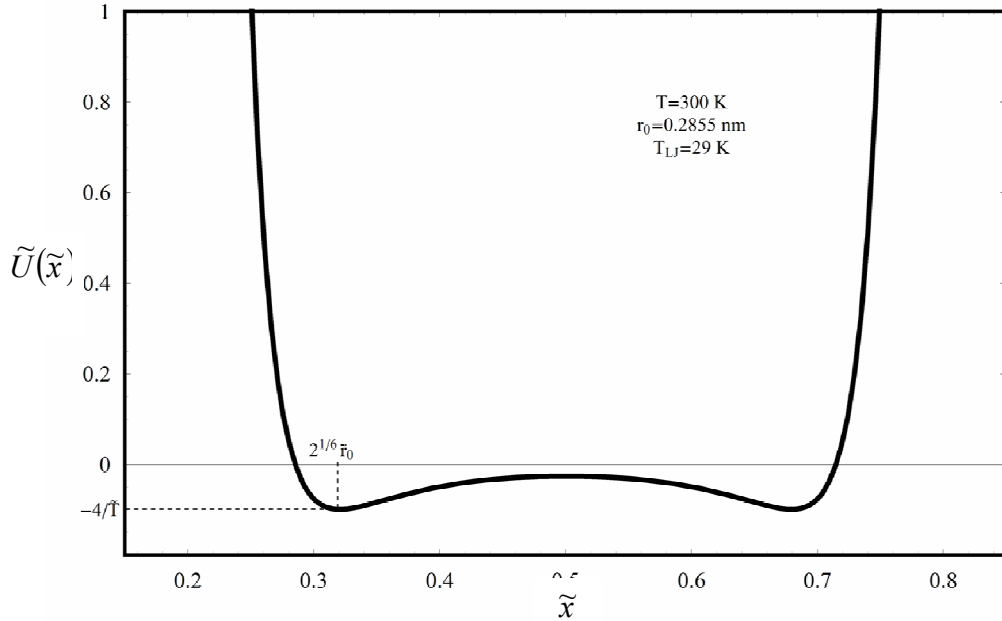
Burada, boyutları L_x , L_y ve L_z olan dikdörtgen bir kutu içinde, LJ(12-6) potansiyelinde tutuklanmış gazın yerel yoğunluk dağılımı incelenmiştir. Bölüm 3’de olduğu gibi dikdörtgen domende tek bir doğrultu için elde edilen sonuçların daha sonra her bir doğrultu için çarpımı 3 boyutlu sonucu ifade edebilmektedir. Bu nedenle burada tek boyutlu problem ele alınmıştır. Aslında tek boyutlu problemler sadece basitleştirilmiş bir problem olmakla kalmazlar, aynı zamanda nano ölçekli sistemlerde çoğunlukla boyutlardan sadece biri nano ölçektedir ve sistem ölçek etkileri açısından, tek boyuta indirgenip incelenebilir. Tek boyutlu bir tutuklama domeni için LJ(12-6) potansiyel fonksiyonu aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$U(x) = 4\varepsilon_{LJ} \left[\left(\frac{r_0}{x} \right)^{12} - \left(\frac{r_0}{x} \right)^6 \right] + 4\varepsilon_{LJ} \left[\left(\frac{r_0}{L-x} \right)^{12} - \left(\frac{r_0}{L-x} \right)^6 \right]. \quad (4.1)$$

Hesaplamalarda kullanılan parametrelerin doğrudan sayısal değerleri yerine boyutsuzlaştırılmış değerleri kullanılarak sayısal değerlerinden bağımsız genelleştirilmiş sonuçların elde edilmesi amaçlanmıştır. Bu amaçla boyutsuz ifadeler kullanılmıştır. Boyutsuzlaştırma için tüm uzunluklar domenin uzunluğu olan L değerine, enerji birimindeki tüm büyüklükler de $k_b T$ değerine bölünmüştür. Bu durumda boyutsuzlaştırılmış LJ(12-6) potansiyeli aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$\tilde{U}(\tilde{x}) = \frac{4}{\tilde{T}} \left[\left[\left(\frac{\tilde{r}_0}{\tilde{x}} \right)^{12} - \left(\frac{\tilde{r}_0}{\tilde{x}} \right)^6 \right] + \left[\left(\frac{\tilde{r}_0}{1-\tilde{x}} \right)^{12} - \left(\frac{\tilde{r}_0}{1-\tilde{x}} \right)^6 \right] \right]. \quad (4.2)$$

Bu ifadede boyutsuz fonksiyon ve değişkenler $\tilde{U}(\tilde{x}) = U(\tilde{x})/k_b T$, $\tilde{r}_0 = r_0/L$, $\tilde{x} = x/L$, $\tilde{T} = T/T_{LJ}$ şeklinde tanımlanmış olup, $T_{LJ} = \varepsilon_{LJ}/k_b$ ve k_b Boltzmann sabitidir. Şekil 4.1'de tek boyutlu bir domende ($L_x=1$ nm için) tutuklanmış gaz atomları ile duvar arasındaki boyutsuz etkileşme potansiyeli verilmektedir. Bu çalışmada, silisyumdan yapılmış bir domende tutuklanmış helyum gazı ele alınmıştır. He-Si etkileşmesi için LJ parametreleri, $r_0=0.2855$ nm ve $\varepsilon_{LJ}=0.2413$ kJ mol⁻¹ ($T_{LJ}=29$ K)'dir [62].



Şekil 4.1: He-Si için boyutsuz LJ(12-6) potansiyel fonksiyonu.

Şekil 4.1’de verilen LJ(12-6) potansiyeli için Schrödinger denkleminin çözümünden elde edilecek enerji özdeğerleri ve özfonksiyonlar kullanılarak Fermi ve Bose gazları için yerel yoğunluk,

$$\begin{pmatrix} FD \\ BE \end{pmatrix} n(\tilde{x}) = \sum_r \frac{|\psi_r(\tilde{x})|^2}{\exp(-\Lambda + \tilde{\varepsilon}_r) \pm 1} \quad (4.3)$$

şeklinde ifade edilir. Burada $\Lambda = \mu/k_b T$, LJ potansiyelin olmaması durumunda boyutsuz kimyasal potansiyel olup domen içerisinde konuma bağlı olmayan (global) bir sabittir. Toplam parçacık sayısı (4.3) ifadesinin domen integrali olacağından ve $|\psi_r(\tilde{x})|^2$ ifadesinin integrali bire eşit olacağından, homojen yoğunluk için,

$$\begin{pmatrix} FD \\ BE \end{pmatrix} n_{cl} = \frac{N}{L} = \frac{1}{\tilde{L}} \int_0^{\tilde{L}} n(\tilde{x}) d\tilde{x} = \frac{1}{\tilde{L}} \sum_r \int_0^{\tilde{L}} \frac{|\psi_r(\tilde{x})|^2 d\tilde{x}}{\exp(-\Lambda + \tilde{\varepsilon}_r) \pm 1} = \frac{1}{\tilde{L}} \sum_r \frac{1}{\exp(-\Lambda + \tilde{\varepsilon}_r) \pm 1} \quad (4.4)$$

yazılabilir. Böylece boyutsuz yoğunluk için uzunlukların domen boyutuna bölünerek boyutsuzlaştırıldığı da hatırlanarak ($\tilde{L} = 1$),

$$\begin{pmatrix} FD \\ BE \end{pmatrix} \tilde{n}(\tilde{x}) = \frac{n(\tilde{x})}{n_{cl}} = \frac{\sum_r \frac{|\tilde{\psi}_r(\tilde{x})|^2}{\exp(-\Lambda + \tilde{\varepsilon}_r) \pm 1}}{\sum_r \frac{1}{\exp(-\Lambda + \tilde{\varepsilon}_r) \pm 1}} \quad (4.5)$$

ifadesi yazılabilir. Kararlı durum dalga fonksiyonlarını ve enerji özdeğerlerini belirlemek üzere, toplam enerjisi ε olan bir parçacık için zamandan bağımsız Schrödinger denklemi aşağıdaki gibi yazılır [51]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + U\psi = \varepsilon\psi. \quad (4.6)$$

(4.6) denklemi boyutsuzlaştırma işlemi için domen uzunluğunun karesi ile çarpılır, enerji ve potansiyel enerjinin boyutsuz değerleri cinsinden yeniden düzenlenirse,

$$-\frac{d^2 \tilde{\psi}}{d\tilde{x}^2} + \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^2 \tilde{U} \tilde{\psi} = \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^2 \tilde{\varepsilon} \tilde{\psi} \quad (4.7)$$

boyutsuz Schrödinger denklemi elde edilir. Bu ifadede $\tilde{\varepsilon} = \varepsilon/k_bT$, $\tilde{U} = U/k_bT$ ve $\alpha = L_c/L$ şeklinde tanımlıdır. (4.7) denkleminin çözümünden gelen dalga fonksiyonları da boyutsuzdurlar. (4.2) ifadesi ile verilen bir potansiyel fonksiyon için (4.7) denklemi analitik olarak çözülemez. Özfonksiyonlar ve özdeğerler ancak sayısal yöntemlerle elde edilebilir. Sınır koşulu olarak; (4.2) ifadesi $\tilde{x} = 0$ ve $\tilde{x} = 1$ değerlerinde sonsuz potansiyel değerine sahip olduğundan dalga fonksiyonunun duvarlara penetrasyon olasılığı sıfır olmakta ve bu nedenle Dirichlet sınır koşulu kullanılabilir. Hesap yükü fazla olmakla birlikte yeterli sayıda özdeğer ve özfonksiyon elde edildikten sonra, denklem (4.5) yardımıyla, tek boyutlu bir domende LJ potansiyeli altında tutuklanmış bir gazın boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı elde edilmiştir.

Yerel yoğunluk dağılımı üzerinde kuantum ölçek etkilerinin nasıl ve ne kadar bir farklılığa yol açtığını belirleyebilmek amacıyla kuantum ölçek etkilerinin hesaba katılmadığı ve sadece LJ potansiyeline maruz kalan bir gazın yerel yoğunluk dağılımı da hesaplanarak her iki yoğunluk aynı grafik üzerinde birlikte ele alınmıştır. Kuantum ölçek etkilerinin olmaması durumundaki yoğunluğun hesabı için kuantum olasılık yoğunluğu yerine klasik olasılık yoğunluğu (I/L), toplam yerine integral ve enerji özdeğerleri için de i 'nin sürekli değerler aldığı $\tilde{\varepsilon} \rightarrow \tilde{\varepsilon}_0 + \tilde{U}(\tilde{x}) = (\alpha i)^2 + \tilde{U}(\tilde{x})$ ifadesi kullanılır. Böylece (4.3) ve (4.4) ifadeleri sırasıyla;

$$\begin{pmatrix} FD \\ BE \end{pmatrix} n(\tilde{x}) = \frac{1}{\tilde{L}} \int_0^{\infty} \frac{di}{\exp[-\Lambda + (\alpha i)^2 + \tilde{U}(\tilde{x})] \pm 1} = \mp \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha\tilde{L}} Li_{1/2}[\mp \exp[\Lambda_L(\tilde{x})]] \quad (4.8)$$

$$\begin{pmatrix} FD \\ BE \end{pmatrix} n_{cl} = \frac{N}{L} = \frac{1}{\tilde{L}} \int_0^{\tilde{L}} n(\tilde{x}) d\tilde{x} = \mp \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha\tilde{L}} \int_0^{\tilde{L}} Li_{1/2}[\mp \exp[\Lambda_L(\tilde{x})]] d\tilde{x} \quad (4.9)$$

şeklini alırlar. Burada $\Lambda_L(\tilde{x}) = \Lambda - \tilde{U}(\tilde{x})$ olup, Λ yine LJ potansiyelin olmaması durumunda boyutsuz kimyasal potansiyeli göstermektedir. (4.8) ve (4.9) yardımıyla kuantum ölçek etkilerinin olmaması durumu için boyutsuz yoğunluk dağılımı aşağıdaki gibi elde edilir ($\tilde{L} = 1$):

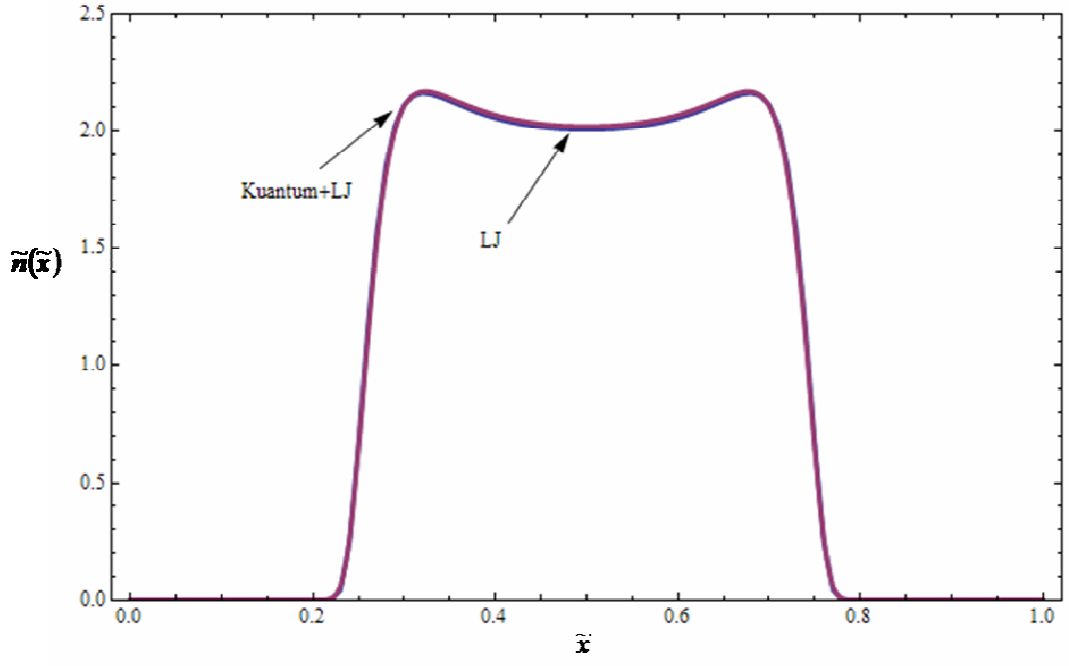
$$\begin{pmatrix} FD \\ BE \end{pmatrix} \tilde{n}(\tilde{x}) = \frac{n(\tilde{x})}{n_{cl}} = \frac{Li_{1/2}[\mp \exp[\Lambda_L(\tilde{x})]]}{\int_0^1 Li_{1/2}[\mp \exp[\Lambda_L(\tilde{x})]] d\tilde{x}}. \quad (4.10)$$

