

İSTANBUL TEKNİK ÜNİVERSİTESİ ★ LİSANSÜSTÜ EĞİTİM ENSTİTÜSÜ

**PERİYODİK POTANSİYELİN HERMİTSEL OLMAYAN
FERMİYONİK SÜPERAKIŞKANLIK ÜZERİNE ETKİSİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

M. Koray HURMA

Fizik Mühendisliği Anabilim Dalı

Fizik Mühendisliği Programı

HAZİRAN 2025

İSTANBUL TEKNİK ÜNİVERSİTESİ ★ LİSANSÜSTÜ EĞİTİM ENSTİTÜSÜ

**PERİYODİK POTANSİYELİN HERMİTSEL OLMAYAN
FERMİYONİK SÜPERAKIŞKANLIK ÜZERİNE ETKİSİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

**M. Koray HURMA
(509031116)**

Fizik Mühendisliği Anabilim Dalı

Fizik Mühendisliği Programı

Tez Danışmanı: Prof. Dr. Ahmet Levent SUBAŞI

HAZİRAN 2025

ISTANBUL TECHNICAL UNIVERSITY ★ GRADUATE SCHOOL

**EFFECTS OF PERIODIC POTENTIALS
ON THE NON-HERMITIAN FERMIONIC SUPERFLUIDITY**

M.Sc. THESIS

**M. Koray HURMA
(509031116)**

Department of Physics Engineering

Physics Engineering Programme

Thesis Advisor: Prof. Dr. Ahmet Levent SUBAŞI

HAZİRAN 2025

İTÜ, Lisansüstü Eğitim Enstitüsü'nün 509031116 numaralı Yüksek Lisans Öğrencisi M. Koray HURMA, ilgili yönetmeliklerin belirlediği gerekli tüm şartları yerine getirdikten sonra hazırladığı “PERİYODİK POTANSİYELİN HERMİTSEL OLMAYAN FERMİYONİK SÜPERAKIŞKANLIK ÜZERİNE ETKİSİ” başlıklı tezini aşağıda imzaları olan jüri önünde başarı ile sunmuştur.

Tez Danışmanı : **Prof. Dr. Ahmet Levent SUBAŞI**
İstanbul Teknik Üniversitesi

Jüri Üyeleri : **Prof. Dr. Ali Yıldız**
İstanbul Teknik Üniversitesi

Prof. Dr. Menderes Işkın
Koç Üniversitesi

.....

Teslim Tarihi : **30 Mayıs 2025**
Savunma Tarihi : **30 Haziran 2025**



ÖNSÖZ

Bu tezde, ultrasoğuk atom deneylerindeki keşiflerle doğrudan ilişkili olan ve her seferinde tekrar dikkatleri üzerine çeken, iki parçacık problemi üzerine çalıştık. Kuantum mekaniğine has umulmadık davranışlar, her zamanki gibi gene kendini gösterdi. Bilhassa sürekli spektrum içinde yakaladığımız bağlı durumlar (BIC), farklı örgü yapıları için, uzun süre tartışılmaya devam edecektir. Çalışmam esnasındaki tüm yardımlarından ötürü değerli hocam Prof. Dr. Ahmet Levent SUBAŞI'ya teşekkürlerimi sunuyorum.

Haziran 2025

M. Koray HURMA
Makina Mühendisi



İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖNSÖZ	vii
İÇİNDEKİLER	x
KISALTMALAR	xi
SEMBOLLER	xiii
ÇİZELGE LİSTESİ	xv
ŞEKİL LİSTESİ	xix
ÖZET	xxi
SUMMARY	xxiii
1. GİRİŞ	1
1.1 Periyodik Potansiyelde Tek Parçacık Problemi	1
1.1.1 Enerji bant yapısı	2
1.1.2 Nümerik çözüm	4
1.1.3 Tek parçacık probleminin gerçek uzayda çözümü	6
1.1.4 Bloch durumlarının ortanormallığı	7
1.1.5 Wannier Fonksiyonları	10
1.2 İki Parçacıklı Sistemlere Giriş	11
1.2.1 İki parçacık kuantum durumlarının gösterimi	11
1.2.2 Saçılma matrisi	11
1.2.3 Sıkıbağ-Hubbard modeli	12
1.2.4 İki parçacık baz uzayının oluşturulması	12
1.3 Hermitsel Olmayan Kuantum Mekanığı	13
1.3.1 Özdeğerler ve özvektörler	14
1.3.2 Etkileşim kaynaklı kayıpların modellenmesi	14
2. PERİYODİK POTANSİYELDE İKİ PARÇACIK PROBLEMİ	15
2.1 İki Parçacıklı Sistemler	15
2.1.1 Kütle merkezi ve relatif koordinat ayrımı	17
2.1.2 Bloch tabanında iki parçacık problemi	19
2.1.3 Bloch durumu matris elemanları	21
2.1.4 İki parçacık enerji öz durumları	23
2.1.5 Sıfırdan farklı matris elemanları	24
2.2 Tek Bant Yaklaşımı	25
2.2.1 Tek bant yaklaşımında gerçek uzayda iki parçacık problemi	26
2.2.2 Bloch tabanı temsili	28
2.2.3 Bağlı durumlar	30
2.2.3.1 Bağ uzunluğu	30
2.2.3.2 Katılım oranı	32
2.2.3.3 Etkin kütle	33
2.2.4 Tek bant yaklaşımında Cooper çifti problemi	34
2.3 Kompleks Etkileşim Etkileri	35
3. SONUÇ	43
KAYNAKLAR	45
EKLER	47
EK A : Program Kodları	49
EK B : Gerçek Uzayda Çözüm Julia Program Kodları	59
EK C : Momentum Uzayında Çözüm Julia Program Kodları	67

ÖZGEÇMİŞ	75
-----------------------	-----------



KISALTMALAR

BZ	: Brillouin zone - Brillouin bölgesi
BCS	: Bardeen-Cooper-Schrieffer
BEC	: Bose-Einstein condensation - Bose-Einstein yoğunlaşması
BIC	: Bound state in the continuum - Sürekli ortamdaki bağlı durum
PR	: Participation ratio - Katılım oranı
IPR	: Inverse participation ratio - Ters katılım oranı





SEMBOLLER

Ψ_{nk}	: Bloch dalga fonksiyonu
ε_{nk}	: Enerji öz durumları
$U(\mathbf{x})$	: Periyodik potansiyel
$\mathbf{G}_n$	: Ters örgü vektörü
C_{nk}	: Bloch durumu katsayıları
w_n	: Wannier fonksiyonu
a	: Örgü periyodu
$\mathbf{k}$	: Kuazimomentum - Kristal momentumu
$\mathbf{K}$	: Kütle merkezi kuazimomentumu
$\mathbf{k}_{rel}, \mathbf{q}$	: Relatif momentum
g	: Kontak etkileşim parametresi
a_s	: Saçılma uzunluğu
U	: Hubbard etkileşim sabiti
H_{1p}	: Bir parçacık hamiltoniyeni
H_{2p}	: İki parçacık hamiltoniyeni
J	: Hoplama parametresi
t	: Geçiş katsayısı
H_{NH}	: Nonhermitsel hamiltoniyen
γ	: Kompleks etkileşim parametresi



ÇİZELGE LİSTESİ

Sayfa





ŞEKİL LİSTESİ

	<u>Sayfa</u>
Şekil 1.1 : Birinci Brillouin bölgesindeki enerji bantları.	5
Şekil 1.2 : Tek parçacık gerçek uzay enerji spekturumu.....	7
Şekil 1.3 : Farklı bantlardaki, aynı k durumuna karşılık gelen Bloch durumları ortagonaldir.	8
Şekil 1.4 : İlk ve ikinci bant için $k = 0$ kuazi-momentum $u_{nk}(x)$ periyodik fonksiyonlarının reel ve imajiner kısımlarının birim hücre içindeki görünümü. Buradaki gibi aynı k değerine sahip farklı Bloch fonksiyonları birbirine diktir.	9
Şekil 1.5 : Atomik orbitaller üzerine konumlandırılmış Bloch fonksiyonunun şematik gösterimi.	10
Şekil 1.6 : Lokalize Wannier fonksiyonları.	10
Şekil 1.7 : Saçılma diyagramı.	11
Şekil 2.1 : Periyodik sınır koşullarının geçerli olduğu N hücreden oluşan bir boyutlu simülasyon kutusunun temsili: Aynı hücredeki iki parçacık arasındaki kompleks etkileşim $U_0 + i\gamma$ ve periyodik potansiyel $U(x)$ ile gösterilmiştir.	15
Şekil 2.2 : Etkileşen iki parçacığın, momentum uzayındaki durumlarının değişimi.	24
Şekil 2.3 : Tek bant yaklaşımında, iki parçacık enerjilerinin, kütle merkezi kuazimomentumuna göre değişimi: İlk grafik (a) çekici etkileşim için, ikinci grafik (b) itici etkileşim için çizilmiştir. Renk kodu, durumun katılım oranını göstermektedir ve siyah renk bağlı durumları göstermektedir.	27
Şekil 2.4 : Kütle merkezi kuazimomentumunun parçacık indisine göre grafiği. ...	29
Şekil 2.5 : Bloch tabanı temsiline göre elde edilen bağlı durum enerjilerinin kütle merkezi kuazimomentumuna göre grafiği.	31
Şekil 2.6 : $K = 0$ ve $K = \pi$ kütle merkezi kuazimomentumuna sahip bağlı durumların, olasılık dağılımlarının relatif koordinata göre grafiği.	31
Şekil 2.7 : $K = 0$ ve $K = \pi$ kütle merkezi kuazimomentumuna sahip saçılma durumların, olasılık dağılımlarının relatif koordinata göre grafiği.	32
Şekil 2.8 : Bağlı durum enerjilerinin kütle merkezi kuazimomentumuna göre grafiğine $K = 0$ civarında eğri uydurarak bu durum için etkin kütleyi hesaplayabiliriz.	33
Şekil 2.9 : Kompleks etkileşim olduğunda $K = 0$ durumuna ait enerjilerin; (a) reel ve (b) imajiner kısımları.	36
Şekil 2.10 : Kompleks etkileşim durumunda, farklı U Hubbard etkileşim sabiti ve farklı γ sönüm faktörleri için; iki parçacıklı sistem enerjilerinin, kütle merkezi kuazimomentumuna göre değişimi.	37

Şekil 2.11 : Bağlı durum enerjilerinin reel ve imajiner kısımlarının kütle merkezi momentumu, K_{KM} ile değişimi: Farklı renkteki eğriler etkileşim parametresinin sanal kısmının (γ) farklı değerleri içindir.....	38
Şekil 2.12 : Toplam momentumu sıfır olan ($K_{KM} = 0$) bağlı durumların enerjilerinin etkileşim parametresinin sanal kısmı, γ , ile değişimi. Farklı eğriler etkileşim parametresinin reel kısmının (U_0) farklı değerleri içindir.	39
Şekil 2.13 : Toplam momentumu sıfır olan ($K_{KM} = 0$) bağlı durumların etkin kütlelerinin etkileşim parametresinin sanal kısmı, γ , ile değişimi. Farklı eğriler etkileşim parametresinin reel kısmının (U_0) farklı değerleri içindir.	40
Şekil 2.14 : Yarı dolu bant için Fermi seviyesi.....	40
Şekil 2.15 : Yarı dolu bant ($E_F = 2J$) için toplam momentumu sıfır olan ($K_{KM} = 0$) Cooper çifti enerjilerinin etkileşim parametresinin sanal kısmı, γ , ile değişimi. Farklı eğriler etkileşim parametresinin reel kısmının (U_0) farklı değerleri içindir.	41
Şekil A.1 : Her bantta $N_K = 101$ durum ve 21 adet bant seçildiğinde toplam $21 \times 101 = 2121$ durum olur.....	49
Şekil A.2 : Birinci banttaki enerji değerleri.....	49
Şekil A.3 : Birinci bandın genişliği.	49
Şekil A.4 : Gerçek uzayda baz kümesinin oluşturulması.....	50
Şekil A.5 : Gerçek uzayda hamiltoniyen operatörünün oluşturulması ve öz durumların listelenmesi.	50
Şekil A.6 : Bloch durumlarının ortonormalliği.	51
Şekil A.7 : Gerçek uzayda enerji özdeğerlerinin çizdirilmesi.....	51
Şekil A.8 : Bloch durumlarının ortonormalliği.	51
Şekil A.9 : Bloch durumları listesi.	51
Şekil A.10 : Gerçek uzayda enerji özdeğerlerinin çizdirilmesi.	52
Şekil A.11 : İki parçacık Bloch durumları.	52
Şekil A.12 : Sıfırdan farklı matris elemanları.	52
Şekil A.13 : Sıfırdan farklı matris elemanları (k uzayında).	52
Şekil A.14 : Etkileşen iki durum arasındaki matris elemanı.	53
Şekil A.15 : Valiente ve Petrosyan (1.yöntem).....	53
Şekil A.16 : Bloch bazı k değerleri.	54
Şekil A.17 : K 'ya göre gruplanmış durumlar.	55
Şekil A.18 : Tek bant yaklaşımında E-K grafiği (İkinci yöntem).	55
Şekil A.19 : Hermitsel hamiltoniyen.	56
Şekil A.20 : Hermitsel olmayan hamiltoniyen.	56
Şekil A.21 : Kompleks hamiltoniyenin özdeğerleri.....	56
Şekil A.22 : PR hesabıyla bağlı durumların tespiti.	57
Şekil A.23 : Bağ uzunluğu hesabı.	57
Şekil A.24 : Etkin kütle hesabı.	57
Şekil A.25 : Kompleks etkileşimde E-K grafiği.	58
Şekil A.26 : Cooper problemi.....	58
Şekil A.27 : Cooper probleminde enerjilerin sönüm oranına göre değişimi.....	58
Şekil B.1 : Gerçek uzay kod 1.....	60
Şekil B.2 : Gerçek uzay kod 2.....	61

Şekil B.3 : Gerçek uzay kod 3.....	62
Şekil B.4 : Gerçek uzay kod 4.....	63
Şekil B.5 : Gerçek uzay kod 5.....	64
Şekil B.6 : Gerçek uzay kod 6.....	65
Şekil C.1 : Momentum uzayı kod 1.	68
Şekil C.2 : Momentum uzayı kod 2.	69
Şekil C.3 : Momentum uzayı kod 3.	70
Şekil C.4 : Momentum uzayı kod 4.	71
Şekil C.5 : Momentum uzayı kod 5.	72
Şekil C.6 : Momentum uzayı kod 6.	73





PERİYODİK POTANSİYELİN HERMİTSEL OLMAYAN FERMİYONİK SÜPERAKIŞKANLIK ÜZERİNE ETKİSİ

ÖZET

Periyodik potansiyelin fermiyonik sistemler üzerindeki etkileri, yoğun madde fiziğinin ana konularından birisidir. Periyodik potansiyel altındaki açık kuantum sistemlerinde, esnek olmayan çarpışmalar yüzünden, kayıplar meydana gelir. Bu kayıplar, hermitsel olmayan bir hamiltonyen ile modellenenebilir ve artan kayıp oranı, süperakışkanlık üzerine monoton olmayan etkiler meydana getirebilir.

Bu çalışmada, özellikle bu kayıpların, süperakışkan durum üzerine etkilerini incelemek istiyoruz. Bunun için bir boyutlu optik örgüde, iki parçacık problemini ve buna bağlı olan Cooper çifti problemini ele alıyoruz. Hesabı kolaylaştırmak için sadece ilk enerji bandını dikkate aldığımız "tek bant yaklaşımı" altında, sıkı bağ modelini kullanıyoruz. Parçacık kayıplarına sebep olan esnek olmayan çarpışmaları, kompleks etkileşim parametresi ile modelliyoruz.

Nümerik çözümümüzde, hem konum hem de momentum bazında, hamiltoniyen matrisini oluşturup köşegenleştiriyoruz. Tek bant yaklaşımında; bağlı durum enerjilerini, kütle merkezi kuazimomentumu K 'ya göre elde ediyoruz. Kompleks etkileşim olduğunda, belli enerji değerlerinde, bağlı durum eğrisinin sürekli bölge içinde oluştuğunu (BIC) ve kompleks etkileşim sabitinin artışının, bağlı durum eğrisinin K 'ya göre varyasyonunu azaltarak eğriyi düz bir banda dönüştürdüğünü görüyoruz. Etkileşimin sanal kısmının; bağlanma enerjilerini azalttığını, sonlu ömürler oluşturduğunu ve yüksek sönüm oranlarında, bağlı durumların etkin kütlelerini arttırdığını gözlemliyoruz.

Belli bir limitte süperakışkan faz, Cooper çiftlerinin oluşturduğu, bir Bose Einstein yoğunlaşması (BEC) olarak düşünülebilir. Dolayısıyla bu çalışmada kayıp mekanizmasını, Bardeen-Cooper-Schrieffer süperakışkanlığın (BCS) temelini oluşturan, Cooper problemine taşıyoruz ve aynı hesapları orada, momentum uzayında tekrarlıyoruz. Sonuçlarımız, daha önce ortalama alan teorisiyle elde edilen, sanal kısma bağlı süperakışkan düzen parametresindeki monoton olmayan davranışın; iki parçacık fiziğinden kaynaklanabileceğini göstermektedir.