Bose gazı durumunda $\Lambda_L(\tilde{x}) = \Lambda - \tilde{U}(\tilde{x}) < 0$ olması gerektiğinden boyutsuz global kimyasal potansiyel için üst sınır $\Lambda < -1/\tilde{T}$ şeklinde olmaktadır. MB limitinde (4.10) ifadesi,

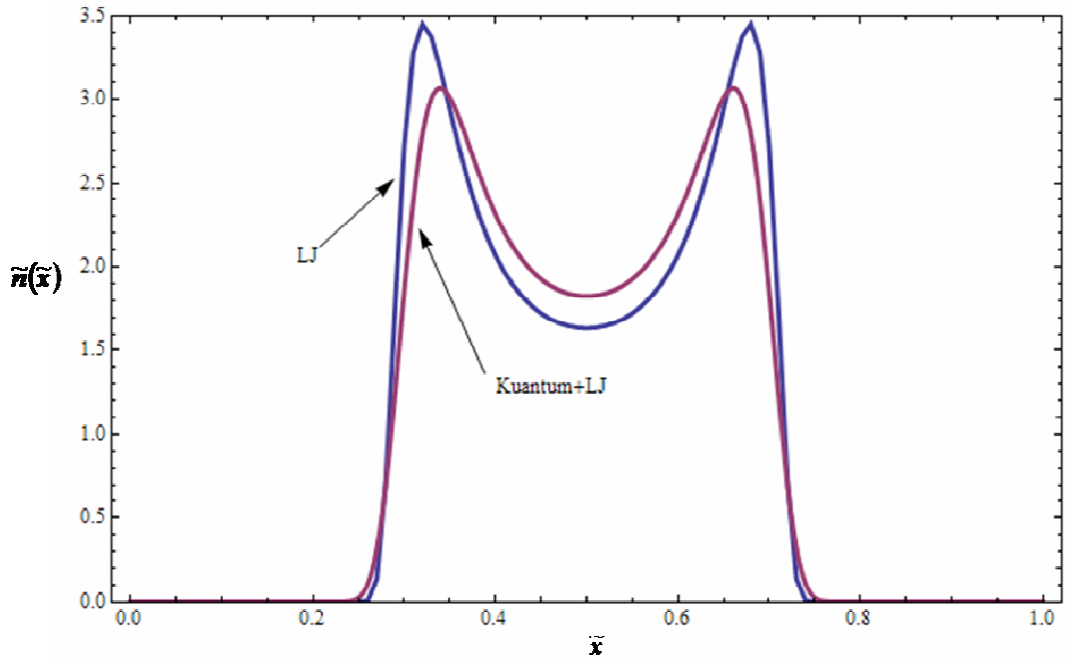
$$(MB) \quad \tilde{n}(\tilde{x}) = \frac{\exp[\Lambda_L(\tilde{x})]}{\int_0^1 \exp[\Lambda_L(\tilde{x})] d\tilde{x}} = \frac{\exp[-\tilde{U}(\tilde{x})]}{\int_0^1 \exp[-\tilde{U}(\tilde{x})] d\tilde{x}} \quad (4.11)$$

şeklinde basitleşir.

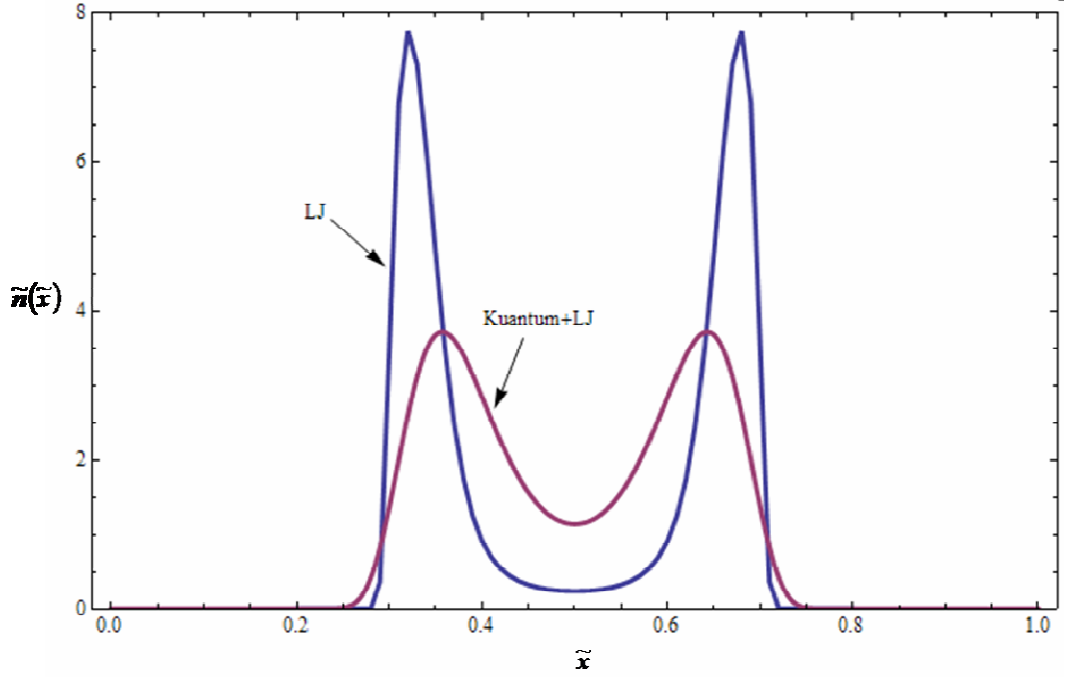
Şekil 4.2, Şekil 4.3 ve Şekil 4.4'de 1 nm uzunluğunda tek boyutlu ve Silisyum'dan yapılmış bir domende tutuklanmış ${}^2\text{He}^4$ gazının duvarlarla LJ potansiyeli çerçevesinde etkileşmesi ve MB istatistiğine göre davranması durumunda boyutsuz yerel yoğunluk dağılımları farklı sıcaklıklar için verilmektedir. Şekillerde kırmızı eğriler denklem (4.5)'e göre hesaplanmış kuantum ölçek etkilerini içeren yoğunluk dağılımını, mavi eğriler ise denklem (4.11)'e göre hesaplanmış kuantum ölçek etkilerini içermeyen yoğunlukları göstermektedir. Şekil 4.2, Şekil 4.3 ve Şekil 4.4'den görüleceği gibi yüksek sıcaklıklarda kuantum ölçek etkilerinin yoğunluk dağılımına etkisi ihmal edilebilecek düzeyde iken düşük sıcaklıklarda oldukça büyük farklılıklar oluşturmaktadır. Kuantum ölçek etkili ve etkisiz her iki yoğunluğun da sınırlara \tilde{r}_0 mesafe kala itici potansiyelin baskın olmasıyla hızla azalarak sifira gittiği görülmektedir. Böylece LJ potansiyelinden kaynaklanan ve yaklaşık \tilde{r}_0 kalınlığında olan bir LJ sınır tabakası oluşturmaktadır. Ayrıca LJ potansiyelinin negatif çukurları yoğunlukta LJ tepelerine yol açmaktadır. Ancak kuantum etkilerin varlığı nedeniyle oluşan kuantum sınır tabakasının da etkin olmaya başlamasıyla yoğunlukta gözlenen toplam sınır tabakanın kalınlaştığı ve gazı domenin iç bölgelerine doğru sürdüğü ve LJ tepelerinin de küçüldüğü görülmektedir.



Şekil 4.2: Tek boyutlu bir domende Maxwell gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $\alpha=0.045$ ($T=300$ K).

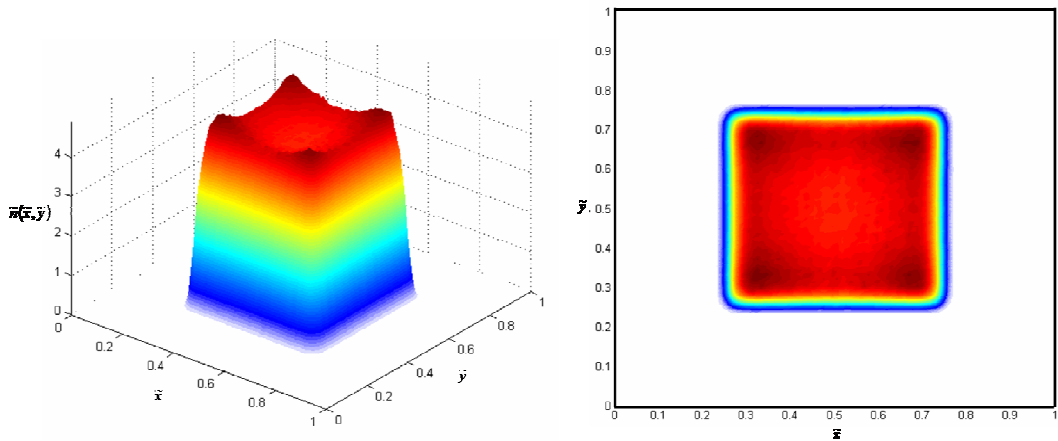


Şekil 4.3: Tek boyutlu bir domende Maxwell gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $\alpha=0.14$ ($T=30$ K).



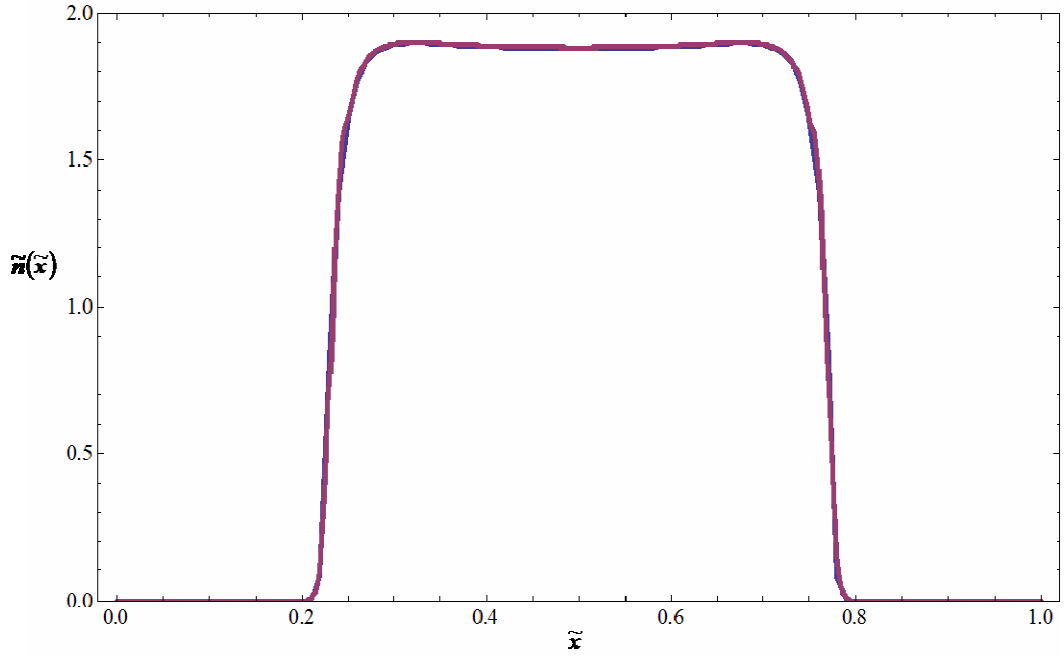
Şekil 4.4: Tek boyutlu bir domende Maxwell gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $\alpha=0.35$ ($T=5K$).

Şekil 4.5 ise kare domende LJ potansiyeli ile tutuklanmış 300 K sıcaklığındaki MB gazında kuantum ölçek etkileri altında yerel yoğunluk dağılımı verilmiştir. $T_{LJ}=30$ K olması nedeniyle 300 K sıcaklıkta LJ tepelerinin oldukça zayıfladığı görülmektedir. Ayrıca iki boyutlu domendeki dağılımın her bir doğrultu için tek boyutlu domendeki dağılımı temsil eden ve Şekil 4.2’de verilen dağılımın çarpımıyla elde edilebileceği de anlaşılmaktadır.

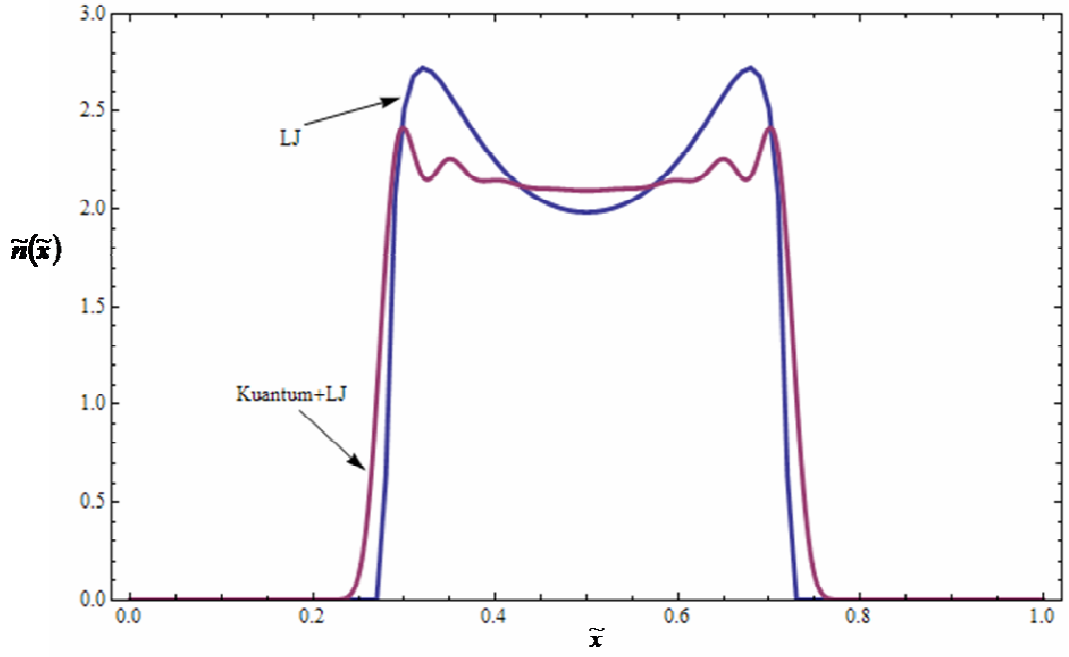


Şekil 4.5 Kare şekilli bir domende LJ potansiyeli (He-4 ve Si duvar etkileşmesi) altında Maxwell gazının boyutsuz yoğunluk dağılımı, $\alpha=0.045$ ($T=300$ K).

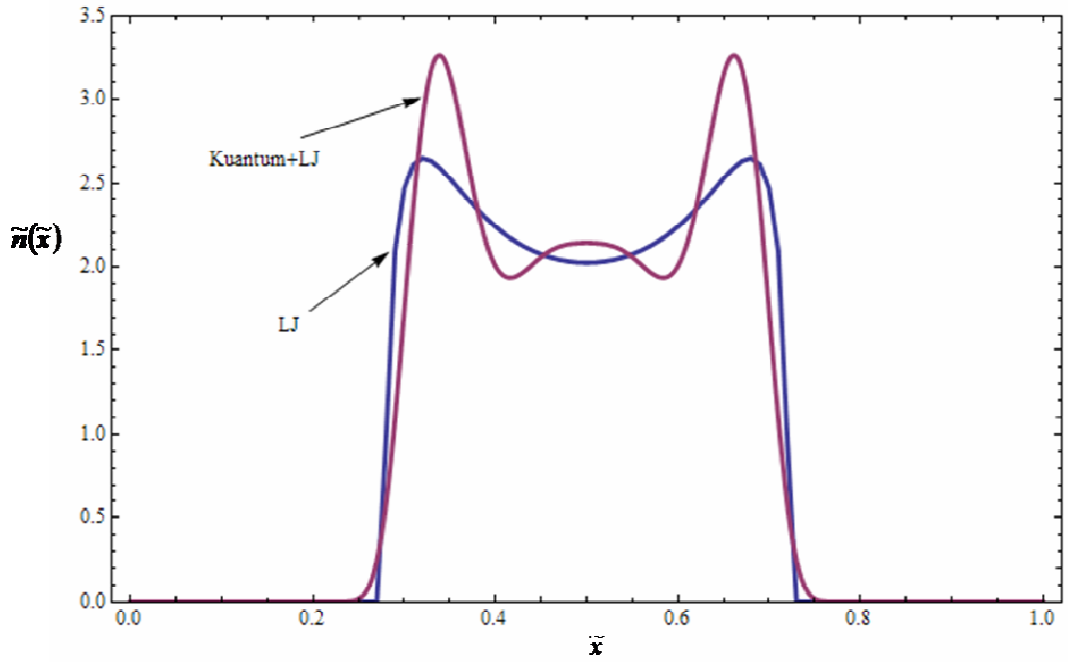
Şekil 4.6, Şekil 4.7 ve Şekil 4.8’de dejenere durumdaki Fermi gazında farklı sıcaklıklarda yerel yoğunluk dağılımı verilmiştir. Şekil 4.6 ve Şekil 4.2’nin karşılaştırması LJ tepelerinin Fermi gazında zayıfladığını göstermektedir. Bu davranış, dejenerasyon sonucu Fermi parçacıklarının enerji seviyelerinin MB’ye göre daha yüksek olması ve böylece LJ potansiyel çukurlarına düşen parçacık sayısının daha az olması sebebiyledir. Nitekim $\Lambda = 5$ olduğundan parçacıkların Fermi sıcaklığı duvar sıcaklığının yaklaşık 5 katı olmakta ve LJ potansiyel çukuru daha rahat aşmaktadırlar. Düşen sıcaklıkla Fermi gazında kuantum ölçek etkileri ile ortaya çıkan ve Bölüm 3.2.2’de gösterilen Friedel salınımlarının baskın hale geldiği görülmektedir.



Şekil 4.6: Tek boyutlu bir domende LJ potansiyeli (He-3 ve Si duvar) altında Fermi gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $\alpha=0.045$ ($T=300$ K, $\Lambda = 5$).



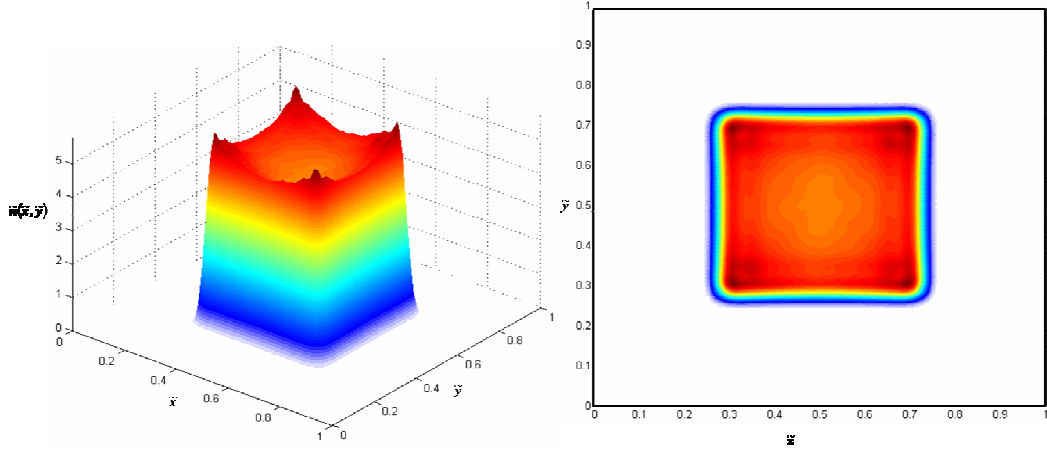
Şekil 4.7: Tek boyutlu bir domende LJ potansiyeli (He-3 ve Si duvar) altında Fermi gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $\alpha=0.14$ ($T=30\text{K}$, $\Lambda = 5$).



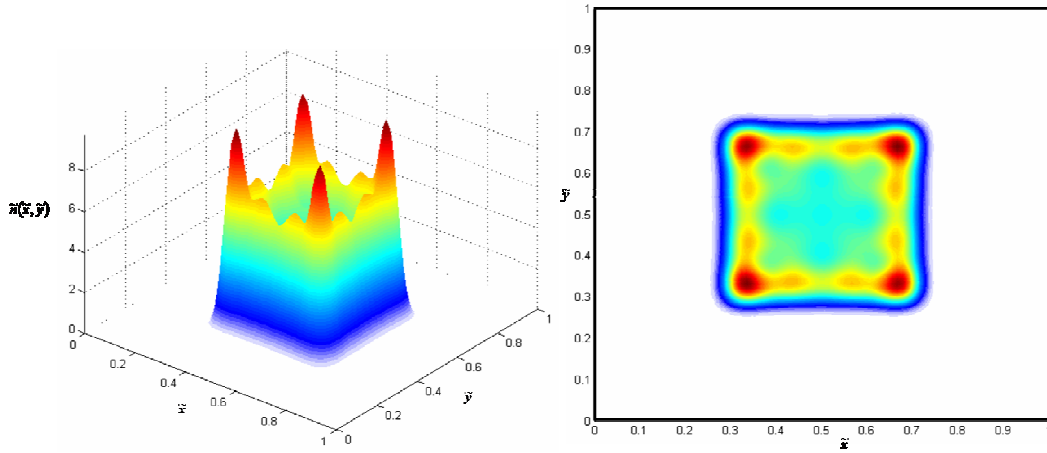
Şekil 4.8: Tek boyutlu bir domende LJ potansiyeli (He-3 ve Si duvar) altında Fermi gazının boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $\alpha=0.35$ ($T=5\text{K}$, $\Lambda = 5$).

Şekil 4.9 ve Şekil 4.10'da ise kare domende LJ potansiyeli ile tutuklanmış dejenere Fermi gazında kuantum ölçek etkileri altında yerel yoğunluk dağılımı sırasıyla 30 K ve 5 K sıcaklıkları için verilmiştir. 5 K sıcaklıkta Friedel salınımlarının hakim olduğu

ancak bunun yanı sıra LJ tepelerinin de varlığını sürdürdüğü ve hatta Friedel salınımlarına ait ilk tepe ile LJ tepesinin 5K sıcaklığında üst üste gelmesiyle büyük bir tepenin oluştuğu açık olarak görülmektedir. MB'de olduğu gibi iki boyutlu domende yoğunluk dağılımının her bir doğrultu için tek boyutlu domendeki dağılımın çarpımıyla elde edilebileceği de anlaşılmaktadır.

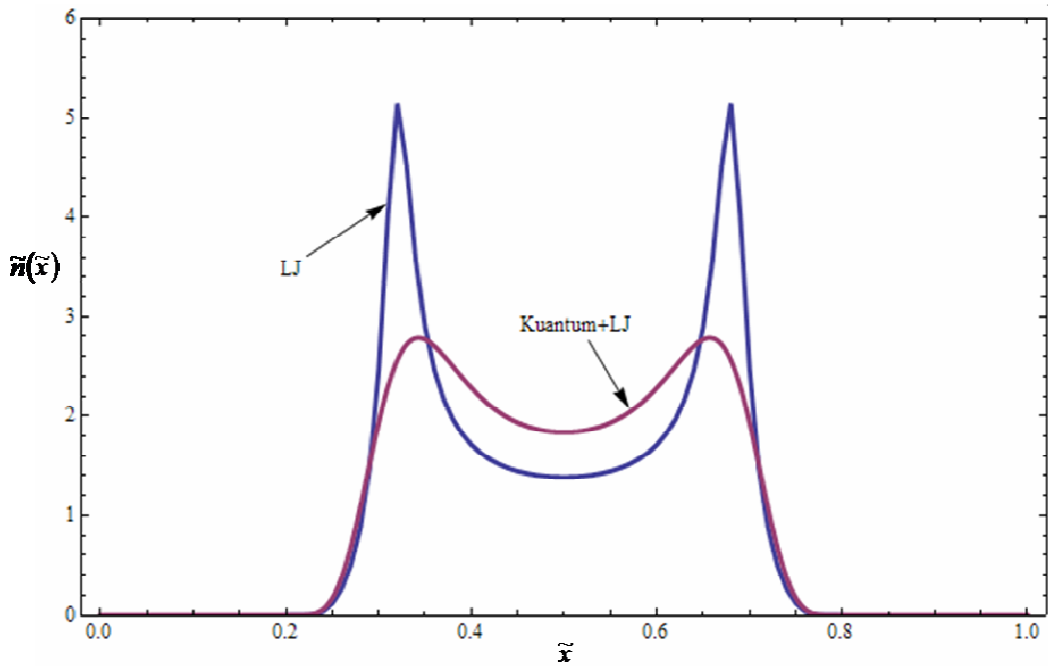


Şekil 4.9 Kare şekilli bir domende LJ potansiyeli (He-3 ve Si duvar) altında Fermi gazının boyutsuz yoğunluk dağılımı, $\alpha=0.14$ ($T=30K$, $\Lambda = 5$).

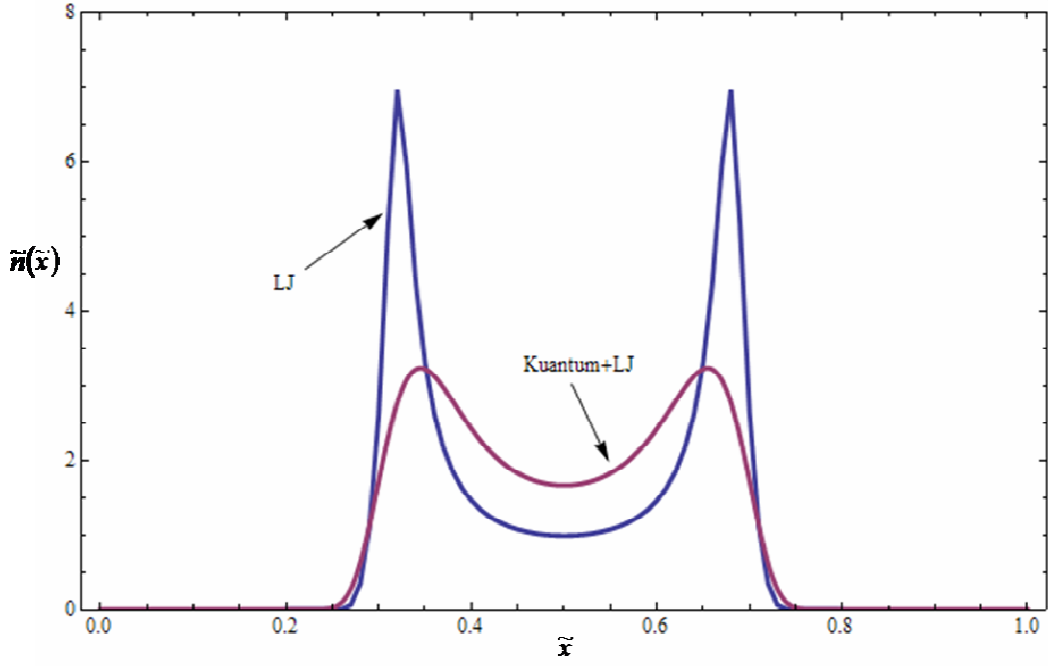


Şekil 4.10 Kare şekilli bir domende LJ potansiyeli (He-3 ve Si duvar) altında Fermi gazının boyutsuz yoğunluk dağılımı, $\alpha=0.35$ ($T=5K$, $\Lambda = 5$).