EFFECTS OF PERIODIC POTENTIALS ON THE NON-HERMITIAN FERMIONIC SUPERFLUIDITY

SUMMARY

The aim of this work is to investigate the simultaneous effects of a periodic potential and a complex-valued interaction for the two-body problem in a periodic potential. This study focuses on how periodicity and non-Hermitian interactions interplay in forming bound states and shaping their physical properties. With the gained understanding of the bound-state formation in this problem and the established computational approach, we also consider the Cooper problem in the same context.

The standard approach to two-body problems is to use the so-called center-of-mass and relative coordinates instead of the individual particle coordinates. When the problem is separable, the equations decouple and the relative coordinate involving the interaction becomes effectively a one-body problem which is independent of the center-of-mass motion. However, unlike the textbook examples, the two-body problem in a periodic potential is not separable in the center-of-mass and relative coordinates. The single particle problem in a one-dimensional periodic potential, the band structure for the one-body problem has stationary states that can be labeled by their quasi-momentum k and band index n . In order to simplify the calculations, one can further make a single-band approximation where only one energy band is considered. This allows one to describe the system in terms of a tight-binding Hamiltonian where each unit cell has one orbital. Such a model is described by a hopping matrix element between nearest-neighbor unit-cells and an on-site interaction term on a lattice. The two-body problem within a single-band approximation has been studied before. The interaction leads to bound states with both repulsive and attractive interactions. Here, we focus on the binding energy of two-particles with an attractive interaction. The Cooper problem in a one-dimensional lattice has also been studied with a single band tight-binding approximation.

For the two-body problem in the lattice, a center-of-mass quasi-momentum K_{CM} can still be defined as a conserved quantity. It appears in the eigenvalue equation for the relative coordinate in the solution of the energy eigenstates as a constant and the Schrödinger equation for the relative coordinate has to be solved for each value of the center-of-mass momentum. This symmetry consideration leads to smaller problems for each K_{CM} and all solutions can be obtained in this way avoiding the larger Hilbert space to two-particles.

Our numerical approach involves constructing the Hamiltonian matrix in both position and momentum bases and diagonalizing it. We consider fermionic particles in a spin singlet state so that the spatial wave functions are symmetric under the exchange of particle coordinates.

Following previous work in the literature, we consider the problem described above with a complex-valued interaction which makes the Hamiltonian describing the system non-Hermitian. (Non-Hermitian Hamiltonians lead to complex energy eigenvalues.) The complex-valued interaction models the inelastic collision with particle losses. The mechanism for non-Hermiticity enters in the two-particle problem as opposed to other non-Hermitian mechanisms acting on the single particle dynamics. Since we focus on fermions in a spin singlet configuration, which requires the spatial part of the wave function to be symmetric under particle exchange. The inclusion of complex interactions introduces qualitative differences compared to Hermitian systems. For example, in the Hermitian case, the binding energy depends monotonically on the interaction strength. In contrast, the non-Hermitian interaction introduces non-monotonic behavior, especially in regimes where the bound-state energy overlaps with the continuum of extended two-particle states.

Considering the effects of a complex-valued interaction on the bound state energies of two-particles in a periodic potential within a single band approximation, we find that the imaginary part of the interaction leads to lower binding energies, finite life-times and increased effective masses for the bound states. As expected, the bound state with zero center-of-mass momentum has the longest lifetime and the states with maximum center-of-mass quasi-momentum have the largest decay rates for a given interaction. Finally, looking at the curvature of the real part of the bound state energy curves it is seen that the effective mass of the bound state increases with dissipation. The behavior of the dependence of these quantities on the imaginary part of the interaction is non-monotonic for weak interactions when the bound state band can be partly within the continuum of extended two particle states. This gives rise to bound states in continuum (BICs) for this model. Finally, we present the Cooper problem spectrum at half filling.

The formation of Cooper pairs, which are bound-states in the presence of a Fermi sea, is crucial for Bardeen-Cooper-Schrieffer type fermionic superfluidity and superconductivity. In particular, the condensed phase in the strongly interacting limit can be described by the Bose-Einstein condensation of Cooper pairs which behave like tightly-bound dimers. The behavior of such a system in the presence of a periodic potential, which can be realized in the laboratory with ultracold atomic gases in optical lattices, leads to a large effective mass among other effects. The peculiar band structure of the quasiparticle energy spectrum in the lattice can reduce the effects of pair-breaking excitations. Similarly, when the pairing gap is large compared to the strength of the lattice, the effects of the band structure can be suppressed which can play an important role for neutron superfluid density in the inner crust of neutron stars. Therefore, the effects of the periodic potential in superfluid systems are significant for various physical systems with vast differences in their properties such as densities and absolute temperatures. In the presence of inelastic collisions, it has been suggested that the superfluidity in ultracold atoms can show reentrant behavior with increasing dissipation for weak attractive interactions and should be enhanced by dissipation due to an interplay between the BCS-BEC crossover and the quantum Zeno effect. In addition, models with non-Hermitian dynamics and losses can host bound states in continuum for the two body problem.

With this motivation, our work offers multiple directions for further investigation. A complete analysis of the Cooper problem can be pursued for different filling values of the band. The inclusion of additional single-particle bands is also possible. The effects of a multiband problem can be studied as well as the effects of multiple dimensions. We also plan consider the consequences resulting from two-body physics for superfluid systems in a periodic potential with particle losses.





1. GİRİŞ

Periyodik potansiyel altındaki çok parçacıklı sistemlerin durumu, kuantum teorisinin başından itibaren incelenmektedir. Son zamanlarda optik örgüde, fermiyonik ve bozonik atomların soğutulması ve tuzaklanması ile ilgili deneylerdeki dikkate değer ilerleme sonucu; Hubbard modeli, yeniden ilgi görmeye başlamıştır. [7]

Periyodik potansiyel, lazer ışınlarının girişimi sonucu, duran dalga oluşturarak elde edilebilir. Bu şekilde oluşturulan yapay kristal yapıya "optik örgü" denir. Gerçek bir kristalin yarattığı potansiyel, kristali oluşturan atomların dizilimine bağlı olduğu için, sabittir. Oysa optik örgüde, kullandığımız lazer ışığının özelliklerini değiştirerek, potansiyelin; şiddeti, periyodu gibi parametreleri belirleyebiliriz ve bu parametrelerin parçacık durumlarına olan etkisini inceleyebiliriz. Öncelikle tek parçacık probleminden başlayarak bu etkileri inceleyelim.

1.1 Periyodik Potansiyelde Tek Parçacık Problemi

Bir boyutta periyodik potansiyel altındaki bir parçacık için Schrödinger denklemi,

$$H_{1p}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi \quad (1.1)$$

şeklinde olup, periyodu a olan bir potansiyel,

$$U(x) = U(x+a) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} U_n e^{iG_n x} = \sum_G U_G e^{iGx} \quad (1.2)$$

şeklinde Fourier serisi ile verilir. Homojen sistemde enerji öz durumları için, momentum dalga fonksiyonları cinsinden,

$$\psi(x) = \sum_k C_k e^{ikx} \quad (1.3)$$

şeklinde çözüm arayabiliriz. Bu dalga fonksiyonunu, denklem (1.1)'de yerine yazıp, türevleri alırsak,

$$\sum_k \frac{\hbar^2 k^2}{2m} C_k e^{ikx} + \sum_k \sum_n U_n C_k e^{i(G+k)x} = E \sum_k C_k e^{ikx} \quad (1.4)$$

denklemini elde ederiz. C_k katsayılarını bulmak için, (1.4) denkleminde tüm terimleri soldan $e^{-ikx'}$ ile çarparak integral alalım. Düzlem dalga fonksiyonları için diklik ilişkisi

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k-k')x} dx = 2\pi\delta(k-k') \quad (1.5)$$

ifadesini kullanarak,

$$\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} C_{k'} + \sum_n U_n C_{k'-G_n} = E C_{k'} \quad (1.6)$$

denklemini elde ederiz. $\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ tanımı ve $k' \rightarrow k$ isim değişikliği ile,

$$\boxed{(\epsilon_k - E)C_k + \sum_G U_G C_{k-G} = 0} \quad (1.7)$$

şeklinde, momentum uzayında Schrödinger denklemi elde ederiz. Burada k , Brillouin bölgesi (BZ) içinde $k \in \text{BZ} = (-\pi/a, \pi/a]$ tanımlı olup; anlamı aşağıda açıklığa kavuşacaktır. G_n ise ters örgü vektörüdür. $G_0 = 2\pi/a$ ve $n \in \mathbb{Z}$ olmak üzere, ters örgü vektörü, (1.8) denklemindeki gibi tanımlanır.

$$G_n = nG_0 = \frac{2\pi n}{a} \quad (1.8)$$

1.1.1 Enerji bant yapısı

(1.7) denklemin çözümünden, ψ_{nk} Bloch durumlarını elde ederiz. Belli bir k değeri için, elde edilen enerji özdeğeri ϵ_{nk} olmak üzere, Bloch durumları;

$$\psi_{nk}(x) = \sum_G C_{n,k+G} e^{iGx} e^{ikx} = u_{nk}(x) e^{ikx}, \quad k \in (-\pi/a, \pi/a] \quad (1.9)$$

şeklinde olup, (1.9) ifadesi, "Bloch teoremi" olarak bilinir.

Bant yapısının nasıl oluştuğunu daha iyi anlayabilmek için kristal yapıyı, serbest parçacık ve sonsuz kuyu ile karşılaştırabiliriz. Kristaldeki bant yapısı, periyodik potansiyel etkisiyle oluşan bir yapıdır. Periyodik potansiyel, kesikli ve iyi bir kuantum sayısı ile tanımlanmış, momentum özdeğerlerine sahip olmamızı sağlar. Periyodik potansiyel olmasaydı ve hamiltoniyende sadece kinetik enerji terimi olsaydı (serbest parçacıkta olduğu gibi) bu durumda hamiltoniyen, sürekli bir öteleme simetrisine sahip olurdu. Yani bütün konum ötelemeleri altında, hamiltoniyen aynı kalırdı. Bunun sonucu olarak da tüm momentum değerleri, kinetik enerji hamiltoniyeninin öz durumu olurdu. Kinetik enerji de, $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ olacağından enerji-momentum grafiğini

bir parabol şeklinde elde ederdik. Fakat periyodik potansiyel varken, sürekli bir öteleme simetrisi yoktur. Her öteleme işleminde, hamiltoniyen aynı kalmaz. Yalnızca, " a " kristal periyodu kadar öteleme yaptığımızda hamiltoniyen aynı kalır ve sistemde, ters örgü vektörü kadar ötelenmiş momentumları, birbirinden ayırt etmek mümkün olmaz. O yüzden tüm momentum değerleri değil; belli, kesikli momentum değerleri, hamiltoniyen operatörünün öz durumu olur. Bu durumları bulmak için, BZ içinde bir $k = k_0$ momentum değeri seçip, buna $\mp G_0, \mp 2G_0, \mp 3G_0 \dots$ değerlerini ekleriz. Böylece k_0 momentumuna denk olan momentumları bulabiliriz. Bu momentum değerleri,

$$\boxed{k = k' + G_n} \quad (1.10)$$

denklemini ile birbirine bağlıdır ve fiziksel olarak farklı bir durum vermez. Tüm bu momentum değerlerinin denk olduğu " k_0 " momentum değerine: "*kuazimomentum (kristal momentumu)*" denir. k kuazimomentumu, iyi bir kuantum sayısı ile belirlendiği için, periyodik potansiyelde kesikli öteleme simetrisinden dolayı korunan bir büyüklüktür. O yüzden (1.10) denkleminde, kuazimomentumun korunum denklemini gözüyle bakabiliriz. k_0 'a, G 'yi kaç kez eklediyssek, o kadar bant oluşur. BZ bölgesindeki her k değeri için, bu işlemi tekrarlarız. Böylece birçok momentum durumunun birbirine bağlandığı bant yapısını elde ederiz (Şekil 1.1).

Örneğin kuantum kuyusu, periyodik bir yapıya sahip değildir. Kuantum kuyusu problemini, sonlu bir aralıkta çözeriz ve gene kesikli enerji değerleri (E_n) elde ederiz. Ama momentum, iyi bir kuantum sayısı ile tanımlanmaz. Kuyudaki " n " indisi, enerji değerlerini etiketler ama momentumu etiketlemez. Momentumun beklenen değeri $\langle P \rangle = 0$ 'dır. Ancak her bir enerji durumunun momentumunu belirleyemeyiz. Oysa kristaldeki enerji öz durumlarını, ϵ_{nk} şeklinde, aynı zamanda " k " momentum indisi ile etiketleriz. Yani her bir kuantum durumu; bant indisi " n " ve kristal momentumu " k " olmak üzere, iki parametre ile belirlenir. Bu yüzden durumlarımızı $|nk\rangle$ şeklinde gösterebiliriz.

1.1.2 Nümerik çözüm

Bloch durumları, periyodik potansiyel altında; hamiltoniyen operatörünün öz durumlarıdır. Buna göre tek parçacık hamiltoniyeni H_{1p} olmak üzere, özdeğer özdeğer denklemini;

$$H_{1p}\psi_{nk}(x) = \epsilon_{nk}\psi_{nk}(x) \quad (1.11)$$

şeklinde yazarız. Nümerik çözümümüzde periyodik potansiyeli, optik örgü deneylerinde kullanılan şekliyle,

$$U(x) = sE_R \sin^2\left(\frac{qx}{2}\right) = s\frac{E_R}{2}(1 - \cos qx) \quad (1.12)$$

alacağız. Bu durumda $G_n = nG = nq$ olmak üzere

$$U(x) = \sum_n U_{G_n} e^{iq_n x} \quad (1.13)$$

açılımındaki sıfırda farklı üç Fourier katsayısını,

$$U_{G=0} = 2U_{2\pi/a} = 2U_{-2\pi/a} = E_R \quad (1.14)$$

olarak hesaplayabiliriz. Burada s , periyodik potansiyelin şiddetini; $q = \frac{2\pi}{a}$ ise periyodik potansiyelin periyodunu kontrol eden parametredir. " a ", periyodik potansiyelin periyodudur. Tüm nicelikleri " a " ile ölçeklendireceğiz. Enerjiyi " a " ile ölçeklendirdiğimizde, $E = \hbar^2/(2ma^2)$ olur. Uzunluk ölçeği: a , Enerji ölçeği: $\hbar^2/(2ma^2)$, Momentum ölçeği: $\frac{1}{a}$ ve [Momentum $\times$ uzunluk (ka)] ölçeği boyutsuz olur.

(1.7) denklemindeki potansiyel toplamı, sınırlı bir toplamdır ve sadece (1.10) koşuluna uyan k 'lar üzerinden toplam yapılır. Böylece toplam ifadesinde sadece iki terim yer alır ve (1.7) denklemi,

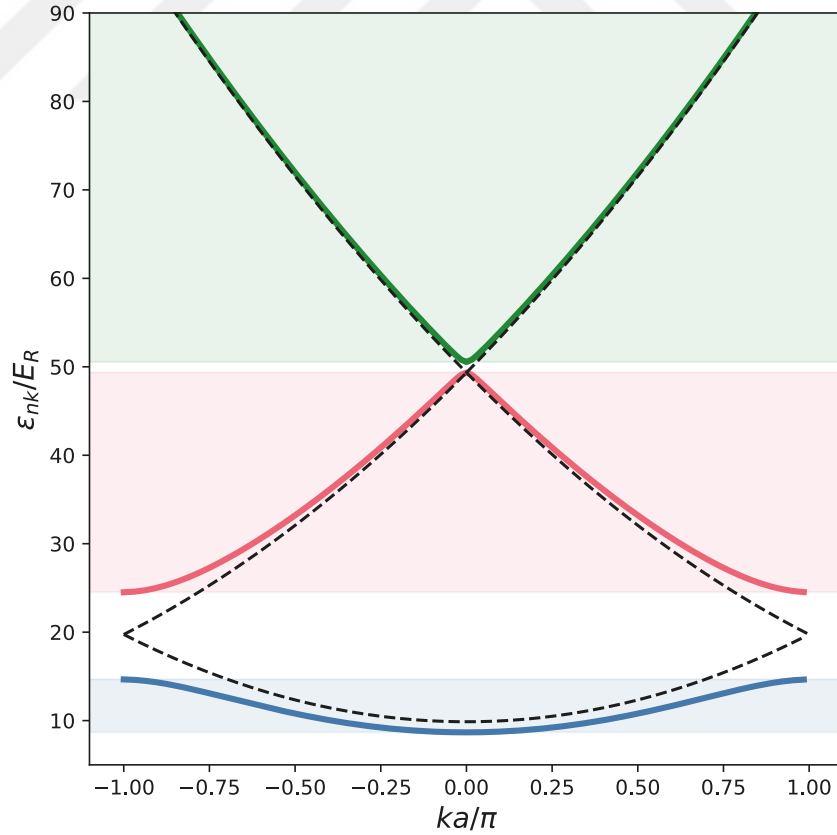
$$\frac{\hbar^2}{2m}(q_n + Q + k_Z)^2 U_n - \frac{E_R}{2}(U_{n-1} + U_{n+1}) = \bar{\epsilon} U_n \quad (1.15)$$

haline dönüşür. Her bir k değeri için (1.15) denklemini çözerek enerji öz durumlarını bulabiliriz.