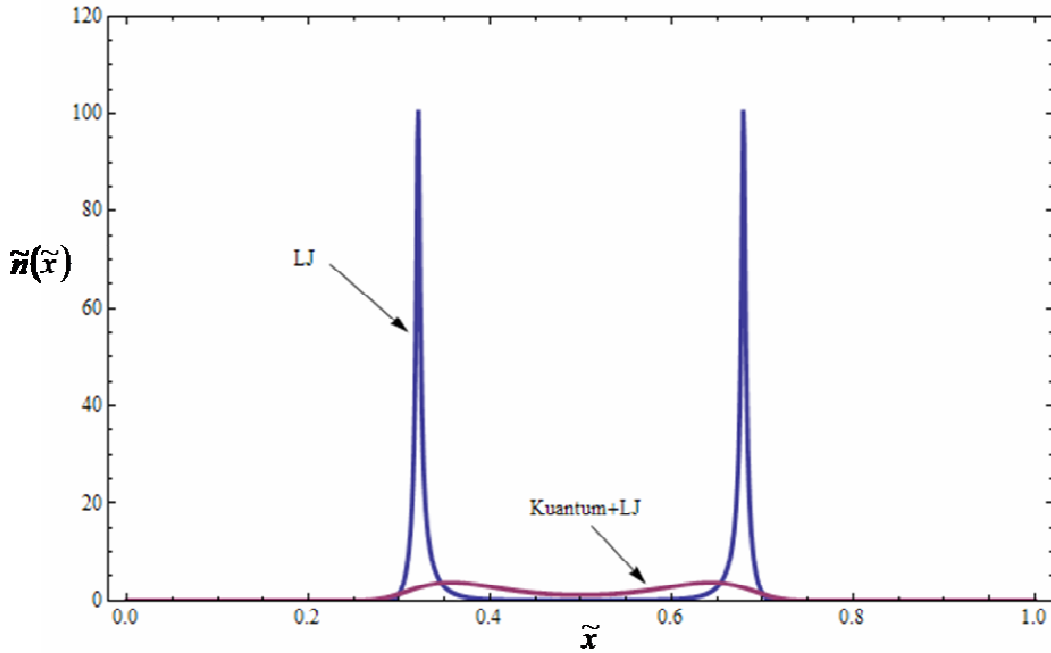
Şekil 4.11, Şekil 4.12 ve Şekil 4.13’de dejenere durumdaki Bose gazında yine farklı sıcaklıklarda yerel yoğunluk dağılımları verilmiştir. Bose gazında LJ tepelerinin çok kuvvetlendiği ve kuantum ölçek etkilerinin ise bu tepeleri zayıflattığı görülmektedir. Kuantum ölçek etkileri göz önüne alınmadığında LJ tepelerinin çok büyük olmasının nedeni, Bose parçacıklarının aynı kuantum durumunda bulunma eğilimleri ve LJ çukurunun en düşük enerjili bölgeyi oluşturmasıdır. Kuantum ölçek etkileri ise parçacıkların dağılımını domenin orta noktasını tercihli bölge yapacak şekilde bozmakta ve toplam parçacık sayısı korunduğundan yoğunluk dağılımındaki tepeler zayıflamaktadır.



Şekil 4.11: Tek boyutlu bir domende Bose gazının LJ potansiyeli (He-4 ve Si duvar) altında boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $\alpha=0.045$ ($T=300$ K, $\Lambda = -0.11$).



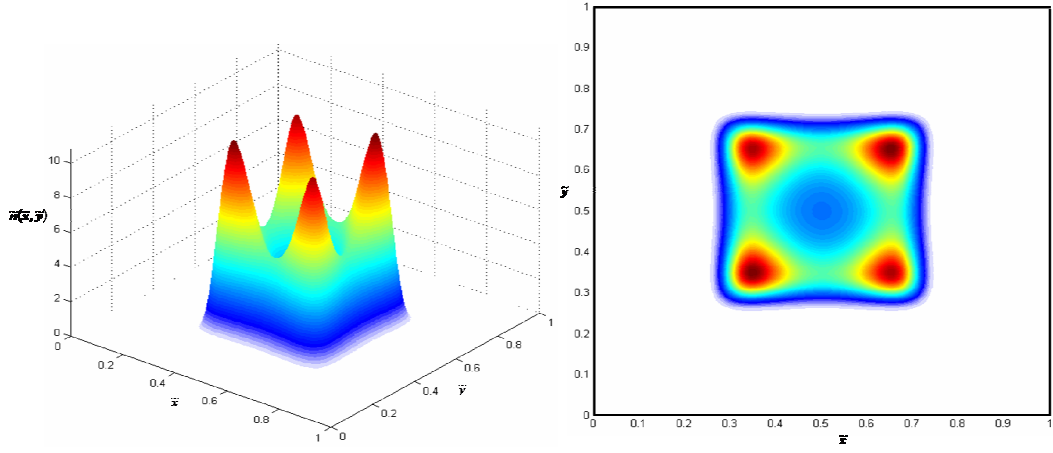
Şekil 4.12: Tek boyutlu bir domende Bose gazının LJ potansiyeli (He-4 ve Si duvar) altında boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $\alpha=0.14$ ($T=30\text{K}$, $\Lambda = -1.11$).



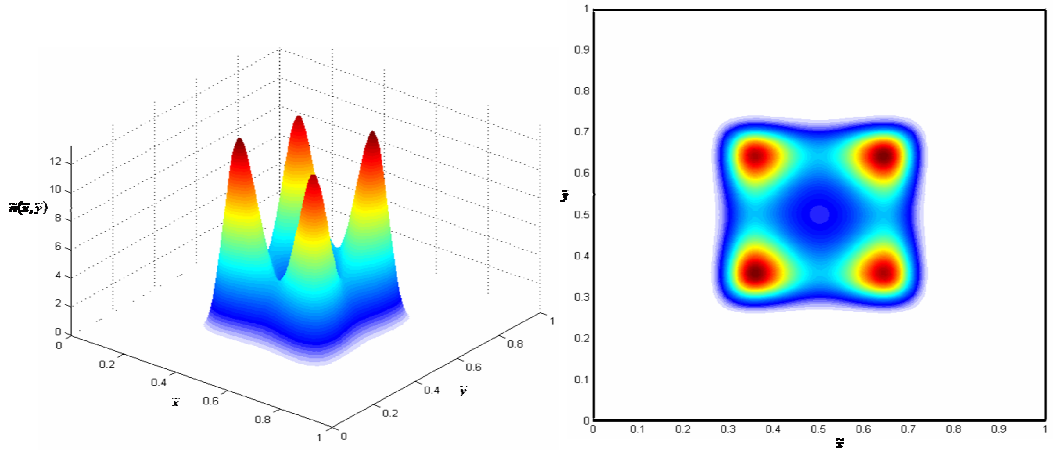
Şekil 4.13: Tek boyutlu bir domende Bose gazının LJ potansiyeli (He-4 ve Si duvar) altında boyutsuz yerel yoğunluk dağılımı, $\alpha=0.35$ ($T=5\text{K}$, $\Lambda = -6.14$).

Şekil 4.14 ve Şekil 4.15’de kare domende LJ potansiyeli ile tutuklanmış dejenere Bose gazında kuantum ölçek etkileri altında yerel yoğunluk dağılımı sırasıyla 30 K ve 5 K sıcaklıkları için verilmiştir. Bose gazında LJ çukurlarının tercihli bölge olmaya devam ettiği görülmektedir. İki boyutlu domende yoğunluk dağılımının yine

her bir doğru için tek boyutlu domendeki dağılımın çarpımıyla elde edilebileceği de anlaşılmaktadır.



Şekil 4.14 Kare şekilli bir domende LJ potansiyeli altında Bose gazının boyutsuz yoğunluk dağılımı, $\alpha=0.14$ ($T=30K$, $\Lambda = -1.11$).



Şekil 4.15 Kare şekilli bir domende LJ potansiyeli altında Bose gazının boyutsuz yoğunluk dağılımı, $\alpha=0.35$ ($T=5K$, $\Lambda = -6.14$).

5. KUANTUM SINIR TABAKASININ DENEYSEL DOĞRULAMASI İÇİN BİR ÖNERİ

Gazların termodinamik özelliklerinde kuantum ölçek etkilerinin araştırılması söz konusu olduğunda, en güçlü aday helyum gazıdır. Düşük sıcaklıklarda ${}^2\text{He}^4$ atomları en düşük enerji seviyesinde yoğunlaşma eğilimi gösterdikleri için, parçacıkların ortalama de Broglie dalgaboyları çok büyük olacak ve bu sıcaklıklarda kuantum ölçek etkileri çok daha belirgin olacaktır. Deneyin çok düşük sıcaklıklarda ${}^2\text{He}^4$ (Bose gazı olarak) ve ${}^2\text{He}^3$ (Fermi gazı olarak) atmosferleri altında tekrarlanmasıyla kuantum gazları durumundaki teorik öngörülerin deneyle karşılaştırılması hedeflenmiştir.

Kuantum ölçek etkilerinin gazların termodinamik özellikleri üzerinde yol açtığı öngörülen değişimlerin deneysel doğrulaması amacıyla 105T086 no.lu TÜBİTAK projesi çerçevesinde Physikalisch-Technische-Bundesanstalt-Berlin (PTB-Berlin) kurumunda yürütülen çalışmalarda birbirleriyle bağlantılı makro ve nano ölçekli iki domende tutuklanmış helyum gazlarının homojenize (klasik) yoğunluğunda ($n_{cl}=N/V$) kuantum sınır tabakası nedeniyle oluşacak farklılığın ölçülmesi planlanmıştır. Yoğunluğun hassas ölçümü için gazların dielektrik sabiti ile yoğunluğu arasındaki ilişkiyi veren Clausius-Mosotti bağıntısından yararlanarak dielektrik sabitin yüksek doğrulukla ölçümünden hareketle gazın yoğunluğunun yüksek doğrulukla ölçülmesi öngörülmüştür. Dielektrik sabitin ölçümü ise kapasite ölçümü ile yapılmıştır. Bu amaçla iletken film kaplı silisyumoksit malzemenin yapılmış ve aralarında nanometrik boyutlarda gaz boşluğu bulunan paralel plaka elektrotlu kapasitörler üretilmiştir. Ayrıca altın kaplamalı, üç bakır halkadan oluşan (iç, orta ve dış elektrot) eş merkezli iki referans makro kapasitör yapılmıştır.

Kuantum ölçek etkileri sebebiyle, helyum gazının dielektrik sabitindeki değişimi ölçebilmek için bir nano-yapılı kapasitör, iki silindirik referans kapasitör, gazla çalışan bir kryostat ve iki sığayı karşılaştırmak için yüksek hassasiyetli kapasitans köprüsü ile oluşturulmuş bir deney seti hazırlanmıştır. Deneyde makro ve nano kapasitörün her ikisi birden helyum gazı ile doldurulmuş bir kryostat kabına

yerleştirilmiştir. Helyum gazı atmosferi altında kapasitelerinin hassas ölçümünden hareketle dielektrik sabitleri ve buradan da gazın dielektrik sabiti ile yoğunluğu arasındaki ilişkiyi veren Clausius-Mosotti bağıntısından yararlanarak elektrot plakaları arasındaki gazın geometrik (klasik) yoğunluğunun ($n_{cl}=N/V$) ölçülmesi amaçlanmıştır.

Clausius-Mosotti bağıntısı bağıl dielektrik sabiti ε_r ile gazın homojenize yoğunluğu arasında

$$\varepsilon_r = 1 + \frac{n_{cl}\mu_D^2}{3\varepsilon_0k_bT} \quad (5.1)$$

şeklinde bir ilişki tanımlar [95]. Burada μ_D parçacıkların dipol momentleri ve ε_0 vakum dielektrik sabitidir. Nano ölçekli paralel plaka elektrotlu ve makro ölçekli silindirik elektrotlu kapasitörlerin kapasiteleri ise sırasıyla

$$C_n = \varepsilon_0\varepsilon_r^n \frac{A_n}{d_n} \quad (5.2)$$

$$C_M = \varepsilon_0\varepsilon_r^M \frac{2\pi L_M}{\ln\left(\frac{R_2}{R_1}\right)_M} \quad (5.3)$$

olarak ifade edilir. Burada ε_r^n ve ε_r^M sırasıyla nano ve makro kapasitördeki gazın bağıl dielektrik sabiti, A_n ve d_n sırasıyla nano kapasitörün elektrot alanı ve elektrotlar arası mesafe, R_2 , R_1 ve L_M ise yine sırasıyla silindirik makro kapasitörün dış ve iç çapı ile uzunluğudur. (5.1)-(5.3) ifadeleri kullanılarak ve $n_{cl}\mu_D^2/3\varepsilon_0k_bT \ll 1$ göz önüne alınarak kapasite oranları

$$R_C = \frac{C_n}{C_M} = \left[1 - n_{cl}^M \frac{\mu_D^2}{3\varepsilon_0k_bT} \left(1 - \frac{n_{cl}^n}{n_{cl}^M} \right) \right] \left[\frac{A_n}{d_n} \frac{\ln\left(\frac{R_2}{R_1}\right)_M}{2\pi L_M} \right] \quad (5.4)$$

olarak elde edilir. Burada C_n ve C_M sırasıyla nano ve makro kapasitörlerin kapasite değerleri, n_{cl}^n ve n_{cl}^M yine sırasıyla nano ve makro kapasitörlerdeki gazın homojenize

yoğunluğudur. Kuantum ölçek etkileri olmaması durumunda $n_{cl}^n = n_{cl}^M$ olacağından (5.4) ifadesindeki soldan ilk köşeli parantez 1 değerini alır. Böylece kapasitelerin oranı sadece elektrotların geometrik uzunlukları ile ilişkili olan ikinci köşeli parantez içerisinde verilen terime bağlıdır. Oysa kuantum ölçek etkileri nedeniyle $n_{cl}^n \neq n_{cl}^M$ olduğundan kapasite oranları ilk köşeli parantez içerisindeki ifadeye de bağlı olacaktır.

Kuantum sınır tabakası nedeniyle parçacıklar geometrik hacim yerine etkin bir hacmi işgal ederler. Bu durumda etkin yoğunluklar aşağıdaki gibi verilebilir.

$$n_{eff}^n = \frac{N_n}{V_n^{eff}} \quad (5.5)$$

$$n_{eff}^M = \frac{N_M}{V_M^{eff}} \quad (5.6)$$

Bu ifadelerde V_n^{eff} ve V_M^{eff} sırasıyla nano ve makro kapasitörün etkin hacmi olup aşağıdaki gibi ifade edilirler:

$$V_n^{eff} = V_n \left(1 - \frac{A_n \delta}{V_n} \right), \quad (5.7)$$

$$V_M^{eff} = V_M \left(1 - \frac{A_M \delta}{V_M} \right). \quad (5.8)$$

Yukarıdaki ifadelerde, nano ve makro kapasitördeki parçacık sayısı sırasıyla N_n ve N_M , kapasitörlerin geometrik hacimleri sırasıyla V_n ve V_M , yüzey alanları da yine sırasıyla A_n ve A_M ile, kuantum sınır tabaka kalınlığı ise δ ile verilmiştir. Termodinamik denge durumunda etkin yoğunlukların eşitliğinden hareket ederek ve ayrıca $A_M/V_M \ll A_n/V_n$ olduğunu göz önüne alarak, geometrik yoğunlukların oranı için aşağıdaki bağıntı elde edilir.

$$\frac{n_{cl}^n}{n_{cl}^M} \approx 1 - \frac{A_n \delta}{V_n} = 1 - \frac{2\delta}{d_n} \quad (5.9)$$

Deneyde kuantum sınır tabakasının varlığı nedeniyle gaz boşluğunun küçük olduğu nano kapasitörün plakaları arasındaki homojenize gaz yoğunluğunda, azalan sıcaklıkla birlikte makro kapasitörün içindeki homojenize gaz yoğunluğuna kıyasla küçük ancak ölçülebilir bir azalma gözlenmesi öngörülmüştür. Bu yoğunluk

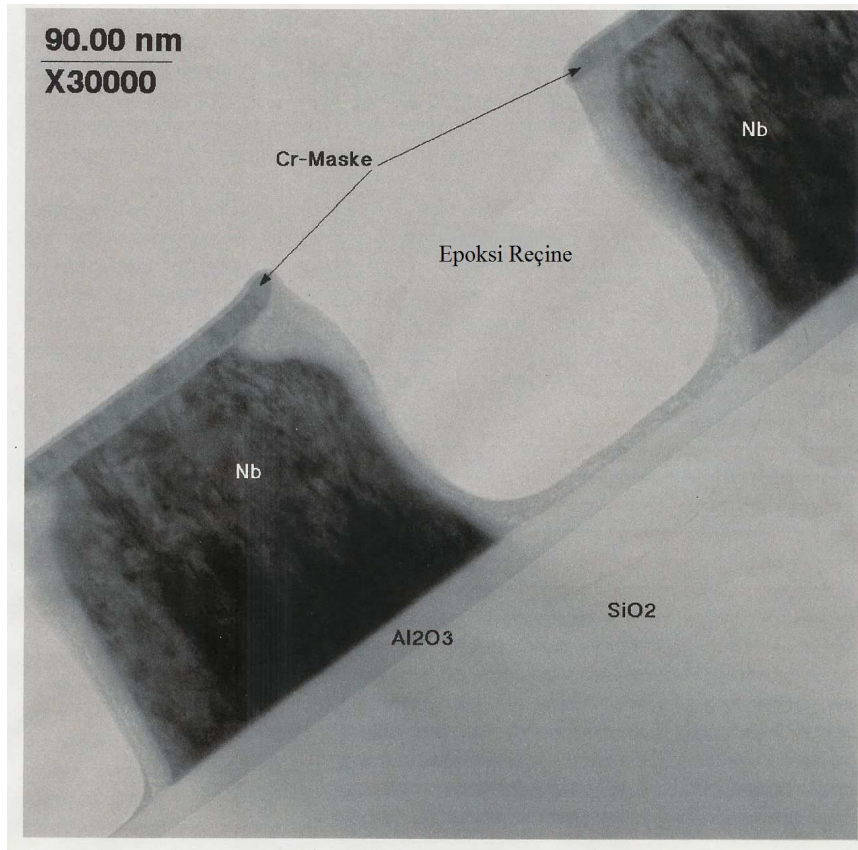
azalmasının değeri teorik olarak öngöröldüğü için bu öngörüler deney sonuçları ile kıyaslanarak teorinin doğruluğunun test edilmesi amaçlanmıştır.

Denklem (5.9), (5.4)'de kullanılırsa kapasiteler oranı aşağıdaki gibi yeniden yazılabilir:

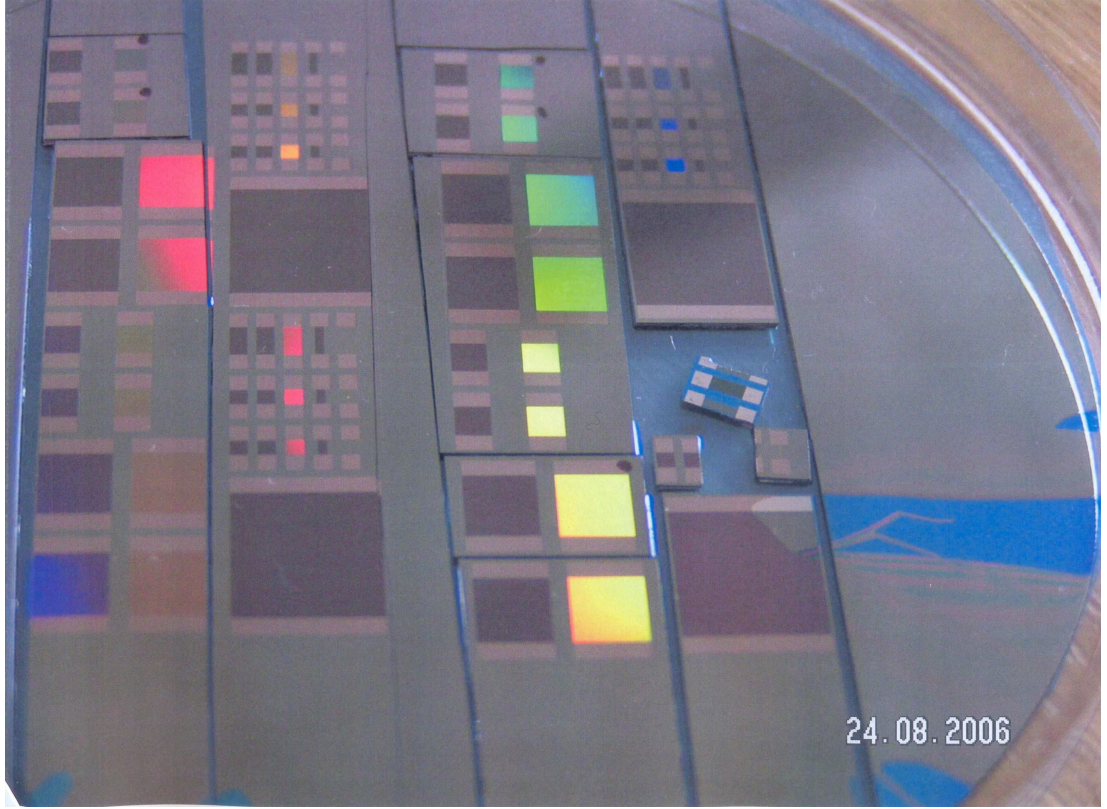
$$R_C = \frac{C_n}{C_M} = \left[1 - n_{cl}^M \frac{\mu_D^2}{3\varepsilon_0 k_b T} \frac{2\delta}{d_n} \right] \left[\frac{A_n}{d_n} \frac{\ln\left(\frac{R_2}{R_1}\right)_M}{2\pi L_M} \right]. \quad (5.10)$$

Buna göre farklı sıcaklık ve basınç (ya da yoğunluk) koşullarında kuantum sınır tabakası kalınlığı farklılaşacağından ve bu farklılaşmanın sıcaklık ve basınca bağıllığı bölüm 3'de yapılan çalışmayla bilindiğinden, ölçümler ile denklem (5.10)'dan hareketle bulunan sonuçların karşılaştırmasıyla kuantum sınır tabakasının varlığı, δ gösterilebilir.

Şekil 5.1 de deney için üretilen nano kapasitörün elektron mikroskopu ile alınan görüntüsü verilmektedir. Ayrıca Şekil 5.2 de farklı özellik ve ölçülerde üretilmiş nano kapasitörleri içeren silisyum plakanın fotoğrafı görölmektedir.

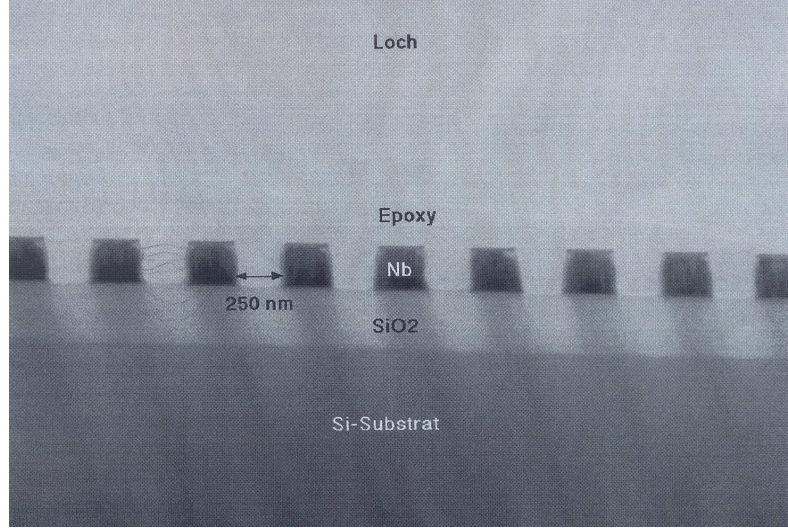


Şekil 5.1: Nano kapasitörün elektron mikroskopu ile alınan görüntüsü.



Şekil 5.2: Silisyum plaka üzerinde üretilmiş farklı özellik ve boyutlarda nano kapasitörler.

Bu deneyin en önemli bileşenini nanoyapılı kapasitör oluşturmaktadır. Tarak şeklinde elektrot yapısına sahip bu kapasitörler elektron ışını litografisi (electron beam lithography) ve kuru kazıma (dry etching) yoluyla üretildiler. Nano kapasitörün elektrotları, 30 nm kalınlığında Al_2O_3 tabaka ile kaplı silikon levha üzerine 250 nm kalınlığında Nb film püskürtülerek elde edilmiştir. Bu alüminyum tabaka, kuru kazıma işlemi için kazıma sonlandırıcısı olarak kullanılmıştır. Şekil 5.3 de verilmiş olan tarak şeklindeki Nb nano tel elektrotların genişliği 200 nm, aralarındaki mesafe ise 250 nm dir. TEM (transmission electron microscopy) tekniğiyle alınan görüntülerde nano tel elektrotların hemen hemen dik olduğunu görülmektedir.



Şekil 5.3: Nb nano elektrotlar.

Ayrıca deneyde referans kapasitör olarak kullanılmak üzere üretilen makro kapasitörler Şekil 5.4’de görülmektedir. Makro kapasitörde, elektrotlar arasındaki mesafe 60 μm olup, iç kapasitör için 42 pF, dış kapasitör için 51 pF sığalar ölçülmüştür.



Şekil 5.4: Makro kapasitörün bileşenleri.

Deney sıcaklığını düzenlemek için, bir sürekli-gaz-akışlı kryostat kullanılmıştır. Kullanılan bu kryostatın çalışma aralığı 2K-300K dir. Bu da, cihazların çok kısa bir süre içinde ısıtılıp soğutulabilmesini sağlar. Kryostat sistem Şekil 5.5 de verilmiştir.



Şekil 5.5: Kryostat sistem.

Helyum gazının dielektrik sabitinin ve kuantum ölçek etkileri sebebiyle değişiminin hesaplanabilmesi için, çok yüksek bir rezolüsyona sahip ve kararlı bir dielektrik ölçme tekniğine ihtiyaç vardır. Bu amaçla, $\Delta C/C=10^{-8}$ kapasite rezolüsyonuna ve 100Hz-10kHz frekans aralığında değişebilen kararlılığa sahip bir köprü devre üretilmiştir. Bir IVD (indüktif voltaj bölücü) yardımıyla sinüsoidal bir voltaj, referans makro kapasitör ile nano kapasitör arasında bölünmüştür.

PTB-Berlin'de yapılan deneyler için üretilen nano ve makro kapasitörler için doğrudan PTB-Berlin kurumunun öz olanakları ve fonları kullanılmıştır. Deneyler özellikle kuantum ölçek etkilerinin büyük olduğu düşük sıcaklık koşullarında yapılmış ancak sıcaklık kontrol sisteminde istenilen hassasiyette kontrol sağlanamadığından ölçümleri perdeleyen bir sıcaklık salınımı gözlenmiştir. Bu amaçla yeni ve daha hassas bir sıcaklık kontrol sistemine ihtiyaç duyulmuştur. Söz konusu kontrol sisteminin maliyetleri oldukça büyük olduğundan şu an bu amaç için bir fon araştırılmaktadır.

6. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Bu tez çalışması çerçevesinde, sonlu büyüklüğe sahip domenlerde tutuklanmış gazların global ve yerel termodinamik özellikleri üzerinde özellikle nano ölçekte belirgin hale gelen kuantum ölçek etkileri, Maxwell, Fermi ve Bose gazları için incelenmiş ve deneysel doğrulama için bir öneri yapılmıştır. Bu amaçla öncelikle hem klasik (Maxwell) hem de kuantum gazlarının (Fermi ve Bose) global serbest enerjisi kuantum ölçek etkileri göz önüne alınarak keyfi şekle sahip bir domen için Weyl konjektürü yardımıyla türetilmiş ve buradan hareketle diğer termodinamik özellikler elde edilmiştir. Kuantum ölçek etkisi nedeniyle nano ölçekte gazların tüm termodinamik büyüklük ve davranışlarının makro ölçeğe kıyasla belirgin şekilde değiştiği, yanal kuvvetlerin ortaya çıktığı, dejenere Fermi gazının özelliklerinde sıcaklık düzeltmesi yanında ölçek düzeltmesi ve her ikisinin bileşimi olan termoölçek düzeltmesinin ortaya çıktığı, Bose gazında yoğunlaşmanın klasik Bose-Einstein yoğunlaşma sıcaklığından daha yüksek bir sıcaklıkta ve önce yüzey modlarında başladığı gösterilmiştir.

Daha sonra gazlarda yerel yoğunluk incelenerek, yerel yoğunluğun termodinamik dengede homojen olmadığı, sınırlara yakın bölgede yoğunluğun azalarak sifira gittiği Planck sabiti ile orantılı bir kuantum sınır tabakasının bulunduğu, bu tabakanın Bose gazında en büyük değeri alırken Fermi gazında da en küçük değerine ulaştığı ayrıca Fermi gazında yoğunlukta Friedel benzeri salınımlar olduğu belirlenmiştir. Bu yoğunluk dağılımları için dejenere ve tek boyutlu durumlarda analitik ifadeler elde edilmiş, daha karmaşık tutuklama geometrileri ve zayıf dejenerasyon koşullarında ise sayısal çözümlerle yoğunluk dağılımları incelenmiştir. Global termodinamik özelliklerde gözlenen kuantum ölçek etkilerinin yerel yoğunluk dağılımında gözlenen homojen olmayan bölgelerin varlığından kaynaklandığı anlaşılmıştır. Kuantum sınır tabakası kalınlığının belirlediği bir ölçüden daha küçük ölçülere sahip bölgeleri gazın terk ettiği ve gaz yoğunluğunun termodinamik denge durumuna rağmen diğer bölgelere kıyasla düşük bir değerde kaldığı görülmüştür. İki boyutlu domenlerde yapılan sayısal incelemeler bir boyutlu domenler için verilen analitik

sonuçların yüzeylere dik her bir doğrultu için kullanılarak iki boyutlu yoğunluk dağılımının elde edilebileceğini göstermiştir. Maxwell, Fermi ve Bose gazlarında kuantum sınır tabakası kalınlığı için analitik ifadeler verilmiş bu tabaka kalınlığının aynı gaz tipi için domen şeklinde bağımsız olduğu gösterilmiştir.