"*quantum optics.jl*" paketini kullanarak, kuantum sistemlerini programa tanıtır ve çözdürebiliriz. Bunun için BZ içinde $N_K = 101$ adet nokta seçelim (Şekil A.1).

Buna göre her bantta $N_K = 101$ nokta bulunur. Her bir nokta, belirli bir kuazimomentumu ve enerjisi olan bir durumu temsil eder. Bu değerleri kaydedip grafiği çizdirirsek, şekil 1.1'i elde ederiz. Bu grafiğin yatay eksenini, $-\frac{\pi}{a}$ 'dan $\frac{\pi}{a}$ 'ya kadar giden k noktalarını; dikey eksenini ise $|nk\rangle$ durumlarına ait ε_{nk} enerji özdeğerlerini verir. Bu şekilde birbirine çok yakın N_K adet durumdan oluşan ve sürekli bir dağılım olarak göz önüne alınan yapıya "bant" denir. Bir bant içindeki N_K adet kuantum durumunun, aynı zamanda gerçek uzayda seçtiğimiz birim hücre sayısına eşit olduğunu varsayacağız. Böylece her bir bantta N_K adet durum olduğu için sistemimizde toplam $(N_K \times \text{Bant Sayısı})$ kadar kuantum durumu olur. Örneğin, 21 tane bant seçerek toplam $101 \times 21 = 2121$ tane durum buluruz (Şekil A.1).

Şekil 1.1'de görüldüğü gibi, her bir kuantum durumu; "n" ve "k" olmak üzere, iki parametre ile etiketlenir. Şekil 1.1'deki grafikte elde ettiğimiz tüm enerjileri banda göre kaydettiğimiz için, her bir banttaki enerji değerlerini programa listeletebiliriz. Örneğin birinci banttaki enerji değerleri şekil A.2'deki gibidir. Artık elimizde tüm $|nk\rangle$ durumlarına ait k ve ε_{nk} değerleri ve Ψ_{nk} Bloch dalga fonksiyonları mevcuttur.



Şekil 1.1 : Birinci Brillouin bölgesindeki enerji bantları.

Şekil 1.1'deki grafikte, renkli bölgeler arasında iki tane bant aralığı (band gap) görülmektedir. Bunlardan ilki, mavi ve kırmızı bölge arasındaki aralık, diğeri ise kırmızı ve yeşil bölge arasındaki aralıktır. Grafikte görüldüğü üzere, bu aralıklarda hiç bir enerji durumu bulunamaz. O yüzden bu bölgelere "yasak enerji aralığı" denir.

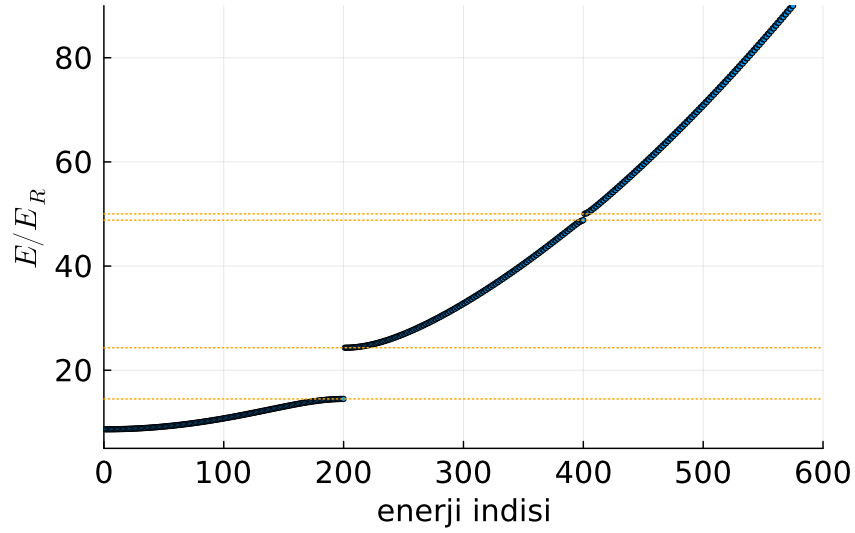
Böyle bir grafiği programa çizdirebilmek için; potansiyelin değerini (s), bant sayısını ve BZ'daki nokta sayısını seçmemiz gerekir. Seçtiğimiz nokta sayısını arttırdığımızda, parabolik yapı daha iyi ortaya çıkar. Potansiyeli sıfır aldığımızda ($s = 0$) ise şekil 1.1'de kesikli çizgilerle çizilen grafikte görüldüğü gibi, bant aralıkların kapandığını görürüz. Bu durumda meydana gelen grafik, parabolik bir dispersiyon bağıntısının; BZ dışındaki kısmının, BZ içine katlanmış şekli gibidir.

Şekil 1.1'de renkli bölgelerin yükseklikleri, bant genişliğini (bandwidth) ifade eder. Örneğin grafikteki ilk bandın maksimum ve minimum değerleri arasındaki farkı alarak bant genişliğini , 7.63 olarak bulabiliriz (Şekil A.3).

1.1.3 Tek parçacık probleminin gerçek uzayda çözümü

Bölüm 1.1.1'de momentum uzayında yaptığımız hesabı, şimdi gerçek uzayda yapalım ve bulduğumuz enerji değerlerini, önceki çözüm ile karşılaştıralım. Burada potansiyeli, verilen trigonometrik şekliyle, doğrudan yazabiliriz. Gerçek uzay çözümü, bu yönüyle avantajlıdır. Ancak konum uzayı, sürekli bir uzaydır ve uzaydaki her nokta, bir kuantum durumuna karşılık gelir. O yüzden çözüm için çok fazla nokta almamız gerekir. Fakat çözümleri gerçek uzayda bulduğumuz zaman, sonuçları iki parçacık durumlarına aktarmak kolay olur.

Şimdi, $N = 201$ adet birim hücreden oluşan bir baz kümesi oluşturalım. $X_{\min} = -100$ ve $X_{\max} = 100$ seçerek bu hücrelerin konumlarını belirleyebiliriz. Uzunluk birimimizi, birim hücre uzunluğu " a " olarak aldığımız için, $X_{\min}$ ve $X_{\max}$ arasında 201 hücre olduğu gözükmemektedir. Program, seçtiğimiz bu aralıkta, 201 elemanlı bir Hilbert uzayı oluşturarak bu noktaları bize verir (Şekil A.4). Programa, kinetik enerji ve potansiyel operatörlerini tanımladıktan sonra hamiltoniyeni oluşturabiliriz. Program, ilgili matrisleri kurarak, özdeğerlerini bize verir (Şekil A.5).



Şekil 1.2 : Tek parçacık gerçek uzay enerji spekturumu.

Böylece şekil 1.2’deki grafiği elde ederiz (Şekil A.10). Bu grafikte de gene, şekil 1.1’de olduğu gibi iki tane bant aralığı gözükmemektedir. Şekil 1.1’deki grafikte hem $+k$ hem de $-k$ momentum değerlerine karşılık gelen enerjileri görüyoruz. Oysa şekil 1.2’de, gerçek uzay çözümüne ait grafikte, bu simetri görünmüyor. Bunun nedeni, momentum uzayında; öteleme simetrisini kullanmamızdır. Fazı belli özel bir durumu, öteleme operatörü yardımıyla kaydırduğımızda, bu durumun nasıl değişeceğini biliyoruz. O yüzden her bir enerji değerine karşılık gelen kuazimomentum değerini belirleyebiliriz. Oysa gerçek uzay çözümünde, aynı enerjiye sahip (dejenere) k ve $-k$ momentum durumlarını ayıramayız. Şekil 1.2’deki grafiği, daha az sayıda nokta olarak çizersek, k ve $-k$ durumlarına ait enerjileri, dip dibe iki nokta olarak görürüz. Eğer bu durumların momentumlarını tespit edip, noktaları tekrar sıralarsak o zaman gene şekil 1.1’deki grafiğin benzerini elde ederiz.

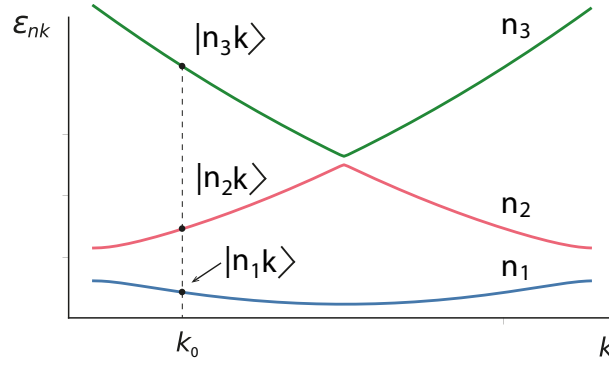
1.1.4 Bloch durumlarının ortonormalliği

Denklem (1.9)’de verdiğimiz Bloch teoremini kullanarak,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi_{nk}(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |u_{nk}(x)|^2 dx \quad (1.16)$$

yazabiliriz ve u_{nk} fonksiyonlarını birim hücre üzerinden, (1.17) denklemindeki gibi normalize edebiliriz

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} \int_0^a dx |u_{nk}|^2 dx = N_{\text{Birim hücre}} \quad (1.17)$$

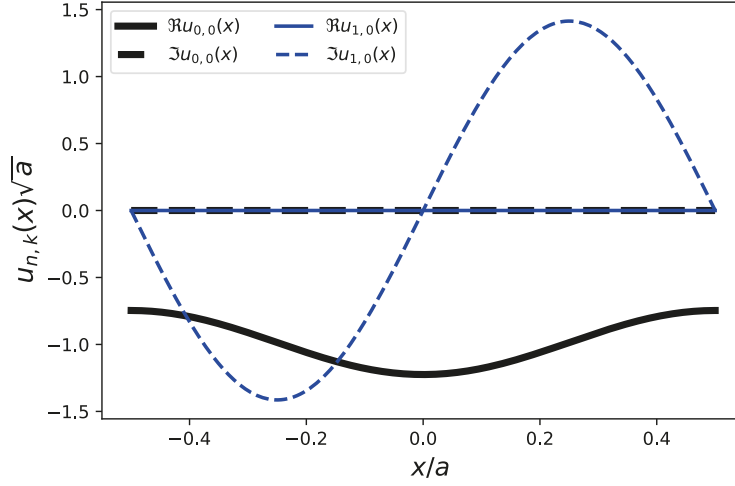


Şekil 1.3 : Farklı bantlardaki, aynı k durumuna karşılık gelen Bloch durumları ortogonaldır.

Şekil 1.1’de elde ettiğimiz tüm Bloch durumlar normalizedir. Herhangi bir duruma ait C_{nk} vektörünün normunu 1’dir. hesaplırsak, sonucun 1 olduğunu görürüz. Buna karşılık tüm Bloch durumları için genel bir ortogonallik ilişkisi yoktur. Örneğin şekil 1.3’deki durumlardan C_{12} ile C_{23} katsayılarının skaler çarpımına bakarsak, sonucun sıfır olmadığını görürüz. Dahası, aynı bant üzerinde seçtiğimiz iki farklı k değerine ait C_{nk} katsayılarının skaler çarpımı da sıfır çıkmaz. Örneğin C_{21} ile C_{23} katsayılarının skaler çarpımı sıfırdan farklıdır. Aynı bant içindeki iki durum, farklı enerji öz durumlarıdır ancak bunlar arasında C_{nk} vektörleri cinsinden bir diklik bağıntısı yoktur. Yalnızca aynı k_0 değerine ait, farklı n ’ler için elde ettiğimiz C_k ’lar, birbirine diktir (Şekil A.8). Örneğin şekil 1.3’de, k_0 değerleri aynı fakat farklı bantlarda bulunan üç durumu göz önüne alalım. Şimdi bu durumlara ait; C_{1k} , C_{2k} ve C_{3k} katsayılarının skaler çarpımları sıfırdır. Sonuç olarak tüm bloch durumları normalizedir fakat sadece aynı k değerine ait Bloch durumları ortogonaldır (Denklem 1.18).

$$\langle n_i k | n_j k \rangle = 0, \quad i \neq j \quad (1.18)$$

Şimdi aynı hesapları, gerçek uzayda yapalım. Gerçek uzayda dalga fonksiyonunu, (1.9) denklemi ile verilen Bloch dalga fonksiyonudur. Şimdi bu dalga fonksiyonunu oluşturacağız. (1.9) denklemindeki $\sum C_{nk} e^{iG_n x}$ toplam kısmı, bize periyodik u_{nk} fonksiyonunu verir. Bunu oluşturmak için önce $G_n = 2\pi n$ şeklinde ters örgü vektörlerini oluştururuz. Daha sonra C_n katsayılarını, $e^{iG_n x}$ terimiyle çarparak, tüm n ’ler üzerinden toplarız. Böylece $u_{nk}(x)$ fonksiyonlarını, tüm G_N ’ler için bir matris olarak elde ederiz. $u_{nk}(x)$ fonksiyonlarının grafikleri şekil 1.4’deki gibidir.



Şekil 1.4 : İlk ve ikinci bant için $k = 0$ kuazi-momentum $u_{nk}(x)$ periyodik fonksiyonlarının reel ve imajiner kısımlarının birim hücre içindeki görünümü. Buradaki gibi aynı k değerine sahip farklı Bloch fonksiyonları birbirine diktir.

u_{nk} periyodik fonksiyonlarını oluşturduktan sonra (1.9) denklemini gereğince, bulduğumuz u_{nk} fonksiyonlarını e^{ikx} ile çarparak, $\Psi_{nk}(x)$ dalga fonksiyonlarını oluştururuz. Artık dalga fonksiyonlarını bildiğimize göre, bu fonksiyonların diklik şartını kontrol edebiliriz. Bunun için Gauss-Legendre yöntemini kullanalım. Bu yöntem sayesinde, istenilen aralıkta herhangi bir fonksiyonun integralini almak için, denklem (1.19)'deki gibi fonksiyonun o noktadaki x_i değerlerini, ω_i legendre ağırlık faktörleriyle çarparak i üzerinden toplarız.

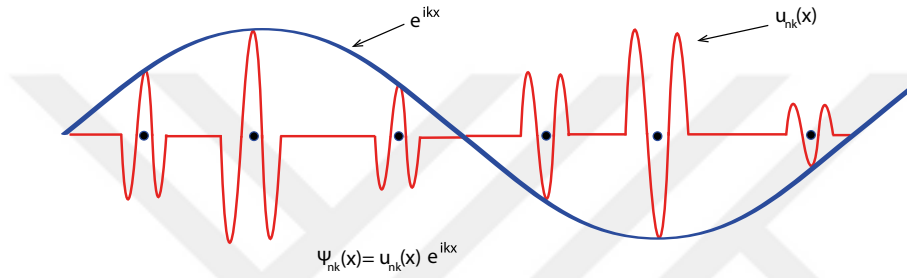
$$\int f(x)dx = \sum w_i f(x_i) \quad (1.19)$$

x aralığını (-0.5 ile 0.5) alarak, k aynı iken iç çarpımlara baktığımızda, sonuçların sıfır olduğunu görürüz. Gauss-Legendre integrasyonu oldukça iyi sonuçlar vermiştir. Aynı integral hesaplarını; trapez (yamuk) kuralı ile ve Simpson kuralı ile tekrarladığımızda, sonucun hepsiyle uyumlu olduğunu görürüz.

Şimdi dalga fonksiyonlarının normlarına bakalım. (1.16) eşitliğinde gördüğümüz gibi $|\Psi_{nk}|^2$ ile $|u_{nk}|^2$ fonksiyonlarının integralleri aynıdır. O yüzden Bloch durumlarını normalize etmek için, periyodik u_{nk} fonksiyonlarını normalize edebiliriz. Gene Gauss ağırlık faktörleriyle, aynı k değerleri için integralleri hesapladığımızda; $\int_0^a |u_{nk}(x)|^2 dx = 1$ sonucunu elde ederiz. Böylece k aynı iken, tüm durumların ortanormal olduğunu, gerçek uzayda da göstermiş oluruz.

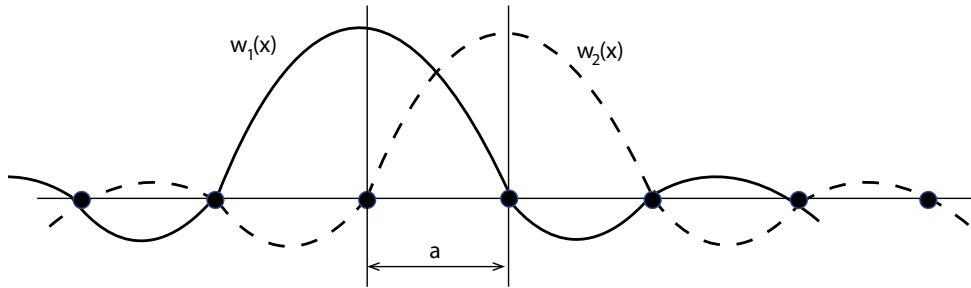
1.1.5 Wannier Fonksiyonları

Şekil 1.1'deki grafikte sürekli görünen bant eğrisinin, gerçekte N_K adet temsili nokta alınarak elde edildiğini ve her noktanın bir kuantum durumuna ve birim hücreye karşılık geldiğini belirtmiştik. Ancak bu kuantum durumları, yani enerji özfonksiyonları, bir hücre içerisinde lokalize olmaz; tüm sisteme yayılır. Böylece her bir k durumu için, tüm sisteme yayılmış dalga fonksiyonları elde ederiz. Bunlar, periyodik sınır koşulları kullanarak elde ettiğimiz, "*Bloch fonksiyonlarıdır.*" Bloch fonksiyonları; her birim hücrede tekrar eden $u(x)$ periyodik fonksiyonunun, e^{ikx} düzlem dalgası ile modüle edilmiş halidir (Şekil 1.5). Bloch fonksiyonlarını



Şekil 1.5 : Atomik orbitaller üzerine konumlandırılmış Bloch fonksiyonunun şematik gösterimi.

bir araya getirerek, her bir birim hücrede lokalize olmuş, moleküler orbitaller oluşturabiliriz. Bunlara "*Wannier orbitalleri*" denir (Şekil 1.6). Wannier orbitalleri, Bloch fonksiyonlarının süperpozisyonu olduğu için, belirli bir enerjiye sahip değildir ancak gerçek uzayda lokalizedir. O yüzden Wannier fonksiyonlarını, $W(x) = \sum_n w_n(x)$ şeklinde, ortagonal bir baz olarak kullanabiliriz. Bu model: "*Sıkı bağ-Hubbard modeli*" olarak adlandırılır.