Ayrıca yerel yoğunluk üzerinde parçacıklarla sınırlar arasında Lennard-Jones tipi etkileşmenin yol açtığı değişim de modellenmiş ve kuantum ölçek etkileri altında bu tip bir yoğunluk dağılımının nasıl deforme olduğu gösterilmiştir. Son olarak yerel yoğunluk üzerinde kuantum ölçek etkilerine ilişkin teorik öngörülerin deneysel doğrulaması için bir deney önerisi getirilmiştir.

Gazların termodinamik özellikleri üzerinde kuantum ölçek etkilerine ilişkin bu çalışmada ulaşılan sonuçlardan yararlanarak, nano ölçekte bu yeni davranışları kullanan ve makro ölçekte mümkün olmayan yeni nano makinelerin tasarımı ve üretimi mümkün olabilecektir. Bu tez çalışmasında ele alınan problemlerin daha ileriye götürülmesi için deneysel doğrulamaya ilişkin çalışmanın tamamlanması sonrasında teorik öngörülerle deney sonuçlarının karşılaştırmasından yararlanarak teorik modelin olası sapmalarını en aza indirecek geliştirmelerin yapılabileceği düşünülmektedir.

KAYNAKLAR

- [1] **Cui, L. and Brisson, J. G.**, 2005. MEMS-Type Rankine Cycle Machines, *J. Eng. for Gas Turbines and Power*, **127**, 683-692.
- [2] **Epstein, A. H.**, 2004. Millimeter-Scale, Micro-Electro-Mechanical Systems Gas Turbine Engines, *J. Eng. for Gas Turbines and Power*, **126**, 205-226.
- [3] **Kribus, A.**, 2004. Heat Transfer in Miniature Heat Engines, *Heat Transfer Engineering*, **25**, 1-3.
- [4] **Jacobson, S. A. and Epstein, A. H.**, 2003. An Informal Survey Of Power Mems, *The International Symposium on Micro Mechanical Engineering ISMME2003-K18*, Tsuchiura, Japonya, December 1-3, s.513-520.
- [5] **Spadaccini, C. M., Mehra, A., Lee, J., Zhang, X., Lukachko, S. and Waitz, I. A.**, 2003. High Power Density Silicon Combustion Systems for Micro Gas Turbine Engines, *J. Eng. for Gas Turbines and Power*, **125**, 709-719.
- [6] **Mehra, A., Zhang, Z., Ayon, A.A., Waitz, I. A., Schmidt, M. A. and Spadaccini, C. M.**, 2000. A six-wafer combustion system for a silicon micro gas turbine engine, *J. MicroMech. Sys.*, **9**, 517-527.
- [7] **Harris, C., Despa, M. and Kelly, K.**, 2000. Design and fabrication of a cross flow micro heat exchanger, *J. MicroMech. Sys.*, **9**, 502-508.
- [8] **Lohner, K. A., Chen, K.S., Ayon, A. A. and Spearing, S. M.**, 1998. Microfabricated Silicon Carbide Microengine Structures, *Materials Research Society Symposium Proceedings Series*, 546, 1-6.
- [9] **Lojkowski, W., Turan, R., Proykova, A. and Daniszewska, A.**, 2006. Nanometrology, Eighth Nanoforum Report, Düsseldorf, Almanya.
- [10] **Kang, J. W., Hwang, H. J., Lee, J.H. and Lee, H. J.**, 2004. Fluidic gas-driven carbon-nanotube motor: Molecular dynamics simulations, *J. Korean Phys. Society*, **45**, 573-576.
- [11] **Kang, J. W. and Hwang, H. J.**, 2004. Nanoscale carbon nanotube motor schematics and simulations for micro-electro-mechanical machines, *Nanotechnology*, **15**, 1633-1638.
- [12] **Moriarty, P.**, 2001. Nanostructured materials, *Rep. Prog. Phys.* **64**, 297-381.
- [13] **Terrones, M., Kamalakaran, R., Seeger, T. and Rühle, M.**, 2000. Novel nanoscale gas containers: encapsulation of N₂ in CN_x nanotubes, *Chem. Commun*, 2335-2336.
- [14] **Cumings, J. and Zettl, A.**, 2000. Low-Friction Nanoscale Linear Bearing Realized from Multiwall Carbon Nanotubes, *Science*, **289**, 602-604.
- [15] **Hoummady, M. and Fujita, H.**, 1999. Micromachines for nanoscale science and technology, *Nanotechnology*, **10**, 29-33.
- [16] **Lijima, S. and Ichihashi, T.**, 1993. Single-shell carbon nanotubes of 1-nm diameter, *Nature*, **363**, 603-605.
- [17] **Lijima, S.**, 1991. Helical Microtubules of graphitic carbon, *Nature*, **354**, 56-58.
- [18] **Drexler, K. E.**, 1987. Engines of Creation: The Coming Era of Nanotechnology, Anchor Books, New York.

- [19] **Taniguchi, N.**, 1974. On the basic concept of nanotechnology, *In. Proc. Int. Conf. Prod. Eng.*, part 2, Tokyo: JSPE, 18-23.
- [20] **Yarris, L.**, 2005. Nanotechnology in the San Francisco Bay Area: Dawn of a New Age, Bay Area Science and Innovation Consortium (BASIC), CA.
- [21] **NSET**, 2007. The National Nanotechnology Initiative, Research and Development Leading to a Revolution in Technology and Industry, Supplement to the President's 2008 Budget, Subcommittee on Nanoscale Science, Engineering, and Technology (NSET), Committee on Technology (CT), National Science and Technology Council, Washington, DC.
- [22] **Cottey, A. A.**, 1971. Band theory of the quantum size effect for a simple model, *J. Phys. C : Solid St. Phys.*, **4**, 1734-1736.
- [23] **Garcia, N., Kao, Y. H. and Strongin, M.**, 1972. Galvanomagnetic studies of Bismuth films in the quantum-size-effect region, *Phys. Rev. B*, **5**, 2029-2039.
- [24] **Cottey, A. A.**, 1973. Quantum size effect with arbitrary surface potential, *J. Phys. C : Solid St. Phys.*, **6**, 2446-2458.
- [25] **Cottey, A. A.**, 1973. Quantum size effect with realistic surface potential, *J. Phys. C : Solid St. Phys.*, **6**, L16-L18.
- [26] **Asahi, H., Humoto, T. and Kawazu, A.**, 1974. Quantum size effect in thin bismuth films, *Phys. Rev. B*, **9**, 3347-3356.
- [27] **Jaklevic, R. C. and Lambe, J.**, 1975. Experimental study of quantum size effects in thin metal films by electron tunneling, *Phys. Rev. B*, **12**, 4146-4160.
- [28] **Freeman, W. L. and Gettys, W. E.**, 1978. Quantum size effect and electric field effect in Bi films, *Phys. Rev. B*, **17**, 529-534.
- [29] **Arora, V. K. and Awad, F. G.**, 1981. Quantum size effect in semiconductor transport, *Phys. Rev. B*, **23**, 5570-5575.
- [30] **Trivedi, N. and Ashcroft, N. W.**, 1988. Quantum size effects in transport properties of metallic films, *Phys. Rev. B*, **38**, 12298-12309.
- [31] **Liu, K., Chien, C. L. and Searson, P. C.**, 1998. Finite-size effects in bismuth nanowires, *Phys. Rev. B*, **58**, R14681-R14684.
- [32] **Liu, W. L., Chen, G., Liu, J. L. and Wang, K. L.**, 2002. Quantum and classical size effects on thermoelectric transport in Si/Ge superlattices, *21st International conference on thermoelectronics*, Long Beach, CA, August, 2002, 130-134.
- [33] **Czoschke, P., Hong, H., Basile, L. and Chiang, T. C.**, 2005. Quantum size effects in the surface energy of Pb/Si(111) film nanostructures studied by surface x-ray diffraction and model calculations, *Phys. Rev. B*, **72**, 075402(1-13).
- [34] **Varykhalov, A.**, 2005. Quantum-size effects in the electronic structure of novel self-organized systems with reduced dimensionality, *Phd Thesis*, Uni. Potsdam.
- [35] **Borisov, A. G., Juaristi, J. I., Muiño, R. D., Sánchez-Portal, D. and Echenique, P. M.**, 2006. Quantum-size effects in the energy loss of charged particles interacting with a confined two-dimensional electron gas, *Phys. Rev. A*, **73**, 012901(1-9).
- [36] **Kanemitsu, Y., Suzuki, K., Nakayoshi, Y. and Masumoto, Y.**, 1992. Quantum size effects and enhancement of the oscillator strength of excitons in chains of silicon atoms, *Phys. Rev. B.*, **46**, 3916-3919.

- [37] **Bellessa, J., Voliotis, V., Grousson, R., Wang, X. L., Ogura, M. and Matsuhata, H.**, 1998. Quantum-size effects on radiative lifetimes and relaxation of excitons in semiconductor nanostructures, *Phys. Rev. B*, **58**, 9933-9940.
- [38] **Millo, O., Katz, D., Steiner, D., Rothenberg, E., Mokari, T., Kazes, M. and Banin, U.**, 2004. Charging and quantum size effects in tunneling and optical spectroscopy of CdSe nanorods, *Nanotechnology*, **15**, R1-R6.
- [39] **Molina, M. I.**, 1996. Ideal gas in a finite container, *Am.J.Phys.*, **64**, 503-505.
- [40] **Gutierrez, G. and Yanez, J. M.**, 1997. Can an ideal gas feel the shape of its container?, *Am. J. Phys.*, **65**, 739-743.
- [41] **Pathria, R. K.**, 1998. An ideal quantum gas in a finite-sized container, *Am. J. Phys.*, **66**, 1080-1085.
- [42] **Dai W.S. and Xie M.**, 2003. Quantum statistics of ideal gases in confined space, *Phys. Lett. A*, **311**, 340-346.
- [43] **Sisman, A. and Müller, I.**, 2004. The Casimir-like size effects in ideal gases, *Phys. Lett. A*, **320**, 360-366.
- [44] **Dai W.S. and Xie, M.**, 2004. Geometry effects in confined space, *Phys. Rev. E*, **70**, 016103-1.
- [45] **Sisman, A.**, 2004. Surface dependency in thermodynamics of ideal gases, *J.Phys. A: Math. Gen.*, **37**, 11353-11361.
- [46] **Sisman, A., Ozturk, F. and Firat, C.**, 2005. Quantum Surface Tension In Ideal Gases, *2005 Dünya Fizik Yılı-Türk Fizik Derneği, 23. Uluslararası Fizik Kongresi*, Muğla, Türkiye, 13-16 Eylül, s 134-139.
- [47] **Pang, H., Dai,W.S. and Xie, M.**, 2006. The difference of boundary effects between Bose and fermi systems, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **39**, 2563-2571.
- [48] **Sisman, A., Ozturk, Z. F. and Firat, C.**, 2007. Quantum boundary layer: a non-uniform density distribution of an ideal gas in thermodynamic equilibrium, *Phys. Lett. A*, **362**, 16-20.
- [49] **Huang, K.**, 1987. *Statistical Mechanics*, 2nd Edition, John Wiley and Sons, New York.
- [50] **Pathria, R. K.**, 1996. *Statistical Mechanics 2nd Edition*, Butterworth-Heinemann, Woburn.
- [51] **Griffiths, D. J.**, 1995. *Introduction to Quantum Mechanics*, Prentice Hall, New Jersey.
- [52] **Toennies, J. P.**, 1993. Helium atom scattering: A gentle and uniquely sensitive probe of surface structure and dynamics, *J. Phys.: Condens. Matter*, **5**, A25-A40.
- [53] **Pertaya, N.**, 2004. The α -Ga(010) surface investigated by room and low temperature scanning tunnelling microscopy and He (atom) scattering, Ph.D. Thesis, Feri University, Berlin.
- [54] **Spiegel, M. R.**, 1968. *Mathematical Handbook of Formulas and Tables*, McGraw-Hill Book Company, New York.
- [55] **Carnal, O. and Mlynek, J.**, 1991. Young's double-slit experiment with atoms: A simple atom interferometer, *Phys. Rev. Lett.*, **66**, 2689-2692.
- [56] **Van Sciver, S. W.**, 1986. *Helium Cryogenics*, Plenum Press, New York.
- [57] **Hirschfelder, J. O., Curtiss, C. F. and Bird, R. B.**, 1954. *Molecular Theory of Gases and Liquids*, John Wiley & Sons, New York.
- [58] **Israelachvili, J. N.**, 1992. *Intermolecular and Surface Forces*, Academic Press, London.