Şekil 1.6 : Lokalize Wannier fonksiyonları.

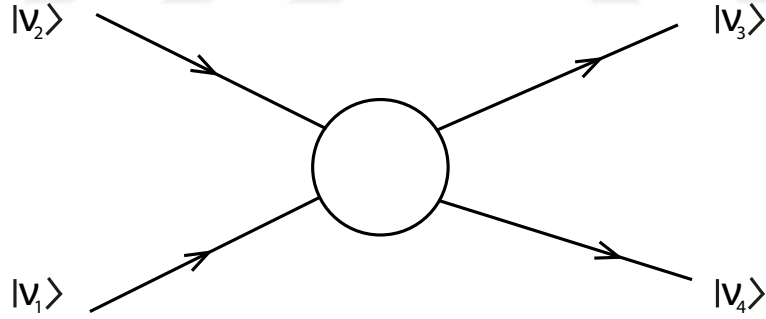
1.2 İki Parçacıklı Sistemlere Giriş

1.2.1 İki parçacık kuantum durumlarının gösterimi

İki parçacık kuantum durumunu, $|ij\rangle$ şeklinde gösterebiliriz. Bu gösterim bize birinci parçacığın, i . kuantum durumunda; ikinci parçacığın, j . kuantum durumunda olduğunu söyler. Buradaki indisler, tek parçacık durumlarıdır. Bizim problemimizde bu durumlar, periyodik potansiyel altında çözdüğümüz bloch durumlarıdır. Örneğin $|35\rangle$ iki parçacık durumu için; birinci parçacığın 3. kuantum durumunda, ikinci parçacığın ise 5. kuantum durumunda olduğunu söyleriz.

1.2.2 Saçılma matrisi

Parçacıkların etkileşimini, bir saçılma problemi olarak ele alabiliriz. Buna göre çarpışma öncesi $|kl\rangle$ durumunda olan parçacıklar, çarpışma sonrası başka bir $|mn\rangle$ durumuna geçerler. Her bir durum için saçılan dalganın genliğini (saçılma genliği) belirlersek, etkileşimi belirlemiş oluruz.



Şekil 1.7 : Saçılma diyagramı.

Parçacıkların etkileşim sürecini, saçılma diyagramı ile gösterebiliriz. Bunun için $|nk\rangle$ kuantum durumunu, bileşik v indisi ile gösterelim. Saçılma öncesi v_1 ve v_2 durumunda olan parçacıkların, saçılma sonrası v_3 ve v_4 durumuna geçtiklerini varsayalım (Şekil 1.7). Etkileşim öncesi ve sonrası kuantum durumlarını, bir $\tilde{U}_{v_1 v_2 \rightarrow v_3 v_4}^{\text{etkileşim}}$ saçılma matrisi ile birbirine bağlayabiliriz. Böylece bu matrisin elemanlarını belirleyerek parçacıklar arası etkileşimi tanımlayabiliriz.

1.2.3 Sıkıbağ-Hubbard modeli

Bu modele göre, bir atomun dalga fonksiyonunun, sadece en yakın komşularınıninki ile örtüştüğünde etkileşim olduğunu, aksi durumda etkileşim olmadığını varsayacağız (Şekil 2.1). Buna göre etkileşim potansiyelini,

$$U^{\text{etkileşim}} = \sum_i U_{ii,ii} \quad (1.20)$$

şeklinde yazabiliriz. Buradaki matris elemanının tüm "i" indislerinin aynı olması, saçılma öncesi ve sonrası parçacıkların aynı birim hücrede kaldığını gösterir. Yani modelimize göre, aynı birim hücre içindeki iki parçacık birbiriyle etkileşecek ve saçılma sonrası bu iki parçacık gene aynı birim hücre içinde kalacaktır; yan hücreye saçılmayacaktır. Bölüm 1.2.2’de, etkileşimi; $|kl\rangle$ durumundaki parçacıkların, çarpışma sonrası başka bir $|mn\rangle$ durumuna geçmesi, olarak tanımlamıştık. Hubbard tipi etkileşimde, $|kl\rangle$ ve $|mn\rangle$ durumları aynı birim hücre içinde yer alacaktır. Bu yüzden diğer hücrelerdeki durumlarda hiç bir değişiklik olmaz. Ayrıca modelimizde, etkileşimin her hücrede aynı olduğunu, hücreden hücreye değişmediğini varsayıyoruz. Bu durumda saçılma matris elemanları basitleşir ve etkileşimi, "*kontak etkileşim parametresi*" dediğimiz bir "g" sayısı ile belirleyebiliriz. Bu yüzden Hubbard tipi etkileşim, uygulamadaki kolaylığı nedeniyle popüler bir modeldir.

1.2.4 İki parçacık baz uzayının oluşturulması

Sistemimizin durumunu simüle edebilmek için, iki parçacık hamiltoniyenini, seçtiğimiz bazda yazabiliriz. Wannier orbitallerini baz vektörü alırsak, tek parçacık dalga fonksiyonu $\Psi = \sum \psi_i |w_i\rangle$ şeklinde olur. İki parçacık uzayını; tek parçacık uzayının kopyasını alarak, bu iki kopyanın;

$$\Psi = \psi_i |w_i\rangle \otimes |w_j\rangle \quad (1.21)$$

şeklinde tensör çarpımı ile elde ederiz. Burada "i" indisi birinci parçacığı, "j" indisi ise ikinci parçacığı temsil etmektedir. Şimdi N_k adet birim hücre için, kaç tane iki parçacık kuantum durumu olduğunu bulalım. Parçacıklar fermiyonsa, tüm antisimetrik kombinasyonlar; baz uzayında yer almalıdır.

$|ij\rangle$ ifadesinde, i ve j indisleri mutlaka birbirinden farklı olmalıdır. Aksi halde Pauli dışarlama ilkesi ihlal edilmiş olur. Örneğin $|11\rangle$ şeklinde bir durum olamaz. O yüzden birinci parçacık N_k farklı durumda olabilirse, ikinci parçacık $(N_k - 1)$ farklı durumda olabilir. Özdeş parçacıklar için, $\psi(r_1, r_2) = \mp \psi(r_2, r_1)$ şeklindeki simetri koşulunu da kullanırsak; N_k adet birim hücre (ya da kuantum durumu) için, $N_k(N_k - 1)/2$ tane iki parçacık durumu elde ederiz.

Şimdi baz uzayı olarak Wannier orbitalerini seçtikten sonra, toplam $N_k(N_k - 1)/2$ adet durumdan oluşan iki parçacık uzayını kuralım. Burada spin singlet ve spin triplet durumlarını ayrı ayrı inceleyeceğiz. Spin singlet olduğunda, konum uzayında simetrik dalga fonksiyonlarına bakmamız gerekeceğinden, bozon durumlarını alacağız. Spin triplet durumunda ise dalga fonksiyonunun spin kısmı simetrik olduğundan, uzay kısmını antisimetrik yapılması gerekir. Bu durumda da uzaydaki antisimetrik durumlar ele alınmalıdır.

Modelimize, eğer spini de dahil edersek aynı hücreye zıt spinli iki fermiyon yerleştirebiliriz. Bu durumda, $(N_k(N_k - 1)/2) \times 2 + N_k = N_k^2$ tane durum olur. Buna göre sadece aynı hücrede zıt spinli iki parçacık olduğunda, bir etkileşimin olduğunu varsayarak hamiltoniyen matrisini oluşturabiliriz. Karşımıza çıkan matrisi köşegenleştirdiğimizde, özdeğer ve özvektörler bize iki parçacık çözümleri verir. Sonuç bölümünde gösterilen hesaplarda, iki parçacık dalga fonksiyonunun spin singlet durumunda olduğunu; dolayısıyla dalga fonksiyonunun uzay kısmının, simetrik dalga fonksiyonlarından oluştuğu durumu ele alıyoruz. Böylece toplam dalga fonksiyonumuz antisimetrik olur.

1.3 Hermitsel Olmayan Kuantum Mekaniği

Bu kısımda çarpışmaların neden olduğu parçacık kayıplarını göz önüne alacağız. Bir sistemde parçacıklar, çarpışıp sistem dışına çıkabilir ya da molekül oluşturup sistemden düşebilir. Bu şekilde, sistemle çevre arasındaki etkileşimden dolayı, parçacık alışverişinin olduğu sisteme "açık kuantum sistemi" denir. Böyle bir sistemi, reel ve imajiner kısımdan oluşan, kompleks bir hamiltoniyen kullanarak modelleyebiliriz.

1.3.1 Özdeğerler ve özvektörler

H ve Γ , $H = H^\dagger$ ve $\Gamma = \Gamma^\dagger$ koşullarını sağlayan hermitsel operatörler olmak üzere, nonhermitsel bir H_{NH} operatörünü,

$$H_{\text{NH}} = H + i\Gamma \quad (1.22)$$

şeklinde tanımlayabiliriz. Böyle bir operatörün hermitsel eşleniği,

$$H_{\text{NH}}^\dagger = H - i\Gamma \quad (1.23)$$

olduğundan, $H_{\text{NH}} \neq H_{\text{NH}}^\dagger$ olduğu görülmektedir. Bu tür bir hamiltoniye'nin özdeğer ve özvektörlerini inceleyeceğiz. Bilindiği gibi hermitsel bir operatörün özdeğerleri reeldir, farklı özdeğerlere karşılık gelen özvektörleri birbirine diktir. H_{NH} hermitsel olmadığı için, bu operatörün özdeğerleri komplekstir ve sağ ve sol özvektörleri birbirinden farklıdır. Böyle bir sistemde; kompleks enerji değerleri, sistemdeki kayıpları modeller ve enerji'nin imajiner kısmı, bu kaybın zaman ölçeğini belirler. H_{NH} hamiltoniye'nin imajiner teriminin artması, süperakışkanlığı bozabilir ve bu bozucu etki monotonik olmayabilir. Bu etkileri bölüm 2.3'de inceleyeceğiz.

1.3.2 Etkileşim kaynaklı kayıpların modellenmesi

Açık sistemlerde, kayıp mekanizmasını, saçılma uzunluğuna sanal kısım ekleyerek modelleyebiliriz. Bu durumda (2.30) denklemi ile tanımlayacağımız kontak etkileşim parametresi (g), kompleks bir sayı olan a_s saçılma uzunluğuna bağlı olur ve hermitsel olmayan bir matris karşımıza çıkar. O yüzden kompleks bir sayı olan saçılma uzunluğunu,

$$a_s = a_s^{\text{R}} + ia_s^{\text{I}} \quad (1.24)$$

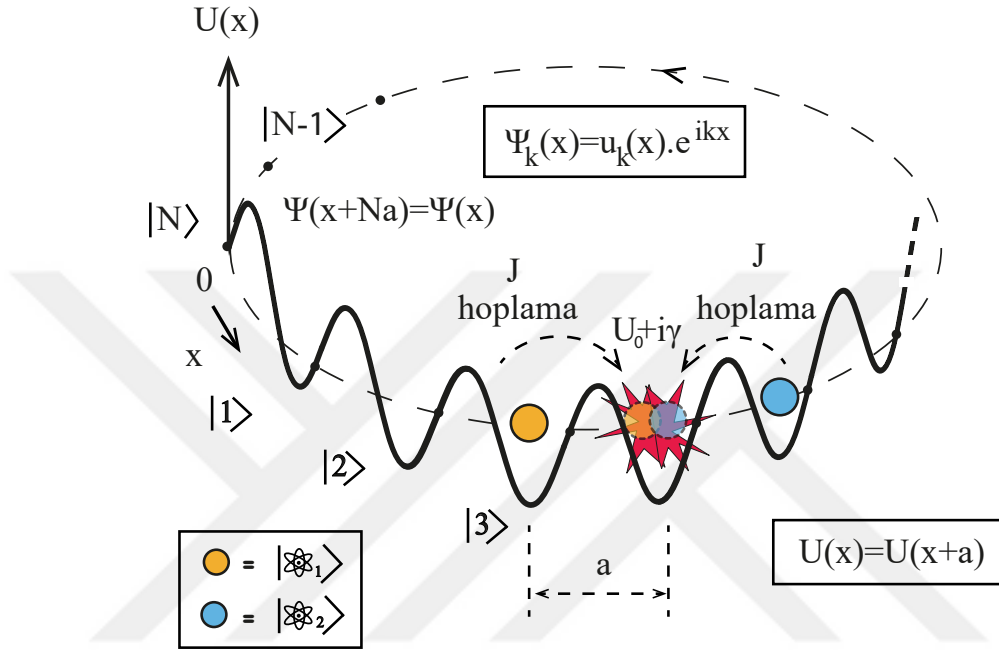
şeklinde, U etkileşim parametresini de, U_0 ve γ reel olmak üzere,

$$U = U_0 + i\gamma \quad (1.25)$$

şeklinde reel ve imajiner olmak üzere iki kısma ayırarak sistemimizi modelleyeceğiz.

2. PERİYODİK POTANSİYELDE İKİ PARÇACIK PROBLEMİ

2.1 İki Parçacıklı Sistemler



Şekil 2.1 : Periyodik sınır koşullarının geçerli olduğu N hücreden oluşan bir boyutlu simülasyon kutusunun temsili: Aynı hücredeki iki parçacık arasındaki kompleks etkileşim $U_0 + i\gamma$ ve periyodik potansiyel $U(x)$ ile gösterilmiştir.

Etkileşimin olmadığı tek parçacıklı bir sistemin periyodik potansiyel altındaki kuantum durumunu, $|nk\rangle$ olarak bulmuştuk. Bu kısımda, parçacıklar arası etkileşimi de göz önüne alarak, iki parçacıklı sistemin kuantum durumunu bulacağız. Birinci parçacığın uzay koordinatı x_1 , kuantum durumu $|n_1k_1\rangle$; ikinci parçacığın uzay koordinatı x_2 , kuantum durumu $|n_2k_2\rangle$ olsun. Parçacıklar birbiriyle etkileşmediğinde ($g=0$), bu iki parçacıktan oluşan sistemin dalga fonksiyonunu; parçacıkların, fermiyon ya da bozon olması durumuna göre, dalga fonksiyonlarının simetrik ya da antisimetrik kombinasyonu şeklinde yazabiliriz.

$$\Psi(x_1, x_2) = \Psi_{n_1k_1}(x_1)\Psi_{n_2k_2}(x_2) \pm \Psi_{n_1k_1}(x_2)\Psi_{n_2k_2}(x_1) \quad (2.1)$$

$|n_1 k_1\rangle$ durumundaki parçacığın enerjisi ϵ_1 , $|n_2 k_2\rangle$ durumundaki parçacığın enerjisi ϵ_2 ise sistemin enerjisi,

$$\mathcal{E} = \epsilon_{n_1 k_1} + \epsilon_{n_2 k_2} \quad (2.2)$$

olur. Şimdi parçacıkların etkileştiği duruma bakalım. Etkileşmeyen parçacıkların hamiltoniyenlerini $H_{1p}^{(0)}$ ile, etkileşim hamiltoniyenini ise $H^{(\text{etkileşim})}$ ile gösterirsek bu durumda iki parçacıklı sistemin hamiltoniyeni,

$$H_{2p}(x_1, x_2) = H_{1p}^{(0)}(x_1) + H_{1p}^{(0)}(x_2) + H^{(\text{etkileşim})}(x_1 - x_2) \quad (2.3)$$

olur. Burada her bir etkileşmeyen parçacığın hamiltoniyeni,

$$H_{1p}^{(0)}(x_i) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx_i^2} + U_{\text{örgü}}(x_i), \quad i = 1, 2 \quad (2.4)$$

şeklinde olup, periyodik örgü potansiyeli; bu hamiltoniyenlerin içindedir. Parçacıkların birbiri ile etkileşimini $U(x_1 - x_2)$ potansiyeli ile tanımlarsak, iki parçacık hamiltoniyenini,

$$H_{2p}(x_1, x_2) = H_{1p}(x_1) + H_{1p}(x_2) + U(x_1 - x_2) \quad (2.5)$$

şeklinde yazabiliriz.

k_1 ve k_2 momentumuna sahip iki parçacıktan oluşan sistemin; konum uzayındaki x_1 ve x_2 durumları cinsinden dalga fonksiyonu,

$$\Psi_{k_1 k_2}(x_1, x_2) = \Psi_{k_1}(x_1) \Psi_{k_2}(x_2) = e^{ik_1 x_1 + ik_2 x_2} \quad (2.6)$$

şeklindedir. Aynı denklemi, braket notasyonunu kullanarak,

$$|k_1 k_2\rangle = |k_1\rangle \otimes |k_2\rangle \quad (2.7)$$

şeklinde yazabiliriz. $|k_1 k_2\rangle$ vektörünün, konum vektörleri üzerine izdüşümünü alarak,

$$\langle x_1 x_2 | k_1 k_2 \rangle = \Psi_{k_1 k_2}(x_1, x_2) \quad (2.8)$$

şeklilde, dalga fonksiyonun her iki formu arasında ilişki kurabiliriz.

$$|\Psi_{k_1 k_2}\rangle = \sum_{x_i x_j} |x_i x_j\rangle \langle x_i x_j | k_1 k_2 \rangle = \sum_{x_i x_j} \Psi_{k_1 k_2}(x_1, x_2) |x_i x_j\rangle \quad (2.9)$$

Şimdi iki parçacık hamiltoniyenini, iki parçacık dalga fonksiyonuna etki ettirelim.

$$H_{2p}\Psi_{k_1k_2} = \left[\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + U_{\text{örgü}}(x_1) + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} + U_{\text{örgü}}(x_2) \right] \Psi_{k_1k_2} + U_{\text{etkileşim}}(x_1 - x_2) \Psi_{k_1k_2} \quad (2.10)$$

Daha sonra, $H_{k'_1k'_2,k_1k_2}$ matris elemanını hesaplayalım.

$$\iint \Psi_{k'_1k'_2}^* H_{1p}^{(0)}(x_1) \Psi_{k_1k_2} dx_1 dx_2 = \int \Psi_{k'_1}^*(x_1) H_{1p}^{(0)}(x_1) \Psi_{k_1}(x_1) dx_1 \int \Psi_{k'_2}^*(x_2) \Psi_{k_2}(x_2) dx_2 \quad (2.11)$$

$$\langle k'_1k'_2 | H_{1p}^{(0)} | k_1k_2 \rangle = U_G \delta_{k'_1,k_1+G} \delta_{k'_2,k_2} \quad (2.12)$$

$H_{1p}^{(0)}(x_2)$ de benzer şekilde bulunur. Şimdi etkileşim matrisini bulalım.

$$\langle k'_1k'_2 | U_{\text{etkileşim}} | k_1k_2 \rangle = \iint \Psi_{k'_1k'_2}^* U_{\text{etkileşim}} \Psi_{k_1k_2} dx_1 dx_2 \quad (2.13)$$

$$= \iint e^{-i(k'_1-k_1)x_1} e^{-i(k'_2-k_2)x_2} U_{\text{etkileşim}}(x_1 - x_2) dx_1 dx_2 \quad (2.14)$$

$$= \int e^{-i(k'_1-k_1+k'_2-k_2)X} dX \int e^{-i(k'_1-k_1-k'_2+k_2)x/2} U_{\text{etkileşim}}(x) dx \quad (2.15)$$

$$\langle k'_1k'_2 | U_{\text{etkileşim}} | k_1k_2 \rangle = \delta_{k'_1+k'_2,k_1+k_2} \tilde{U}_{\text{etkileşim}} \left(\frac{k'_1 - k_1 - k'_2 + k_2}{2} \right) \quad (2.16)$$

2.1.1 Kütle merkezi ve relatif koordinat ayrımı

Bir boyutta periyodik potansiyel altında iki parçacık hamiltoniyeni, kütle merkezi ve relatif koordinatlar cinsinden;

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U_{\text{örgü}} \left(X + \frac{x}{2} \right) + U_{\text{örgü}} \left(X - \frac{x}{2} \right) + U_{\text{etkileşim}}(x) \quad (2.17)$$

şeklindedir. Buna göre Schrödinger denklemi,

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial X^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \left[U_{\text{örgü}} \left(X + \frac{x}{2} \right) + U_{\text{örgü}} \left(X - \frac{x}{2} \right) + U_{\text{etkileşim}}(x) \right] \Psi = E \Psi \quad (2.18)$$

olur. Buradan elde edilecek $\Psi(X, x)$, iki parçacık dalga fonksiyonu olup; X ve x şeklinde iki değişkene sahiptir. X , kütle merkezinin koordinatı; x ise relatif koordinat olup,

$$X = \frac{x_1 + x_2}{2}, \quad x = x_1 - x_2, \quad dx_1 dx_2 = dX dx \quad (2.19)$$

şeklinde tanımlanır.

Şimdi (2.18) denklemini momentum uzayında yazabilmek için, bölüm 1.1’de yaptığımız gibi, Ψ dalga fonksiyonunun ve diğer terimlerin Fourier transformunu alıp (momentum özfonksiyonları cinsinden seri açılımını), (2.18) denkleminde yerine yazalım. Periyodik potansiyel için Fourier ransformu,

$$U_{\text{örgü}}\left(X + \frac{x}{2}\right) + U_{\text{örgü}}\left(X - \frac{x}{2}\right) = \sum_G \tilde{U}_G e^{iGX} \left[e^{iG\frac{x}{2}} + e^{-iG\frac{x}{2}} \right] \quad (2.20)$$

şeklindedir. k_1 ve k_2 momentumlarına sahip parçacıkların; K_{KM} kütle merkezi momentumunu ve k_{rel} relatif momentumunu,

$$K_{\text{KM}} = k_1 + k_2, \quad k_{\text{rel}} = \frac{(k_1 - k_2)}{2} \quad (2.21)$$

şeklinde tanımlayabiliriz. Bu durumda hamiltoniyedeki kinetik enerji terimleri,

$$\frac{\hbar^2 K_{\text{KM}}^2}{2M} + \frac{\hbar^2 k_{\text{rel}}^2}{2\mu} = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} \quad (2.22)$$

$$\epsilon_K^{\text{KM}} + \epsilon_k = \epsilon_{k_1} + \epsilon_{k_2} \quad (2.23)$$

birbirine eşit olur. Buna göre,

$$e^{iKX + ikx} = e^{ik_1 x_1 + ik_2 x_2} \quad (2.24)$$

olacağından, Bloch dalga fonksiyonunu,

$$\Psi(X, x) = \sum_{K, k} C_{K, k} e^{iKX} e^{ikx} = \sum_{k_1, k_2} C_{k_1, k_2} e^{ik_1 x_1} e^{ik_2 x_2} \quad (2.25)$$

şeklinde yazabiliriz. Görüldüğü gibi her bir durumu, $|k_1 k_2\rangle$ momentum durumları ile belirleyebildiğimiz gibi, $|K, k\rangle$ kütle merkezi ve relatif koordinat momentum durumları ile de belirleyebiliriz.

Fermiyonlar için $\Psi(X, -x) = -\Psi(X, x) \Rightarrow C_{K, -k} = -C_{K, k}$ şartlarını da kullanarak, Fourier transformlarını (2.18) denkleminde yerine yazalım.

$$\begin{aligned} & \sum_{K, k} \left[\frac{\hbar^2 K^2}{2M} + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \right] C_{K, k} e^{iKX} e^{ikx} \\ & + \sum_{K, k} \sum_G U_G e^{iGX} \left[e^{iGx/2} + e^{-iGx/2} \right] C_{K, k} e^{iKX} e^{ikx} \\ & + \sum_{K, k} C_{K, k} e^{iKX} U(x) e^{ikx} \\ & = E \sum_{K, k} C_{K, k} e^{iKX} e^{ikx} \end{aligned} \quad (2.26)$$

Böylece bir parçacık için bulduğumuz (1.7) denkleminin benzerini, iki parçacık olması durumunda,

$$\left[\varepsilon_K^{\text{KM}} + \varepsilon_k - E \right] C_{K,k} + \sum_G U_G [C_{K-G,k-G/2} + C_{K-G,k+G/2}] + \sum_{k'} C_{K,k-k'} \tilde{U}_{k-k'} = 0 \quad (2.27)$$

şeklinde elde ederiz. Buradaki hangi C_{Kk} katsayılarının, Schrödinger denklemi vasıtasıyla birbirine bağlandığını bulup bu katsayıları çözeceğiz. Daha önce çözdüğümüz (1.7) denklemi, tek parçacık için olduğundan, tek bir k değişkenine göre C_k katsayılarını bulmuştuk. Burada ise katsayılar, $(k_1$ ve $k_2)$ ya da $(K$ ve $k)$ şeklinde iki değişkene bağlıdır. $\tilde{U}_{k-k'}$ terimi ise, tek parçacık çözümünde karşımıza çıkmayan, etkileşim terimidir. Bu terim, periyodik potansiyelin dışında, relatif koordinata $(x = x_1 - x_2)$ bağlıdır. Etkileşim potansiyeli $\tilde{U}_{k-k'}$ için,

$$U(x) = g\delta(x) \quad (2.28)$$

şeklinde kontak etkileşimi seçersek, bu durumda potansiyel,

$$\tilde{U}_k = \int dx e^{-ikx} U(x) = g \quad (2.29)$$

şeklinde bir sabite dönüşür. Buradaki g sabitine, "*kontak etkileşim parametresi*" denir ve bu sabit,

$$g = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a_s \quad (2.30)$$

şeklinde tanımlanır. Buradaki a_s , saçılma uzunluğu olup; g sabiti, [Enerji $\times$ uzunluk] boyutundadır.

2.1.2 Bloch tabanında iki parçacık problemi

İki parçacık problemini nümerik olarak çözebilmemiz için bir baz seçmemiz gerekir. Bunu yapmanın bir yolu; bant yapısını çözüp, bant yapısından gelen Bloch durumlarını almaktır. Bunun için dalga fonksiyonunun katsayılarını $C_{k_1,k_2}^{n_1,n_2}$ şeklinde indeksliyelim ve relatif koordinat cinsinden iki parçacık dalga fonksiyonunu,

$$\Psi(x_1, x_2) = \sum_{n_1,k_1,n_2,k_2} C_{k_1,k_2}^{n_1,n_2} \psi_{n_1 k_1}(x_1) \psi_{n_2 k_2}(x_2) \quad (2.31)$$

şeklinde yazalım.

Sonra $\psi_{n_1 k_1}(x_1)$ ve $\psi_{n_2 k_2}(x_2)$ 'yi Bloch fonksiyonları cinsinden açıp Schrödinger denkleminde yerine yazalım.

$$H_{2p}\Psi = \sum_{n_1, k_1, n_2, k_2} [\epsilon_{n_1 k_1} + \epsilon_{n_2 k_2}] C_{k_1, k_2}^{n_1, n_2} \psi_{n_1 k_1}(x_1) \psi_{n_2 k_2}(x_2) + U(x_1 - x_2) \Psi = E \Psi \quad (2.32)$$

Fourier bileşenlerini bulmak için, bölüm 1.1'de yaptığımız gibi, (2.32) denklemini soldan kompleks eşleniklerle çarpıp gerekli diklik bağıntılarını ($n_1 = n'_1$, $n_2 = n'_2$ gibi) kullanırsak,

$$\boxed{[\epsilon_{n_1 k_1} + \epsilon_{n_2 k_2} - E] C_{k_1, k_2}^{n_1, n_2} + \sum_{n'_1, k'_1, n'_2, k'_2} C_{k'_1, k'_2}^{n'_1, n'_2} \tilde{U}_{n_1, k_1, n_2, k_2}^{n'_1, k'_1, n'_2, k'_2} = 0} \quad (2.33)$$

denklemini elde ederiz. (2.33) denkleminin $[\epsilon_{n_1 k_1} + \epsilon_{n_2 k_2} - E] C_{k_1, k_2}^{n_1, n_2}$ terimi, tek parçacık enerjilerini temsil eder. Yani H_{1p} hamiltoniyeni etkisinde; birinci parçacığın dalga fonksiyonu $\psi_{n_1 k_1}(x_1)$ ve enerjileri $\epsilon_{n_1 k_1}$, ikinci dalga fonksiyonu $\psi_{n_2 k_2}(x_2)$ ve enerjileri $\epsilon_{n_2 k_2}$ 'dir. Dolayısıyla (1.7) denkleminin çözümlerini bildiğimiz için matrisin bu kısmını köşegen olarak elde ederiz. İki durumun enerjilerini toplayarak, iki parçacık durumlarının, Bloch tabanındaki köşegen elemanlarını elde ederiz. Geriye sadece çözmemiz gereken etkileşim potansiyeli terimi kalır. Dolayısıyla $C_{k'_1, k'_2}^{n'_1, n'_2}$, bilinmeyen katsayılarımız; E , özdeğerlerimiz olur.

$$\tilde{U}_{n_1, k_1, n_2, k_2}^{n'_1, k'_1, n'_2, k'_2} = \int dx_1 \int dx_2 \psi_{n_1 k_1}^*(x_1) \psi_{n_2 k_2}^*(x_2) U(x_1 - x_2) \psi_{n'_1 k'_1}(x_1) \psi_{n'_2 k'_2}(x_2) \quad (2.34)$$

denklemindeki etkileşim potansiyelini, (2.28) denklemindeki gibi,

$$U(x_1 - x_2) = g \delta(x_1 - x_2) \quad (2.35)$$

şeklinde, kontak etkileşimi alırsak bu durumda etkileşim potansiyelinin matris elemanları,

$$\tilde{U}_{n_1, k_1, n_2, k_2}^{n'_1, k'_1, n'_2, k'_2} = g \int dx_1 \int dx_2 \psi_{n_1 k_1}^*(x_1) \psi_{n_2 k_2}^*(x_2) \delta(x_1 - x_2) \psi_{n'_1 k'_1}(x_1) \psi_{n'_2 k'_2}(x_2) \quad (2.36)$$

olur. (2.36) denklemini şöyle okuyabiliriz: $\psi_{n'_1 k'_1} \psi_{n'_2 k'_2}$ durumu, yukarıda verilen matris elemanı ile $\psi_{n_1 k_1} \psi_{n_2 k_2}$ durumuna saçılır. Dolayısıyla bütün durumların etkileşim potansiyeli matris elemanlarına, "g" eklemiş oluruz. İntegralde sadece $\psi_{n_1 k_1}^*(x_1)$ ve $\psi_{n'_1 k'_1}(x_1)$ terimleri olsaydı diklik bağıntısından n_1 ile n'_1 ve n_2 ile n'_2 bağımlı olacak diyebilirdik. Ancak diğer terimlerden dolayı bu integralleri almamız

gerekir. O yüzden hamiltoniyen matrisini kurmak için, burada kullandığımız durum sayısının karesi kadar integral hesabı yapılması gerekir. (2.36) integralini çözmek için, Gauss-Legendre yöntemini kullanılabilir.. Bu integralin, tüm $nk n'k'$ terimleri üzerinden hesaplanması gerekir. Ancak sıfır olan matris elemanlarını ayırırsak hesap kolaylaşır. Bunun için Ψ dalga fonksiyonu içindeki periyodik $u_{nk}(x)$ ile e^{ikx} kısmını ayırmak gerekir. Ancak biz "tek bant yaklaşımı" kullanacağımız için, integrallerdeki n terimleri düşer ve kalan terimleri hesaplayabiliriz.

2.1.3 Bloch durumu matris elemanları

(2.36) denkleminde, integraldeki ψ_{nk} dalga fonksiyonları yerine (1.9)'deki Bloch fonksiyonunu yazdığımız zaman, (2.37) denklemini ve dört tane C katsayısı ile exponansiyel terimleri içeren (2.38) denklemini elde ederiz.

$$\tilde{U}_{n_1,k_1,n_2,k_2}^{n'_1,k'_1,n'_2,k'_2} = g \int dx u_{n_1,k_1}^*(x) u_{n_2,k_2}^*(x) u_{n'_1,k'_1}(x) u_{n'_2,k'_2}(x) e^{-i(k_1+k_2-k'_1-k'_2)x} \quad (2.37)$$

$$= g \sum_{G_1 G_2} C_{n_1,k_1+G_1}^* C_{n_2,k_2+G_2}^* C_{n'_1,k'_1+G'_1} C_{n'_2,k'_2+G'_2} \times \int dx e^{-i(G_1+G_2-G'_1-G'_2)x} e^{-i(k_1+k_2-k'_1-k'_2)x} \quad (2.38)$$

$(k_1 + k_2 - k'_1 - k'_2)$ toplamı, $-2G$ ile $2G$ arasında değerler alır. O yüzden $(G_1 + G_2 - G'_1 - G'_2)$ toplamı da, bunu götürecektir şekilde, $-2G$ ile $2G$ arasında değerler almalıdır. Örneğin $(k_1 + k_2 - k'_1 - k'_2) = 0$ ise $(G_1 + G_2 - G'_1 - G'_2) = 0$ olmalıdır. Böylece (2.38) denklemindeki exponansiyellerin üzerindeki toplam sıfır olur ve dx integrali üzerinden hacim gelir. Buna göre,

$$G_1 + G_2 - G'_1 - G'_2 = (n_1 + n_2 - n'_1 - n'_2)G \quad (2.39)$$

yazabiliriz. (2.39) denklemindeki $(n_1 + n_2 - n'_1 - n'_2)$ ifadesi, -2 ile 2 arasındaki tamsayı (-2,-1,0,1,2) değerlerini alabilir. $u_{nk}(x)$ fonksiyonlarının hepsi, x uzayında periyodik olduğu için,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} u_{nk}(x) dx = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \int_{na}^{(n+1)a} u_{nk}(x) dx \quad (2.40)$$

yazabiliriz. n_1 ve k_1 için, bileşik i_1 indisini; n_2 ve k_2 için, bileşik i_2 indisini kullanarsak bu durumda integralimiz, aşağıdaki gibi olur.