- [59] **Karniadakis, G., Beskok, A. and Aluru, N.**, 2005. *Microflows and Nanoflows*, Springer, Newyork.
- [60] **Calbi, M. M., Cole, M. W., Gatica, S. M., Bojan, M. J. and Stan, G.**, 2001. Colloquium: Condensed phases of gases inside nanotube bundles, *Rev. Mod. Phys.*, **73**, 857-865.
- [61] **Stan, G., Bojan, J. M., Curtarolo, S., Gatica, S. M. and Cole, M. W.**, 2000. Uptake of gases in bundles of carbon nanotubes, *Phys. Rev. B*, **62**, 2173-2180.
- [62] **Nagy, L. T., Tunega, D. and Liska, M.**, 1996. Modeling of interaction properties of surfaces of phyllosilicates: A theoretical forecast of adsorption isotherms of noble gases at the talc surface, *Int. J. Quantum Chem.*, **57**, 843-849.
- [63] **Sharma, S. R., O'Shea, S. F. and Meath, W.J.**, 1989. Atom-atom potentials and rare-gas-graphite interactions, *Phys. Rev. B*, **40**, 6356-6367.
- [64] **Hoinkes, H.**, 1980. The physical interaction potential of gas atoms with single-crystal surfaces determined from gas-surface diffraction experiments, *Rev. Mod. Phys.*, **52**, 933-970.
- [65] **Kumar, P., Starr, F. W., Buldyrev, S. V. and Stanley, H. E.**, 2007. Effect of water-wall interaction potential on the properties of nanoconfined water, *Phys. Rev. E*, **75**, 011202(1-8).
- [66] **Tang, H. Y. And Ford, I. J.**, 2006. Microscopic simulations of molecular cluster decay: does the carrier gas affect evaporation?, *J. Chem. Phys.*, **125**, 144316 (1-14).
- [67] **Billes, W., Tscheliessnig, R. and Fischer, J.**, 2005. Molecular simulation of adsorption from dilute solutions, *Acta Biochimica Polonica*, **52**, 685-689.
- [68] **Firlej, L., and Kuchta, B.**, 2005. Low temperature phases of rare gases adsorbed on single wall carbon nanotubes, *J. Low Temp. Phys.*, **139**, 599-607.
- [69] **Irmak, A. E. ve Tomak, M.**, 2005. Sıvı nikel ve bakırın yapısal özelliklerinin moleküler dinamik simülasyonu ile incelenmesi, *Teknoloji*, **8**, 207-214.
- [70] **Nedea, S. V., Frijns, A. J. H., van Steenhoven, A. A., Markvoort, A. J. and Hilbers, P. A.**, 2005. Hybrid method coupling MD and MC simulations to study the properties of gases in microchannels and nanochannels, *Phys. Rev. E*, **72**, 016705 (1-9).
- [71] **Markvoort, A. J., Hilbers, P. A. J. and Nedea, S. V.**, 2005. Molecular dynamics study of the influence of wall-gas interactions on heat flow in nanochannels, *Phys. Rev. E*, **71**, 066702 (1-9).
- [72] **Maciolek, A., Evans, R. and Wilding, N. B.**, 2003. Effects of weak surface fields on the density profiles and adsorption of a confined fluid near bulk criticality, *J. Chem. Phys.*, **119**, 8663-8675.
- [73] **Donnelly, S. E., Birtcher, R. C., Allen, C. W., Morrison, I., Furuya, K., Song, M., Mitsuishi, K. and Dahmen, U.**, 2002. Ordering in a fluid inert gas confined by flat surfaces, *Science*, **296**, 507-510.
- [74] **Whitlock, P. A., Chester, G. V. and Kalos, M. H.**, 1988. Monte Carlo study of He⁴ in two dimensions, *Phys. Rev. B*, **38**, 2418-2425.
- [75] **Weyl, H.**, 1911. Ueber die asymptotische Verteilung der Eigenwerte, *Nachrichten von der Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen, Mathematisch-Physikalische Klasse*, **1911**, 110-117.
- [76] **Kac, M.**, 1966. Can one hear the shape of a drum?, *Am. Math. Monthly*, **73**, 1-23.

- [77] **Zayed, E. M. E.**, 2004. The asymptotics of the two-dimensional wave equation for a general multi-connected vibrating membrane with piecewise smooth robin boundary conditions, *Acta Math. Sinica*, **20**, 209-222.
- [78] **Zayed, E. M. E.**, 2003. An inverse problem for the three-dimensional multi-connected vibrating membrane with robin boundary conditions, *Quart. Appl. Math.*, **61**, 233-249.
- [79] **Zayed, E. M. E.**, 2003. Inverse problems of boundary value problems for annular vibrating membranes with piecewise smooth positive functions in the boundary conditions, *Applicable Analysis*, **82**, 905-925.
- [80] **Zayed, E. M. E.**, 2000. On hearing the shape of a bounded domain with robin boundary conditions, *IMA J. Appl. Math.*, **64**, 95-108.
- [81] **Zayed, E. M. E.**, 2000. Inverse problem for a bounded domain in R^3 with piecewise smooth mixed boundary conditions, *Int. J. Theor. Phys.*, **39**, 189-205.
- [82] **Zayed, E. M. E.**, 1994. On hearing the shape of rectilinear regions, *J. Math. Phys.*, **35**, 3490-3496.
- [83] **Lapidus, M. L.**, 1991. Fractal drum, Inverse spectral problems for elliptic operators and a partial resolution of the Weyl-Berry conjecture, *Trans. of the Am. Math. Soc.*, **325**, 465-529.
- [84] **Vassiliev, D. and Safarov, Y.**, 1996. The asymptotic distribution of eigenvalues of partial differential operators, Providence R.I., American Mathematical Society.
- [85] **Clark, C.**, 1967. The asymptotic distribution of eigenvalues and eigenfunctions for elliptic boundary problems, *SIAM Rev.*, **9**, 627-646.
- [86] **Baltes, H. P.**, 1972. Asymptotic eigenvalue distribution for the wave equation in a cylinder of arbitrary cross section, *Phys. Rev. A*, **6**, 2252-2257.
- [87] **Chaba, A. N. and Pathria, R. K.**, 1973. Edge and curvature effects in Weyl's problem, *Phys.Rev.A*, **8**, 3264-3265.
- [88] **Ivrii, V. Ya.**, 1980. On the second term of the spectral asymptotics for the Laplace-Beltrami operator on manifolds with boundary, *English transl. in Functional Anal. Appl.*, **14**, 98-106.
- [89] **Netrusov, Yu. and Safarov, Yu.**, 2003. Weyl asymptotic formula for the Laplacian on domains with rough boundaries, *Commun.Math.Phys.*, **253**, 481-509.
- [90] **Prudnikov, A. P.**, 1980. Integrals and Series, Vol.3, Gordon and Breach, New York.
- [91] **Murray, R. S.**, 1968. Mathematical Handbook of Formulas and Tables, pp.109, McGraw-Hill, New York.
- [92] **Artemenko, S.N., Xianlong, G. and Wonneberger, W.**, 2004. Friedel oscillations in a gas of interacting one-dimensional fermionic atoms confined in a harmonic trap, *J.Phys.B:At.Mol.Opt.Phys.*, **37**, 49-58.
- [93] **Wang, Y., Voit, J. and Pu, F. C.**, 1996. Exact boundary critical exponents and tunneling effects in integrable models for quantum wires, *Phys.Rev.B*, **54**, 8491-8500.
- [94] **Tüttő, I. and Zawadowski, A.**, 1985. Quantum theory of local perturbation of the charge-density wave by an impurity: Friedel oscillations, *Phys.Rev.B*, **32**, 2449-2470.
- [95] **Blythe, T. and Bloor, D.**, 2005. Electrical Properties of Polymers, 2nd Ed., Cambridge University Press, Cambridge.

EK-A : WEYL VARSAYIMI, PARÇACIK YOĞUNLUĞU VE HELMHOLTZ SERBEST ENERJİSİ

Weyl varsayımına göre tek parçacık için kararlı hal Schrödinger denkleminin özdeğer spektrumunda κ değerini aşmayan özdeğerlerin sayısı, aşağıdaki asimptotik ifade ile verilir,

$$\Omega_D(\kappa) = \frac{V\kappa^3}{6\pi^2} \Theta(D-3) + (-1)^D \frac{A\kappa^2}{4^{D-2}4\pi} \Theta(D-2) + (-1)^{D-1} \frac{C\kappa}{4^{D-1}\pi} \Theta(D-1) + (-1)^{D-2} \frac{N_C}{4^D}. \quad (\text{A.1})$$

Bu ifadede V , A , C , N_C sırasıyla domenin hacmi, yüzey alanı, çevre uzunluğu (periferi) ve köşe sayısıdır. $\Theta(x)$ ise adım fonksiyonudur. Buna göre tek parçacık hal yoğunluğu aşağıdaki gibi yazılır,

$$g_D = \frac{d\Omega_D(\kappa)}{d\kappa} = \frac{V\kappa^2}{2\pi^2} \Theta(D-3) + (-1)^D \frac{A\kappa}{4^{D-2}2\pi} \Theta(D-2) + (-1)^{D-1} \frac{C}{4^{D-1}\pi} \Theta(D-1). \quad (\text{A.2})$$

Böylece κ ile $\kappa+d\kappa$ aralığındaki hal sayısı,

$$d\Omega_D(\kappa) = g_D(\kappa)d\kappa = \frac{V\kappa^2}{2\pi^2} \Theta(D-3)d\kappa + (-1)^D \frac{A\kappa}{4^{D-2}2\pi} \Theta(D-2)d\kappa + (-1)^{D-1} \frac{C}{4^{D-1}\pi} \Theta(D-1)d\kappa \quad (\text{A.3})$$

olarak ifade edilir. Enerji özdeğerleri ve κ dalga sayısı arasında,

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m} = \frac{(\hbar\kappa)^2}{2m} = \frac{\hbar^2\kappa^2}{8m\pi^2} \quad (\text{A.4})$$

biçiminde bir bağıntı vardır. Buna göre denklem (A.3) enerji özdeğerleri cinsinden aşağıdaki gibi yeniden yazılabilir:

$$d\Omega_D(\varepsilon) = \frac{2V(2m)^{3/2}}{\hbar^3} \sqrt{\varepsilon} \Theta(D-3)d\varepsilon + (-1)^D \frac{2Am}{4^{D-2}\hbar^2} \Theta(D-2)d\varepsilon + (-1)^{D-1} \frac{C\sqrt{2m}}{4^{D-1}\hbar} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \Theta(D-1)d\varepsilon. \quad (\text{A.5})$$

FD ve BE istatistiğinde, ε_l enerji seviyesi için dağılım fonksiyonu aşağıdaki gibidir:

$$\left(\begin{array}{c} FD \\ BE \end{array} \right) f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{-\Lambda + \varepsilon/k_b T} \pm 1}. \quad (\text{A.6})$$

Tüm enerji seviyeleri göz önüne alındığında domendeki parçacık sayısı,

$$N = \sum_l f(\varepsilon_l) \Delta\Omega_l \quad (\text{A.7})$$

olarak yazılır. Denklem (A.5) gözönüne alınırsa enerji özdeğerlerinin ayrıklığı ihmal edilebilir. Bu durumda denklem (A.7) aşağıdaki ifadeye dönüşür:

$$N = \int_0^{\infty} f(\varepsilon) d\Omega_D(\varepsilon). \quad (\text{A.8})$$

$t^2 = \varepsilon/k_b T$ şeklinde değişken dönüşümü yaparak denklem (A.5) aşağıdaki forma dönüşür:

$$d\Omega_D(t) = \frac{4V}{\sqrt{\pi}\lambda_r^3} \Theta(D-3) t^2 dt + (-1)^D \frac{2A}{4^{D-2}\lambda_r^2} \Theta(D-2) t dt + (-1)^{D-1} \frac{2C}{4^{D-1}\sqrt{\pi}\lambda_r} \Theta(D-1) dt. \quad (\text{A.9})$$

Burada λ_r parçacıkların termal de Broglie dalgaboyu olup aşağıdaki ifade ile verilmektedir:

$$\lambda_r = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_b T}}. \quad (\text{A.10})$$

Değişken dönüşümünden sonra denklem (A.6) ise aşağıdaki formda yeniden yazılabilir,

$$\left(\begin{array}{c} FD \\ BE \end{array} \right) f(t) = \frac{1}{e^{-\Lambda+t^2} \pm 1}. \quad (\text{A.11})$$

Bu durumda denklem (A.8) ile verilen parçacık sayısı ifadesi,

$$\left(\begin{array}{c} FD \\ BE \end{array} \right) N = \frac{4V}{\sqrt{\pi}\lambda_r^3} \Theta(D-3) \int_0^{\infty} \frac{t^2}{e^{-\Lambda+t^2} \pm 1} dt + (-1)^D \frac{2A}{4^{D-2}\lambda_r^2} \Theta(D-2) \int_0^{\infty} \frac{t}{e^{-\Lambda+t^2} \pm 1} dt + (-1)^{D-1} \frac{2C}{4^{D-1}\sqrt{\pi}\lambda_r} \Theta(D-1) \int_0^{\infty} \frac{1}{e^{-\Lambda+t^2} \pm 1} dt \quad (\text{A.12})$$

şeklinde yeniden yazılabilir. İntegraller alınıp gerekli düzenlemeler yapıldıktan sonra denklem (A.12) aşağıdaki şekle dönüşür:

$$\left(\begin{array}{c} FD \\ BE \end{array} \right) N = \mp \frac{V}{\lambda_r^3} \Theta(D-3) Li_{3/2}(\mp e^{\Lambda}) \mp (-1)^D \frac{A}{4^{D-2}\lambda_r^2} \Theta(D-2) Li_1(\mp e^{\Lambda}) \mp (-1)^{D-1} \frac{C}{4^{D-1}\lambda_r} \Theta(D-1) Li_{1/2}(\mp e^{\Lambda}). \quad (\text{A.13})$$

Helmholtz serbest enerji ifadesi ideal kuantum gazları için aşağıdaki şekilde verilir:

$$\left(\begin{array}{c} FD \\ BE \end{array} \right) F = N k_b T \Lambda \mp k_b T \sum_r \ln[1 \pm \exp(\Lambda - \varepsilon_r/k_b T)]. \quad (\text{A.14})$$

Bu ifadede $\sum_r \ln[1 \pm \exp(\Lambda - \varepsilon_r/k_b T)]$, büyük bölüşüm fonksiyonu olarak adlandırılır ve Z ile gösterilir. $t^2 = \varepsilon/k_b T$ dönüşümü yapılır ve tek parçacık hal yoğunluğu da göz önüne alınınca sonsuz seri toplam yerine integral ifade kullanılırsa, bölüşüm fonksiyonu,

$$Z = \sum_r \ln[1 \pm \exp(\Lambda - t^2)] \rightarrow \int_0^\infty \ln[1 \pm \exp(\Lambda - t^2)] d\Omega_D(t) \quad (\text{A.15})$$

şeklinde ifade edilebilir.