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} dx u_{i_1}^*(x) u_{i_2}^*(x) u_{i'_1}(x) u_{i'_2}(x) e^{-i(k_1+k_2-k'_1-k'_2)x} \quad (2.41)$$

Tüm $u(x)$ fonksiyonları, x uzayında periyodik olduğu için; ΔK 'ya eşit olmalıdır.

$$(k_1 + k_2 - k'_1 - k'_2) = \Delta K \quad (2.42)$$

Şimdi bu integrali gene,

$$I = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \int_{na}^{(n+1)a} dx u_{i_1}^*(x) u_{i_2}^*(x) u_{i'_1}(x) u_{i'_2}(x) e^{-i(k_1 + k_2 - k'_1 - k'_2)x} \quad (2.43)$$

şeklinde toplama çevirerek parça parça yapalım. Gene $u(x)$ fonksiyonlarının periyodikliğini kullanarak; integrantların x terimi için, $(x + na)$ yazabiliriz. Bu durumda integral sınırları 0'dan a 'ya dönüşeceğinden integralin sonucu, tüm n 'ler için n 'den bağımsız hale gelir.

$$I = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \int_0^a dx u_{i_1}^*(x) u_{i_2}^*(x) u_{i'_1}(x) u_{i'_2}(x) e^{-i(k_1 + k_2 - k'_1 - k'_2)x} e^{-i(k_1 + k_2 - k'_1 - k'_2)na} \quad (2.44)$$

Böylece toplam içindeki integral,

$$\int_0^a dx u_{i_1}^*(x) u_{i_2}^*(x) u_{i'_1}(x) u_{i'_2}(x) e^{-i(k_1 + k_2 - k'_1 - k'_2)x} = I_{i_1 i_2 i'_1 i'_2} \quad (2.45)$$

şeklinde $i_1 i_2 i'_1 i'_2$ 'ye bağlı bir integrale, $u(x)$ fonksiyonları da $u(x + na)$ şekline dönüşür. Ancak $u(x)$ periyodik fonksiyon olduğu için, tüm n değerleri için $u(x) = u(x + na)$ eşitliği sağlanır. O yüzden tekrar tüm $u(x + na)$ terimleri yerine $u(x)$ yazabiliriz. İntegrali toplamın dışına alırsak, (2.46) ifadesini elde ederiz.

$$I = I_{i_1 i_2 i'_1 i'_2} (\Delta K) \sum_n e^{-i\Delta K a n} \quad (2.46)$$

Buradaki k_1, k_2, k'_1, k'_2 vektörleri BZ'daki ters örgü vektörleridir. k vektörlerinden dördünü bu şekilde toplayıp çıkardıktan sonra tüm an 'ler üzerinden toplama yapacağız. Δk vektörü, G ters örgü vektörlerinden birine eşitse, (2.46) denklemindeki toplam terimi, bir verir; aksi halde sıfır verir. Kaç tane birim hücre varsa hepsi için sonuç bir çıkacağından toplam ifadesini, $\sum_n e^{i\Delta K a n} = N_{\text{Birim hücre}} \delta_{G,k}$ şeklinde dirac-delta fonksiyonu ile gösterebiliriz. O halde,

$$\boxed{k_1 + k_2 - k'_1 - k'_2 = G_n} \quad (2.47)$$

toplamını, değişik G_n değerleri için hesaplamamız gerekir.

Tüm k 'lar, BZ içinde olduğu için, $-\pi$ ile π arasında değerler alır. G_n 'leri G_0 cinsinden yazarsak, o zaman G_n sadece $-2, -1, 0, 1, 2$ şeklinde 5 tane değer alır. $(k_1 + k_2 - k'_1 - k'_2)$ toplamı, bu değerleri alacak şekilde $k_1, k_2, -k'_1$ ve $-k'_2$ değerlerini seçmeliyiz. k 'nın maksimum ve minimum değerleri kolay bir şekilde görülür. Örneğin, $k_1 + k_2 = \pi$, $-k'_1 - k'_2 = -\pi$ iken $k_1 + k_2 - k'_1 - k'_2 = 4\pi$ olur. O yüzden hesaplanan G 'nin maksimum değeri $\text{maks}(G) = 4\pi = 2G_0$ olur. Benzer şekilde minimumu da $\text{min}(G) = -4\pi = -2G_0$ olur. Benzer şekilde diğer durumları da oluşturabiliriz. Böylece sıfırdan farklı matris elemanlarını bu şekilde oluşturup toplayabiliriz. Sonrasında da birim hücre üzerinden integrali alabiliriz.

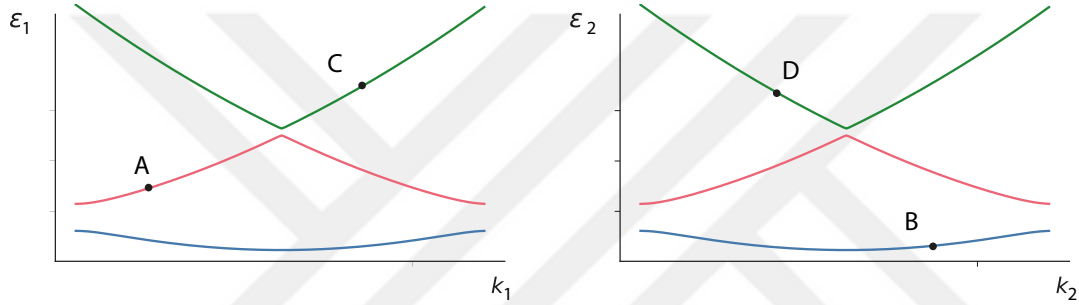
2.1.4 İki parçacık enerji özdurationları

İki parçacık baz uzayını $|n_1 k_1\rangle \otimes |n_2 k_2\rangle$ şeklinde oluşturup, tüm baz vektörlerini "Bloch states" adı altında listeleyebiliriz. Oluşturduğumuz listede, bant sayısını ve her bir banttaki durum sayısını istediğimiz gibi seçebiliriz. Örneğin tek parçacık için, 3 bant ve her bantta 8 durum seçtiğimizde, $3 \times 8 = 24$ tane Bloch durumu oluşturmuş oluruz. Bu baz uzayındaki her bir durumu numaralandırıp listeleyebiliriz. Programda, oluşturduğumuz listeden herhangi bir elemanı çekerek bu duruma ait $|n, k\rangle$ sayılarını ve k momentum değerini görebiliriz. Örneğin baz uzayındaki 8. elemana (Bloch_states[8]) bakmak istersek, program bu duruma ait, $[n, k] = [1, 0]$ ve $k = -\pi$ değerlerini bize verir. Ya da sondan dördüncü elemana (Bloch_states[-4]) bakmak istersek $[n, k] = [2, 3]$ ve $k = 0$ değerlerini görürüz. . Bu da şekil 2.2'de gösterilen ikinci bant üzerinde bir noktaya, örneğin A noktasındaki duruma, karşılık gelir (Şekil A.9).

İki parçacık durumların her birinden iki tane alıp kartezyen çarpım yaptığımız için, $24 \times 24 = 576$ tane iki parçacık Bloch durumu oluşur. Benzer şekilde iki parçacık baz uzayının da tüm elemanlarını görebiliriz. Mesela 4. iki parçacık Bloch durumuna (Bloch_states[4]) bakmak istersek, program n ve k indislerini $[n_1, k_1] = [0, 0], [n_2, k_2] = [0, 4]$ şeklinde bize verir. Ya da tam tersi $[n, k]$ indislerini biz girerek bu durumun, kaçınıcı Bloch durumu olduğunu programdan alabiliriz. Örneğin $[n_1, k_1] = [1, 3], [n_2, k_2] = [2, 4]$ indislili iki parçacık Bloch durumu, 284. durumdur (Şekil A.11).

2.1.5 Sıfırdan farklı matris elemanları

Bölüm 2.1.4’ de tüm Bloch durumlarını belirleyip etiketledik. Şimdi parçacıklar arası etkileşimi dikkate alarak, etkileşim sonrası, hangi iki parçacık durumlarının ortaya çıkacağına bakacağız. Sıfırdan farklı matris elemanlarını hesaplamak istediğimiz için, tüm durumlar üzerinden hesap yapmamıza gerek kalmayacak. Bunun için parçacıkların, Bloch durumlardaki enerjilerini almamız gerekir. Etkileşim yokken, $|n_1 k_1\rangle$ ile $|n_2 k_2\rangle$ durumlarının enerjileri toplamı, hamiltoniyendeki köşegen elemanları verir. Böylece matrisin köşegen elemanlarını oluşturmuş oluruz. Şimdi bunun üzerine, iki parçacık etkileşimi sonucu gelen matris elemanlarını ekleyeceğiz.



Şekil 2.2 : Etkileşen iki parçacığın, momentum uzayındaki durumlarının değişimi.

İki parçacıklı sistem için kuazimomentumun korunumunu, (2.47) denkleminde yazmıştık. Şimdi bu dört duruma ilişkin (2 gelen, 2 saçılan), olası tüm momentumları göz önüne alalım. Mesela şekil 2.2’de A ve B durumundaki iki parçacık, saçılma sonrası C ve D gibi farklı iki duruma gider. O halde tüm durumlar içinde, (2.47) koşulunu sağlayan momentum durumlarını bulmamız gerekir. Bunun için tüm kartezyen çarpım listesinde, (2.47) şartını sağlayan dört momentum durumunu, programa listeletebiliriz. G_n değerleri; -2,-1,0,1,2 değerlerini alabileceği için, programa her G_n değeri için bu işlemi yaptırmamız gerekir.

$$\begin{aligned}
 k_1 + k_2 - k'_1 - k'_2 &= -2 \\
 k_1 + k_2 - k'_1 - k'_2 &= -1 \\
 k_1 + k_2 - k'_1 - k'_2 &= 0 \\
 k_1 + k_2 - k'_1 - k'_2 &= 1 \\
 k_1 + k_2 - k'_1 - k'_2 &= 1
 \end{aligned} \tag{2.48}$$

Böylece, (2.47) koşulunu sağlayan tüm momentum durumlarına ait listeyi elde ederiz ve her bir G_n değeri için, (2.47) denklemini sağlayan kaç durum olduğunu bulabiliriz (Şekil A.12). Bu, toplam 4000 durumluk bir listedir. Örneğin 708 numaralı iki parçacık durumuna (ya da matris elemanına) bakmak istersek; $k_1 = 1$, $k_2 = 2$, $k'_1 = 2$, $k'_2 = 1$ değerlerini listeden görebiliriz. Ya da her bir durumun olasılık yoğunluğunu hesaplayabiliriz. Mesela $k_1 + k_2 - k'_1 - k'_2 = 0$ durumunun olasılık yoğunluğu 0.08989'dur.

Artık hangi iki durumların etkileştiğini ve bu etkileşim sonucunda hangi iki durumun oluştuğunu biliyoruz. Tüm liste elimizde mevcut. Şimdi etkileşen bu durumlar arasındaki matris elemanlarını bulmamız gerekir. Örneğin 18. ve 41. duruma bakıyorsak bu iki durum arasındaki matris elemanını yani hamiltoniyenin 18. ve 41. elemanını hesaplayacağız.

Bu hesabı gerçek uzayda ve momentum uzayında yapabiliriz. Gauss integralini (1.19) kullanarak gerçek uzayda hesabı yapabiliriz. Bunun için buradaki fonksiyonları, C_{nk} ve u_{nk} 'ları alarak integrallerini hesaplayabiliriz. 18. ve 41. durum için bu integralin reel kısmı -0.8208461781799.., imajiner kısmı ise 0 çıkar (Şekil A.14). Aynı hesabı momentum uzayında, C_k 'ları kullanarak yaparsak, gerçek uzayda Gauss integrali olarak hesapladığımız matris elemanı ile son derece uyumlu sonuç verdiğini görürüz (Şekil A.13).

2.2 Tek Bant Yaklaşımı

Bu kısımda parçacıkların, sadece düşük enerjili en alt banttaki kuantum durumlarına sahip olabileceğini varsayacağız. Yüksek enerjili üst bantların ihmal edildiği bu modele "tek bant yaklaşımı" denir. Bu durumda, ϵ_{nk} şeklinde, farklı n bant indisleri kullanmamıza gerek kalmaz ve enerjileri sadece momentuma bağlı olarak ϵ_k şeklinde yazabiliriz. Bu modele göre, momentum uzayındaki durumların gerçek uzaydaki görüntüsü, her birim hücreye tek bir orbital ve tek bir parçacık yerleşmesi şeklinde olur. Bu durumda kinetik enerji terimini, J hoplama parametresi yardımıyla; etkileşimi ise, U Hubbard etkileşim sabiti dediğimiz, tek bir parametre ile ifade edebiliriz. Burada U , potansiyelin şeklini ve derinliğini belirleyen bir parametredir.

2.2.1 Tek bant yaklaşımında gerçek uzayda iki parçacık problemi

Bir boyutlu optik örgüde, iki parçacıklı bir bozon çifti için, Valiente ve Petrosyan; sıkı bağ-Hubbard modelini kullanarak, hem çekici hem de itici kontak etkileşim için birtakım analitik sonuçlar üretmiştir. Bunun için, parçacıkların x_1 ve x_2 koordinatlarının Fourier transformu ile kütle merkezi momentumuna geçilmiş fakat $(x_1 - x_2)$ relatif koordinat değiştirilmeden, relatif konum uzayında kalınarak kesin çözüm yapılmıştır [7].

Bir boyutlu optik örgüde, iki parçacıklı sistem için Hubbard hamiltoniyeni, Valiente ve Petrosyan tarafından, denklem (2.49)'deki şekliyle verilmiştir [7]. Buradaki J , komşu hücreler arasındaki hoplama parametresi ya da geçiş katsayısı olarak adlandırılır.

$$H^{(2)} = -J \sum_j (|x_j\rangle \langle x_{j+1}| + |x_{j+1}\rangle \langle x_j|) - J \sum_j (|y_j\rangle \langle y_{j+1}| + |y_{j+1}\rangle \langle y_j|) + U \sum_j |x_j, y_j\rangle \langle x_j, y_j| \quad (2.49)$$

Kütle merkezi koordinatı $R = \frac{1}{2}(x + y)$ ve relatif koordinat $r = (x - y)$ tanımlarını kullanarak, iki parçacıklı sistemin dalga fonksiyonunu,

$$\Psi(x, y) = e^{iKR} \psi_K(r) \quad (2.50)$$

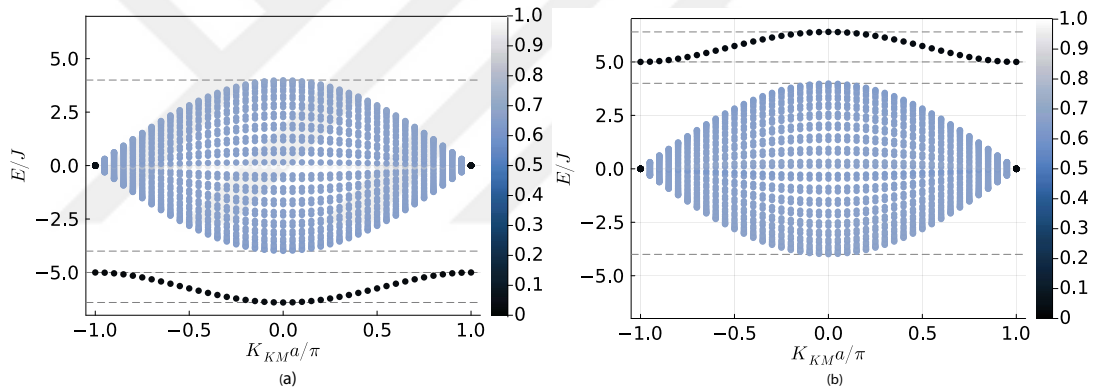
şeklinde ayırabiliriz. Burada $\psi_K(r)$, relatif koordinat dalga fonksiyonu; K ise kütle merkezi kuazimomentumudur. Buna göre $J_K = 2J \cos(Kd/2)$ ve $r_i = d_i$ ($i = j - j'$) olmak üzere, denklem (2.51)'daki tekrarlama bağıntısı verilmiştir [7].

$$-J_K [\psi_K(r_i - 1) + \psi_K(r_i + 1)] + U \delta_{r_0} \psi_K(r_i) = E_K^{(2)} \psi_K(r_i) \quad (2.51)$$

Valiente ve Petrosyanın makalesinde [7], fenomenin iyi görülebilmesi için; çekici etkileşimler için $U = -5J$, itici etkileşimler için $U = 5J$ alınarak (2.51) denkleminin analitik çözüm yapılmış ve iki parçacık kütle merkezi enerjisi $E_K^{(2)}$ 'nin kütle merkezi momentumu K 'ya göre grafikleri çizilmiştir. Biz de "*QuantumOptics V1.0.9*" paketini kullanarak, aynı denklemin (2.51) nümerik çözümünü yapalım ve sistemin durumlarını bulalım. Bunun için öncelikle hamiltoniyeni oluşturalım (Şekil A.15).

Sadece relatif koordinata göre bir hamiltoniyen yazacağız. Sonra herhangi bir kütle merkezi momentumu K için, hamiltoniyeni oluşturabiliriz. J_K geçiş katsayısı, bize soldan sağa hoplamları verir. Bunu iki parçacık için yaptığımızda, iki parçacık kütle merkezi kuazikristal momentumunun her değerine göre, farklı bir hoplama terimi gelir. Dolayısıyla ilk başta hangi kütle merkezi momentumunu aldıysak, ona göre bir hoplama parametresi belirleyerek, sıkı bağ modelini oluşturabiliriz.

Şimdi iki parçacık arasındaki etkileşimi, çekici etkileşim olarak ($U < 0$); her bir K değeri için, hamiltoniyenin nasıl olduğuna ve enerjilerin nasıl çıktığına bakalım. Öncelikle, özel olarak $K = \frac{\pi}{a}$ değerine bakarsak, tüm enerjilerin dejenere olduğu bir düz bant ve sadece $E_K^{(2)} = -5$ olan bir bağlı durum elde ederiz. Daha sonra $-\frac{\pi}{a}$ ile $\frac{\pi}{a}$ arasında seçtiğimiz her bir K değeri için, denklem (2.49)'deki hamiltoniyeni programa oluşturtup, bunun öz durumlarını buldurursak, çekici etkileşimler için şekil 2.3-(a)'daki grafiği elde ederiz.



Şekil 2.3 : Tek bant yaklaşımında, iki parçacık enerjilerinin, kütle merkezi kuazimomentumuna göre değişimi: İlk grafik (a) çekici etkileşim için, ikinci grafik (b) itici etkileşim için çizilmiştir. Renk kodu, durumun katılım oranını göstermektedir ve siyah renk bağlı durumları göstermektedir.

Şekil 2.3a'daki grafikte ortadaki dolu kısım, bant aralığını; altta $E_K^{(2)} = -5$ enerjisinden başlayan noktaların oluşturduğu kısım ise bağlı durumları göstermektedir. En alttaki minimum enerji ise, [7] makalesinde $E_K^2 = -\sqrt{U^2 + 4J_K^2}$ ile verilen, minimum bağlı durum enerjisidir.

Parçacıklar arası etkileşimi, itici etkileşim olarak ($U > 0$); aynı hesabı tekrarlırsak şekil 2.3-(b)'deki grafiği elde ederiz. Bu sefer İlginç bir şekilde, bant bölgesinin üstünde çıkan bağlı durum enerjilerinin, pozitif değere sahip olduğu görülmektedir.

Bir optik örgüde, iki bozon parçacığı arasında itici etkileşim olmasına rağmen bu iki parçacıktan oluşan sistem, bağlı durumda olabilir. Bu tip iki parçacıklı sisteme, "egzotik atom çifti" ya da "dublon" denir. Bu ilginç olay, bir optik örgüdeki ultra soğuk atom çiftlerinde, deneysel olarak ilk kez Winkler ve diğerleri [11] tarafından gözlenmiştir. Aralarındaki itici etkileşime rağmen bu iki parçacık, periyodik potansiyel sayesinde, uzun süre bir arada kalarak "dinamik kararlı" bir bağlı "dimer" durumu oluşturabilir [11].

Şekil 2.3'deki grafiklerde açık renkle gösterilen, ortadaki sürekli bölge içindeki durumlar, saçılma durumlarıdır. Bu durumlara ilişkin dispersiyon bağıntısı,

$$E_{K,k}^{(2)} = -4J \cos(Ka/2) \cos(ka) = -2J_K \cos(ka) \quad (2.52)$$

olarak verilmiştir [7]. Bu durumların maksimum ve minimum değerleri, $E_{0,\pi}^{(2)} = 4J$ ve $E_{0,0}^{(2)} = -4J$ olur. Yatay doğrultular, bu sınırları gösterir. Aynı değerleri [7]'deki makalede de görürüz. Böylece makale [7]'daki analitik hesabın, nümerik olarak da kontrolünü yapmış oluruz.

2.2.2 Bloch tabanı temsili

Bu kısımda, şekil 2.3'de elde ettiğimiz çözümleri; momentum uzayında, Bloch bazını kullanarak yapacağız. Konum uzayında tek bant olduğu için, her birim hücrede bir tane durum olur. Bu durumda öz durumlar, doğrudan (2.50) denklemi ile; enerjiler ise, (2.52) denklemi ile ifade edilebilir. Yani bant indisine gerek kalmaz.

Çözüm için Bloch tabanındaki baz vektörlerini oluştururken, "position basis" ve "momentum basis" paketini kullanacağız. Önce, konum uzayında, -5'den 4'e kadar 10 tane nokta alalım ve sonra bunların fourier transformunu alarak momentum bazına geçelim. Bu durumda momentum uzayında,

$$(-\pi, -0.8\pi, -0.6\pi, -0.4\pi, -0.2\pi, 0, -0.2\pi, 0.4\pi, 0.6\pi, 0.8\pi) \quad (2.53)$$

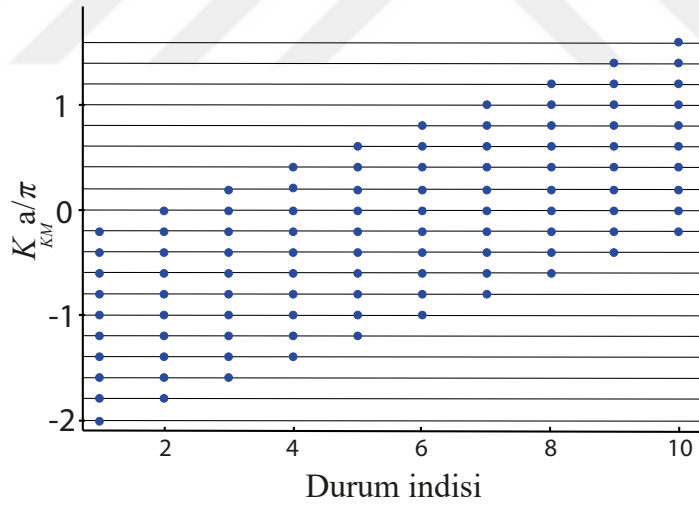
momentum değerlerini elde ederiz (Şekil A.16). Şimdi bu değerleri,

$$(1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10) \quad (2.54)$$

şeklinde indeksleyelim. Yani ilk momentumu $(-\pi)$, 1 indisiyle; ikinci momentumu (-0.8π) , 2 indisiyle; sonraki momentumları da diğer indislerle gösterelim.

Buna göre, mesela momentumları sırasıyla -0.6π ve -0.4π olan olan iki parçacık durumunu, $[3,4]$ şeklinde gösterebiliriz ve bu durumun kütle merkezi momentumunun, $K = (-0.6\pi - 0.4\pi) = -\pi$ olduğunu söyleyebiliriz.

Şimdi şunu soralım: Kütle merkezi momentumu $K = -\pi$ olan diğer iki parçacık durumları nelerdir? Bu durumların; $[2,5]$ ve $[1,6]$ olduğu hemen görebiliriz. Aynı şekilde, $K = -1.2\pi$ momentumuna sahip durumlar; $[1,7]$, $[2,6]$, $[3,5]$, $[4,4]$ şeklindedir. Bu şekilde, BZ içinde aynı kütle merkezi momentumuna sahip tüm durumları belirleyip, bunları K 'ya göre gruplayabiliriz. Şekil 2.4'de, aynı K momentumuna sahip tüm durumları görebiliriz. Burada dikey eksen, K kütle merkezi momentumunu; yatay eksen, ilk parçacığın indisini göstermektedir. İkinci parçacığın indisine, her bir dikey grupta, en alttaki nokta için 1, en üstteki için 10 diyeceğiz. Örneğin sol en alttaki $K = -2\pi$ momentumuna sahip iki parçacık durumu, $[1,1]$ durumudur. İkinci satırdaki $K = -1.8\pi$ momentumuna sahip durumlar, $[1,2]$ ve $[2,1]$ durumudur. Üçüncü satırdaki $K = -1.6\pi$ momentumuna sahip durumlar, $[1,3]$, $[2,2]$ ve $[3,1]$ durumudur. Sağ en üstteki, $K = 1.6\pi$ momentumuna sahip durumlar, $[10,10]$ durumudur.



Şekil 2.4 : Kütle merkezi kuzaimomentumunun parçacık indisine göre grafiği.

Böylece tüm momentum durumlarını elde ederiz. Ancak (2.47) denkleminde gördüğümüz gibi, $(k_1 + k_2 - k'_1 - k'_2)$ değerleri, $-2G_0$ ile $2G_0$ arasında olmalıdır. Bizim örgü aralığımız, $-\pi$ ile π arasında olduğu için; bu aralık dışındaki durumlara ait K değerleri, örgü içindeki değişik momentum değerlerine denktir. O halde örgü dışında kalan bu noktaları, örgü içine, kendisine denk olan yerlere taşımamız gerekir.

Örneğin şekil 2.4’de, en alt satırdaki -2 durumunun momentumu, üstte 0 durumunun momentumuna denktir. O yüzden [1,1] ile gösterdiğimiz -2 noktasını, üstte 0 noktasına taşımamız gerekir. Böylece $K = 0$ olan yatay doğrultuda 10 tane durum olmuş olur. Benzer şekilde ikinci satırdaki iki duruma 2π eklediğimizde, bu iki durum da $K = 0.2$ satırını doldurur. Aynı şekilde toplamı $K = 0.2$ olan 10 tane durum olur. Bu şekilde tüm durumlar örgü içinde kalacak şekilde gruplamayı yeniden düzenlersek, şekil A.17’deki listeyi elde ederiz.

Şekil A.17’deki listeye baktığımızda 55 tane iki parçacık durumu görürüz. Bunun kontrolünü şöyle yapabiliriz. Başlangıçta 10 durum almıştık. Şimdi iki bozon parçacığını, 10 duruma kaç farklı şekilde yerleştireceğimizi bulalım. Parçacıklar bozon olduğu için, iki parçacık aynı durumda olabilir. Bu şekilde 10 durumu doldurabiliriz. Ya da parçacıkları farklı iki duruma koyabiliriz. Bu şekilde $(10 \times 9)/2 = 45$ durum olur. Toplamda $45 + 10 = 55$ tane iki parçacık durumu elde ederiz.

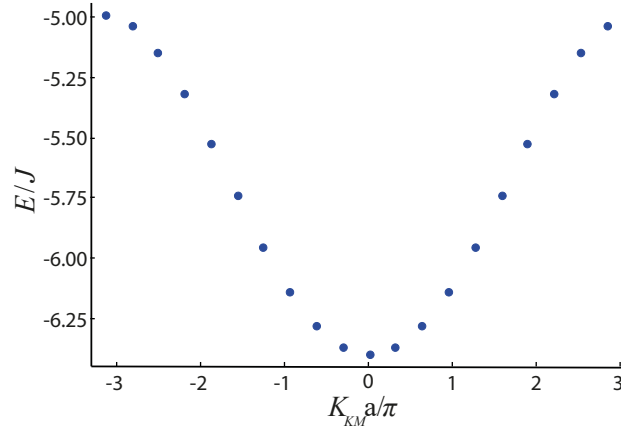
İki parçacık durumlarını oluşturduktan sonra, şimdi hamiltoniyenimizi oluşturabiliriz. Bunun için k_1 ve k_2 momentumlarını, oluşturduğumuz k_{points} listesinden alabiliriz ve (2.52) denklemini kullanarak kinetik enerjileri bulabiliriz. Daha sonra hamiltoniyene etkileşim terimini ekleyerek kodlamayı tamamlayabiliriz (A.18). Enerji durumlarını çizdirdiğimizde, şekil 2.3’deki grafiği bir kez daha elde ederiz ve bölüm 2.2.1’deki çözümün sağlamasını yapmış oluruz.

2.2.3 Bağlı durumlar

2.2.3.1 Bağ uzunluğu

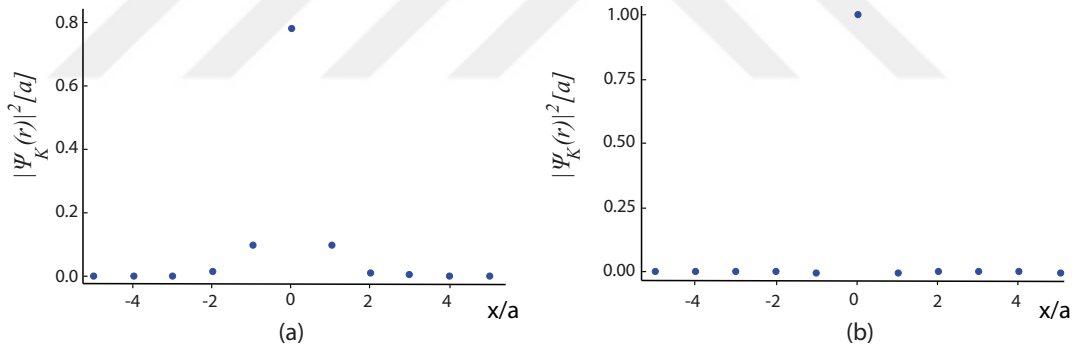
Şekil 2.3-(a)’daki koyu renkte gösterilen bağlı durumlara ait enerji değerlerinin grafiğini, daha iyi görebilmek için, ölçeği değiştirerek tekrar çizelim (Şekil 2.5).

Şekil 2.5’deki bağlı durumların molekül uzunluğunu bulabiliriz. Örneğin $K = \pi$ için, enerjileri ve dalga fonksiyonlarını elde etmiştik. $K = \pi$ için ilk durumu, $E = -5$ enerjili bağlı durum; diğer durumları ise sürekli bant içinde saçılma durumları olarak bulmuştuk (Şekil 2.3). Şimdi çözümlerinden birincisini alıp, bunun bileşenlerine bakabiliriz.



Şekil 2.5 : Bloch tabanı temsiline göre elde edilen bağlı durum enerjilerinin kütle merkezi kuazimomentumuna göre grafiği.

Seçtiğimiz 10 adet örgü noktası için, olasılık dağılımının relatif koordinata göre grafiği şekil 2.6'deki gibi olur. Şekil 2.6-(b)'deki grafikte, $K = \pi$ durumu için, görüldüğü gibi sadece relatif koordinat $r = x_1 - x_2 = 0$ iken, dalga fonksiyonu sıfırdan farklıdır. Burada parçacıklar arası mesafe sıfıra tekabül eder. O yüzden $r = 0$ durumunun bağ uzunluğu sıfır olur. Yani iki parçacık da aynı noktada, belirli bir K kütle merkezi momentumu ile, birlikte hareket ederler.

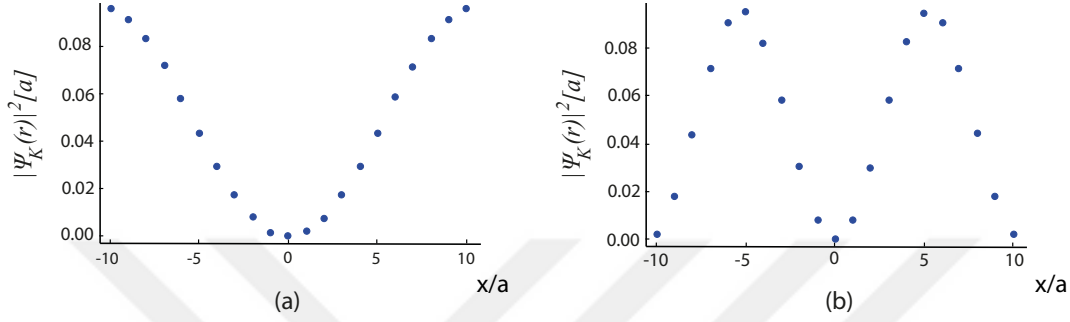


Şekil 2.6 : $K = 0$ ve $K = \pi$ kütle merkezi kuazimomentumuna sahip bağlı durumların, olasılık dağılımlarının relatif koordinata göre grafiği.

$K = 0$ için, negatif enerjili bağlı durumun olasılık dağılımına bakarsak, şekil 2.6-(a)'daki grafiği elde ederiz. Bu durumda r 'nin ortalaması $\langle r \rangle = 0$ olur. Ancak $\sqrt{\langle r^2 \rangle}$ ifadesi yardımıyla bağ uzunluğunu bulabiliriz (Şekil A.23).

2.2.3.2 Katılım oranı

$K = 0$ ve $K = \pi$ kuazimomentumlarına sahip bağlı durumların, olasılık yoğunluğu grafiğini şekil 2.6'de çizmiştik. Şimdi, enerjilerini şekil 2.3'de verdiğimiz ilk iki saçılma durumunun olasılık dağılımı grafiklerine bakmak istersek şekil 2.7'deki grafikleri elde ederiz.



Şekil 2.7 : $K = 0$ ve $K = \pi$ kütle merkezi kuazimomentumuna sahip saçılma durumların, olasılık dağılımlarının relatif koordinata göre grafiği.