Buna göre büyük bölüşüm fonksiyonu aşağıdaki gibi düzenlenebilir:

$$\left(\begin{array}{c} FD \\ BE \end{array} \right) Z = \frac{4V}{\sqrt{\pi}\lambda_r^3} \Theta(D-3) \int_0^\infty t^2 \ln(1 \pm e^{\Lambda-t^2}) dt + (-1)^D \frac{2A}{4^{D-2}\lambda_r^2} \Theta(D-2) \int_0^\infty t \ln(1 \pm e^{\Lambda-t^2}) dt + (-1)^{D-1} \frac{2C}{4^{D-1}\sqrt{\pi}\lambda_r} \Theta(D-1) \int_0^\infty \ln(1 \pm e^{\Lambda-t^2}) dt. \quad (\text{A.16})$$

Birinci, ikinci ve üçüncü integralleri hesaplamak için sırasıyla aşağıdaki değişken dönüşümü yapılabilir:

$$u = \ln(1 \pm e^{\Lambda-t^2}) \rightarrow du = \frac{\mp 2t}{1 \pm e^{-\Lambda+t^2}} dt, \quad dv = t^2 dt \rightarrow v = \frac{t^3}{3}, \quad (\text{A.17})$$

$$u = \ln(1 \pm e^{\Lambda-t^2}) \rightarrow du = \frac{\mp 2t}{1 \pm e^{-\Lambda+t^2}} dt, \quad dv = t dt \rightarrow v = \frac{t^2}{2}, \quad (\text{A.18})$$

$$u = \ln(1 \pm e^{\Lambda-t^2}) \rightarrow du = \frac{\mp 2t}{1 \pm e^{-\Lambda+t^2}} dt, \quad dv = dt \rightarrow v = t. \quad (\text{A.19})$$

Buradan hareketle integraller alındığında denklem (A.16) aşağıdaki şekilde elde edilir:

$$\left(\begin{array}{c} FD \\ BE \end{array} \right) Z = -\frac{V}{\lambda_r^3} \Theta(D-3) Li_{5/2}(\mp e^\Lambda) \mp (-1)^D \frac{A}{4^{D-2}\lambda_r^2} \Theta(D-2) Li_2(\mp e^\Lambda) \mp (-1)^{D-1} \frac{C}{4^{D-1}\lambda_r} \Theta(D-1) Li_{3/2}(\mp e^\Lambda). \quad (\text{A.20})$$

Buradan hareketle de serbest enerji ifadesi

$$\left(\begin{array}{c} FD \\ BE \end{array} \right) \frac{F}{Nk_b T} = \Lambda - \frac{\frac{V}{\lambda_r^3} Li_{5/2}[\mp e^\Lambda] \Theta(D-3) + (-1)^D \frac{A}{4^{D-2}\lambda_r^2} Li_2[\mp e^\Lambda] \Theta(D-2) + (-1)^{D-1} \frac{C}{4^{D-1}\lambda_r} Li_{3/2}[\mp e^\Lambda] \Theta(D-1) + (-1)^{D-2} \frac{N_C}{4^D} Li_1[\mp e^\Lambda]}{\frac{V}{\lambda_r^3} Li_{3/2}[\mp e^\Lambda] \Theta(D-3) + (-1)^D \frac{A}{4^{D-2}\lambda_r^2} Li_1[\mp e^\Lambda] \Theta(D-2) + (-1)^{D-1} \frac{C}{4^{D-1}\lambda_r} Li_{1/2}[\mp e^\Lambda] \Theta(D-1) + (-1)^{D-2} \frac{N_C}{4^D} Li_0[\mp e^\Lambda]} \quad (\text{A.21})$$

olarak elde edilir.

EK-B : POLİLOGARİTMA FONKSİYONLARI

De Jonquiére fonksiyonu da denilen polilogaritmalar aşağıdaki şekilde tanımlanan özel fonksiyonlardır,

$$Li_D(z) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^D}. \quad (B.1)$$

Yukarıdaki ifade bütün D ve z karmaşık sayıları için geçerlidir. Polilogaritmaların teorisi, Euler'in dilog ($D=2$) (Spence fonksiyonu), Landen'in trilog ($D=3$) ve daha sonra quadrilog gibi daha yüksek dereceli polilogaritmalara dayanır. İstatistiksel Fizik uygulamalarında polilogaritmanın derecesi genellikle domenin fiziksel boyutuyla, D , ilişkilidir. Polilogaritmik fonksiyonlar aşağıda verilen bazı özelliklere sahiptir,

$$z \frac{d}{dz} Li_{D+1}(z) = Li_D(z), \quad (B.2)$$

$$Li_D(1) = \begin{cases} \zeta(D), & \text{Riemann zeta fonksiyonu, } D > 1 \\ \infty, & D \leq 1 \end{cases}, \quad (B.3)$$

$$Li_1(z) = -\ln(1-z), \quad z \neq 1, \quad (B.4)$$

$$Li_0(z) = \frac{z}{1-z}. \quad (B.5)$$

Son zamanlarda kuantum gazlarının termodinamik özelliklerinin, fugasite ($z=e^\Lambda$) ve boyutun (D) fonksiyonu olan polilogaritmik fonksiyonlar ile temsil edilebileceği anlaşılmıştır. Aşağıdaki gibi Fermi-Dirac (FD) ve Bose-Einstein (BE) integrallerinin çözümü polilogaritmik fonksiyonlarla temsil edilebilir:

$$\int_0^{\infty} \frac{x^D}{\exp(-\Lambda + x) \mp 1} dx = \pm \Gamma(D+1) Li_{D+1}[\pm \exp(\Lambda)]. \quad (B.6)$$

Polilogaritma fonksiyonlarının asimptotik açılımları aşağıdaki gibi verilir:

$$\Lambda \ll -1 \Rightarrow Li_{D+1}(\mp e^\Lambda) \approx \mp e^\Lambda \pm \frac{e^{2\Lambda}}{2^{D+1}} \mp \frac{e^{3\Lambda}}{3^{D+1}} \pm o(4), \quad (B.7)$$

$$\Lambda \gg 1 \Rightarrow Li_{D+1}(-e^\Lambda) \approx -\frac{1}{D\Gamma(D)} \left[\frac{\Lambda^{D+1}}{D+1} + \frac{\pi^2}{6} D\Lambda^{D-1} + o(4) \right]. \quad (B.8)$$

Burada $\Gamma(D)$, gamma fonksiyonudur. Bu çalışmada kullanılan bazı polilogaritma fonksiyonlarının asimptotik ifadeleri ise aşağıda verilmektedir.

$\Lambda \gg 1$ için bazı polilogaritmalardan asimptotik değerleri:

$$Li_{5/2}(-e^\Lambda) \cong -\frac{8\Lambda^{5/2}}{15\sqrt{\pi}} \left[1 + \frac{5\pi^2}{8} \frac{1}{\Lambda^2} \right] \quad (B.9)$$

$$Li_2(-e^\Lambda) \cong -\frac{\Lambda^2}{2} \left[1 + \frac{\pi^2}{3} \frac{1}{\Lambda^2} \right] \quad (B.10)$$

$$Li_{3/2}(-e^\Lambda) \cong -\frac{4\Lambda^{3/2}}{3\sqrt{\pi}} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \frac{1}{\Lambda^2} \right] \quad (B.11)$$

$$Li_1(-e^\Lambda) \cong -\Lambda - \exp(-\Lambda) \approx -\Lambda \quad (B.12)$$

$$Li_{1/2}(-e^\Lambda) \cong -\frac{2\Lambda^{1/2}}{\sqrt{\pi}} \left[1 - \frac{\pi^2}{24} \frac{1}{\Lambda^2} \right] \quad (B.13)$$

$$Li_0(-e^\Lambda) \cong -1 - \exp(-\Lambda) \approx -1 \quad (B.14)$$

Yukarıda verilen asimptotik ifadeler, $\Lambda=10$ için dahi, 2×10^{-4} 'den daha az hata içermektedir. $\Lambda \rightarrow 0$ için bazı polilogaritmalardan asimptotik değerleri aşağıda verilmiştir,

$$Li_{5/2}(e^\Lambda) \cong \zeta\left(\frac{5}{2}\right) + \zeta\left(\frac{3}{2}\right)\Lambda \quad (B.15)$$

$$Li_2(e^\Lambda) \cong \frac{\pi^2}{6} - \Lambda \ln(-\Lambda) \quad (B.16)$$

$$Li_{3/2}(e^\Lambda) \cong \zeta\left(\frac{3}{2}\right) - 2\sqrt{\pi}\sqrt{-\Lambda} \quad (B.17)$$

$$Li_1(e^\Lambda) \cong -\ln(1 - e^\Lambda) \approx -\ln(-\Lambda) - \frac{\Lambda}{2} \quad (B.18)$$

$$Li_{1/2}(e^\Lambda) \cong \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{-\Lambda}} + \zeta\left(\frac{1}{2}\right) \quad (B.19)$$

$$Li_0(e^\Lambda) \cong -\frac{1}{\Lambda} - \frac{1}{2} \quad (B.20)$$

Burada verilen asimptotik ifadeler, $\Lambda=-0.01$ için dahi, 6×10^{-3} 'den daha az hata içermektedir.

EK-C : SCHRÖDINGER DENKLEMİNİN SAYISAL ÇÖZÜMÜ

COMSOL Multiphysics, kısmi diferansiyel denklem (PDE) bazlı her tür bilimsel ve mühendislik problemlerini sonlu elemanlar metodu (FEM) temelinde modelleyip çözebilen etkileşimli arayüze sahip bir yazılımdır. Bu yazılım içerisinde hazır olarak tanımlanmış bazı modüller sayesinde, çeşitli amaçlara uygun fiziksel problemler için (madde özellikleri, yükler, sınırlandırmalar, kaynaklar ve akılar gibi) büyüklükler tanımlanarak bir model kurmak mümkündür. Model kurulduktan sonra program modelle ilgili PDE'yi çözer.

Program çok çeşitli sayısal çözümler (algoritmalar) kullanarak, ızgara oluşturma (meşleme) ve hata kontrolü ile birlikte sonlu elemanlar analizi yapar. Bu algoritmaların tümü, her bir problemi lineerleştirilmiş bir problem olarak ele alıp, bir ya da bir kaç lineer sistem çözümüne indirir.

Yazılım, doğru Jacobian matrisi hesaplamaya çalışır ve hem simetrik hem Hermitian matrisler için simetriyi otomatik olarak yakalar. Böylece problem çözümü için tüm ihtiyaç duyulan şey hesaplama zamanı kazandıracak çözüm algoritmasını belirlemek olacaktır. PDE problemi ayrıklaştırılınca bir simetrik Jacobian matris (veya zaman bağımlı ya da özdeğer problemleri için simetrik mass matrisi) elde edilir. Bu lineer sistemi çözmek için daha hızlı ve daha az bilgisayar hafızası harcayan bir algoritma seçilmelidir. Ancak genel olarak, çoklu-fizik problemleri non-simetrik matrisler üretir. Çözümde matris tipi simetrik seçilirse yanlış bir çözüm elde edilir. Bu sebeple matris tipi belirlenmemişse “automatic” seçeneği kullanılması doğru olacaktır.

Gerçek simetrik ya da Hermitian matrisler pozitif-definite matrislerdir. COMSOL bu tip matrisler içinde etkin lineer sistem algoritmaları içermektedir. Bu algoritmalar direk veya iteratif yöntemler kullanırlar.

COMSOL'da bulunan birkaç lineer sistem algoritması şunlardır:

Direk çözüm algoritmaları:

- UMFPACK
- SPOOLES
- PARDISO
- TAUCS

İteratif çözüm algoritmaları:

- GMRES
- Cojugate gradients
- Geometric multigrid

Bilgisayar hafızası kullanımı açısından, az serbestlik derecesi içeren modellerde doğrudan (direkt), diğerlerinde iteratif yöntemler kullanmak gerekir. Buna karşılık iteratif yöntemler direkt yöntemlere göre daha az stabil olup, her zaman

yakınsamazlar (çözüm sağlayamazlar). “Geometric multigrid” hariç, iteratif yöntemlerde yakınsama sağlamanın yolu uygun Preconditioner’i (M, birim matrisle yakın bir matris, preconditioner ile sistem $Ax=b$ biçimindeyken, $M^{-1}Ax=M^{-1}b$ biçimine dönüşür) seçmekten geçer.

Bu çalışmada ele alınan sistemler için kurulan modellerde COMSOL tarafından yapılan ayrıklaştırma sonucu oluşan matris Hermitian ve pozitif-definite olduğundan (yazılımda modele ait parametrelerden anlaşılabilir) direk Cholesky (TAUCS) algoritması seçilerek çözüm yapıldı.

TAUCS Cholesky direct solver algoritması $Ax=b$ formundaki sistemler için kullanılır. Bu algoritmada Cholesky factorization (çarpanlara ayırma, $A=LL^T$) yapılır. COMSOL’da bu algoritma C dilinde yazılmış olup algoritmada maksimum performans için Level-3 BLAS (matris-matris işlemleri = temel lineer cebir altprogramları) kullanılmaktadır. COMSOL Multiphysics’de Sivan Toledo ve arkadaşları tarafından yazılan TAUCS version 2.2 kullanılmaktadır.

(<http://www.tau.ac.il/~stoledo/taucs>).

Model kurma ve problem çözümü için FEMLAB’da izlenen adımlar:

- COMSOL açıldıktan sonra, “Model Navigator”de boyut seçimi, bir uygulama modu (/COMSOL Multiphysics/PDE modes/Classical PDEs/Schrodinger equation) ve eleman tipi (Lagrange/Hermite ve quadratic/cubic vs.) seçilir.
- Geometri belirlenir.
- PDE-nin katsayıları belirlenir.
- Sınır koşulları belirlenir.
- Meşleme yapılır, gerekirse sık meşleme seçeneği kullanılır.
- Kullanılacak algoritmanın parametreleri ayarlanır ve çözüme geçilir.

Bu çalışmada COMSOL’dan elde edilen özdeğer ve özfonksiyonlar MATLAB’a taşınarak bir hesaplama kodu yardımıyla, AMD Opteron 250, 2Gb Ram özellikli bir bilgisayarda yoğunluk dağılımı hesaplanmış ve grafikler elde edilmiştir.

ÖZGEÇMİŞ

1965 yılında İstanbul'da doğdu. Lise öğrenimini Kartal Orhangazi Lisesi'nde tamamladıktan sonra 1987 yılında İstanbul Üniversitesi Fen Fakültesi Astronomi ve Uzay Bilimleri Bölümü'nden mezun oldu. Aynı yıl İstanbul Teknik Üniversitesi Nükleer Enerji Enstitüsü'nde yüksek lisans eğitimine başladı. 1991 yılında yüksek lisansını tamamlamıştır. Uluslararası dergilerde yayınlanmış 3 makale, 3 uluslararası bildiri, 2 ulusal bildiri ve 1 sempozyum bildirisi mevcuttur. İngilizce bilmekte olup, evli ve 1 çocuk babasıdır.