Çizdiğimiz grafikler, dalga fonksiyonunun karesi yani olasılık dağılımı grafiğidir. Şimdi bu olasılıkların tekrar karesini, yani dalga fonksiyonunun dördüncü kuvvetini, alıp; relatif koordinattaki her nokta için bu değerleri toplarsak, "katılım oranı (participation ratio-PR)" olarak tanımladığımız niceliği elde ederiz.

$$PR = \sum_i P_i^2 = \sum_i |\Psi|^4 \quad (2.55)$$

PR değeri bize dalga fonksiyonlarının hangi ölçüde lokalize olup olmadığı hakkında bilgi verir. Örneğin şekil 2.6-(b) grafiğinde verilen, $K = \pi$ bağlı durumu için, relatif koordinatta olasılık sadece tek bir noktada bir, diğer noktalarda sıfır olduğundan; bu tabanda dalga fonksiyonunun dördüncü kuvvetinin katsayılar toplamı $PR = \sum_i |\Psi|^4 = 1$ olur. Fakat şekil 2.7'de verilen saçılma durumları gibi çok fazla salınım yapan bir olasılık genliği varsa katılım oranını, $PR = \sum_i |\Psi|^4 \approx 10^{-3}$ gibi küçük bir sayı buluruz. Dolayısıyla bağlı durumlar için PR değeri 1'e yakın bir değer bulunurken; bütün sisteme yayılmış, parçacıklar arası mesafenin pek çok değer alabildiği durumlar için, PR değeri sıfıra yakın çıkar.

İstersek, PR katılım oranına bakmak yerine, (2.56) eşitliğiyle tanımladığımız, "ters katılım oranı (inverse participation ratio-IPR)" niceliğine de bakabiliriz.

$$\text{IPR} = \frac{1}{P_i^2} = \frac{1}{\sum_i |\Psi^4|} \quad (2.56)$$

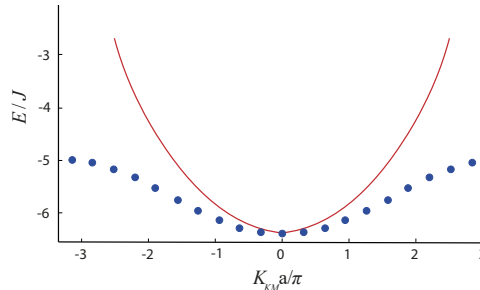
Bu durumda ise bağlı durumlar için, PR değerinde olduğu gibi, IPR değerini de 1'e yakın bulurken; saçılma durumları için $\text{IPR} \approx 10^3$ şeklinde büyük sayılar buluruz. Bu şekilde IPR'yi kullanarak dalga fonksiyonlarının ne kadar lokalize olup olmadığını ölçebiliriz. Şekil 2.3'deki grafiğimizde koyu renkler IPR oranı 1'e yakın olan bağlı durumları göstermektedir. Açık renkler ise IPR oranı çok büyük olan saçılma durumlarını göstermektedir. Böylece IPR hesabıyla, spektrumdaki bağlı durumları tespit edebiliriz ve şekil 2.3'deki gibi renklendirerek, bu durumları görebiliriz.

2.2.3.3 Etkin kütle

Şekil 2.5 grafiğinde elde ettiğimiz bağlı durumlar, iki parçacık arasındaki mesafenin sonlu olduğu durumlardır. O yüzden bu eğriye, molekülün kütle merkezi kinetik enerjisi ile kütle merkezi kuazi momentumu arasında ilişki kuran, bir dispersiyon bağıntısı gözüyle bakabileceğimizi söylemiştik. O halde bu dispersiyon bağıntısında, enerjinin momentuma göre ikinci türevini alarak,

$$\frac{\partial^2 E}{\partial K^2} = \frac{1}{m_{\text{etkin}}} \quad (2.57)$$

şeklinde molekülün etkin kütlesini bulabiliriz. Buna göre şekil 2.5 grafiğindeki sayısal verilere bir eğri uydurarak (Şekil 2.8), $K = 0$ civarındaki etkin kütleyi güzel bir kuadratik yaklaşımla hesaplayabiliriz. Sonraki bölümde, etkin kütleinin U Hubbard etkileşim sabiti diğer parametreler ile nasıl değiştiğini inceleyeceğiz.



Şekil 2.8 : Bağlı durum enerjilerinin kütle merkezi kuazimomentumuna göre grafiğine $K = 0$ civarında eğri uydurarak bu durum için etkin kütleyi hesaplayabiliriz.

2.2.4 Tek bant yaklaşımında Cooper çifti problemi

Martikainen, tek bant yaklaşımı altında, ultra soğuk nötr fermiyonik atomlardan oluşan iki parçacıklı sistemin dalga fonksiyonunu,

$$\psi(x_{\downarrow}, x_{\uparrow}) = \prod_{\alpha \in \{x, y, z\}} e^{iK_{\alpha} [c_{\alpha} x_{\downarrow, \alpha} + (1-c_{\alpha}) x_{\uparrow, \alpha}]} \psi(\mathbf{r}) \quad (2.58)$$

şeklinde vermiştir [4]. Parçacıkların x_1 ve x_2 durumları, aşırı ince yapı seviyelerine karşılık gelen farklı spin durumları olduğu için, $x_{\uparrow}$ ve $x_{\downarrow}$ şeklinde gösterilmiştir. Kütle merkezi enerjisi,

$$\mathbf{E}(\mathbf{K})_{\alpha} = -t_{\downarrow, \alpha} \cos(K_{\alpha} c_{\alpha}) - t_{\uparrow, \alpha} \cos(K_{\alpha} (1 - c_{\alpha})) \quad (2.59)$$

şeklinde tanımlanmıştır. Burada t , geçiş katsayısı (tunneling strengths) olup; J hoplama parametresi yerine kullanılmaktadır. c_{α} ise kütle merkezi koordinatına bağlı bir katsayıdır. Parçacıkların kütleleri birbirine eşit olduğunda, $c_{\alpha} = 1/2$ alınır. (2.58) ile verilen dalga fonksiyonu, Schrodinger denkleminde yerine yazılıp relatif koordinat için Fourier transformu yapılırsa,

$$\frac{-1}{g} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{f(\mathbf{K}, \mathbf{q}) - E} \quad (2.60)$$

denklemini elde edilir. Burada N , örgü sayısı; q ise (daha önce k ile gösterdiğimiz) BZ içindeki relatif momentum vektörleridir. $f(\mathbf{K}, \mathbf{q})$ fonksiyonu,

$$f(\mathbf{K}, \mathbf{q}) = \sum_{\alpha} 2\mathbf{E}(\mathbf{K})_{\alpha} (\cos(\mathbf{q}_{\alpha}) - 1) + 2(t_{\downarrow, \alpha} + t_{\uparrow, \alpha} + \mathbf{E}(\mathbf{K})_{\alpha}) \quad (2.61)$$

şeklinde tanımlanmıştır [4]. Böylece problem, bölüm 2.2.1’de olduğu gibi, kütle merkezi kuazi momentumu K ’ya bağlı olacak şekilde, efektif olarak tek parçacık problemine dönüşmüş olur. Bu durumda (2.60) denkleminin köklerini bularak enerji özdeğerlerini elde edebiliriz.

(2.60) denklemini önce, q ’lar üzerine bir kısıtlama koymadan, yani fermi denizini dikkate almadan, çözelim. Bunun için (2.60) denkleminin kök bulma kodunu yazabiliriz. j ve g bilgisini de girerek bütün kuazimomentumlar üzerinden toplama yapacağız. Buradaki q ’lar, bölüm 1.1’de elde ettiğimiz Bloch durumlarıdır. Bu durumda (2.60) eşitliğini sağlayan E değerleri, bize enerji özdeğerlerini verir. Böylece bu çözümü kendi nümerik çözümümüzle karşılaştırarak sağlama yapabiliriz.

Bölüm 2.2.4’de, (2.60) denklemini, tüm q ’lar üzerinden toplam alarak çözmüştük. Şimdi bu toplamı, tüm q ’lar üzerinden yapmayıp bazı kısıtlamalarla yapacağız. Yani toplamdaki bazı terimleri çıkartacağız. Şimdi,

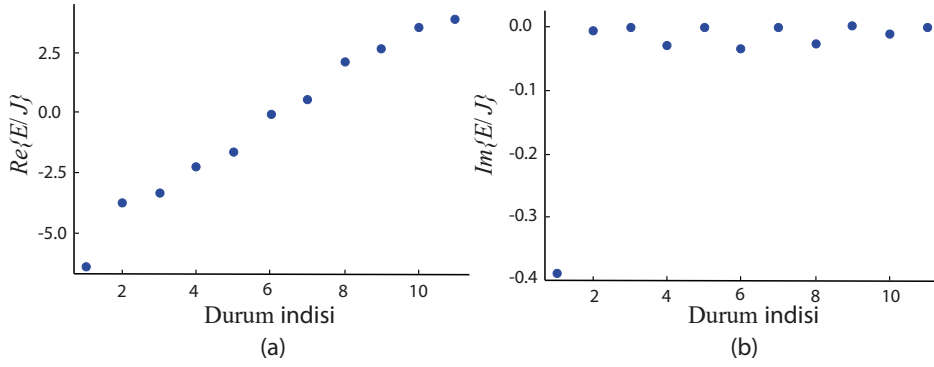
$$\varepsilon(q)_\sigma = \sum_\alpha 2t_{\sigma,\alpha} [1 - \cos(q_\alpha)] \quad (2.62)$$

ile verilen [4] dispersiyon bağıntısını kullanalım ve birinci parçacık için, ε_{F_1} Fermi enerjili bir Fermi yüzeyi varsayalım. Fermi enerjisinin altındaki tüm durumlar dolu olduğu için, birinci parçacık için kullanacağımız momentum değerleri $(q + K/2)$ ise bu durumların $\varepsilon_1(q + K/2)$ enerji değeri, ε_{F_1} fermi enerjisinden büyük olmalıdır. Aynı şekilde ikinci parçacığın Fermi enerjisine ε_{F_2} dersek bu parçacığın $(-q + K/2)$ momentum durumlarına karşılık gelen $\varepsilon_2(-q + K/2)$ enerjileri, gene ε_{F_2} ’nin üzerinde olmalıdır. Dolayısıyla (2.62) bağıntısındaki toplam içinde yer alan q relatif momentum durumları, $\varepsilon_1(q + K/2) > \varepsilon_{F_1}$ ve $\varepsilon_2(-q + K/2) > \varepsilon_{F_2}$ kısıtlamalarının her ikisi de bir arada sağlanmalıdır [4]. Bu kısıtlamaları koyduğumuzda, problem artık Cooper çifti problemine dönüşmüş olur.

2.3 Kompleks Etkileşim Etkileri

Bölüm 2.2.1’de kullandığımız iki parçacık hamiltoniyenin, hermitsel olup olmadığını programa sorgulatırsak, hermitsel olduğunu görürüz (Şekil A.19). Şimdi bu hamiltoniyeni, reel ve imajiner kısımlardan oluşan, kompleks hamiltoniyen haline getirelim. Bu durumda hamiltoniyemiz artık hermitsel olmaz (Şekil A.20). Fakat gene de bu kompleks hamiltoniyenin öz durumlarını bulabiliriz. Ancak bu sefer sağ ve sol öz durumlar birbirinden farklı olur. Örneğin biz sağ öz durumlara bakalım. (11×11) ’lik hamiltoniyen matrisimizin, öz durumlarına baktığımızda; K kütle merkezi momentumuna bağlı olarak, reel ve kompleks enerji değerleri elde ederiz. Örneğin $K = 0$ için, reel ve imajiner enerji değerlerini şekil 2.9’daki gibidir (Şekil A.21).

Şekil 2.9-(b)’deki grafik bize, durumların yok olma zamanı (lifetime) hakkında fikir verir. Grafikte sol alt köşede enerjisi negatif olan durumun yok olma zamanı kısadır. Enerjisi sıfır olan durumların yok olma zamanı sonsuzdur. Bu durumlar bozunmaz.



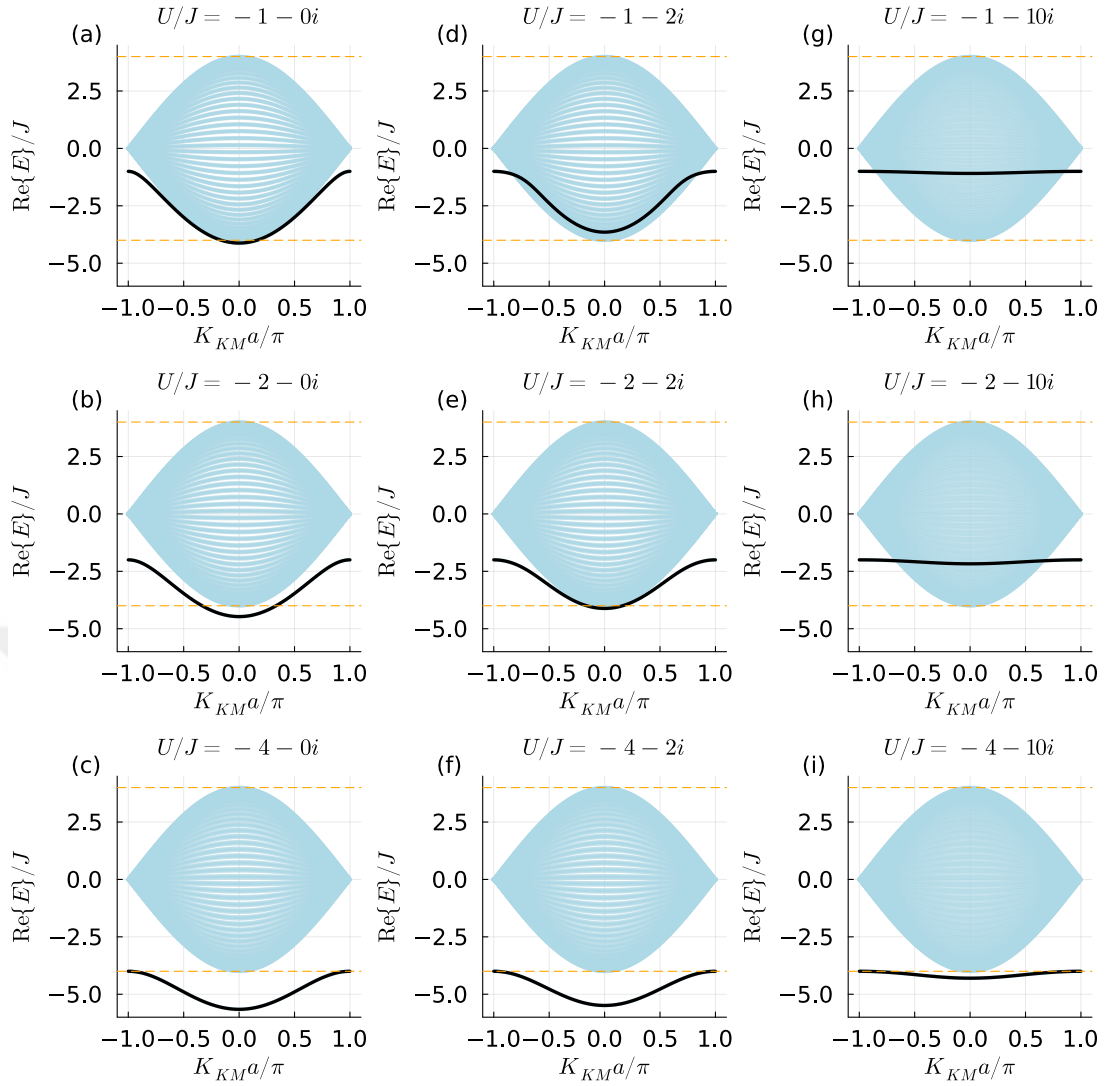
Şekil 2.9 : Kompleks etkileşim olduğunda $K = 0$ durumuna ait enerjilerin; (a) reel ve (b) imajiner kısımları.

Şimdi tüm K 'lar için, $U = U_0 + i\gamma$ şeklinde kompleks bir etkileşim göz önüne alırsak iki parçacıklı sistem enerjilerini kütle merkezi kuazimomentumuna göre şekil 2.10'daki gibi yeniden elde ederiz.

Şekil 2.10'da ilk düşey sütundaki grafikler (a-b-c), tek bant yaklaşımında kompleks etkileşim yokken ($\gamma = 0$), elde ettiğimiz grafiklerdir. Bu durumda noktasal ve çekici etkileşimler için, şekil 2.3-(a)'da gördüğümüz gibi, bağlı durumları banttan ayrılmış bir şekilde elde ederiz. Grafikteki koyu renkler, lokalize bağlı durumları; açık renkler ise saçılma durumlarını göstermektedir. Dikkat edilirse bağlı durumlar; sürekli bant içinde oluşabildiği için, her zaman en düşük enerjili durumlar değildir. Dolayısıyla bağlı durumları belirlemek için (koyu renkle renklendirmek için) en düşük enerjili durumları alırsak grafik yanlış olur. O yüzden her bir durumun katılım oranını (PR) hesapladıktan sonra, en yüksek PR değerine sahip durumları bağlı durumlar olarak belirleyip bu durumları koyu renkle işaretlemeliyiz. Bu durumda 2.10'deki grafikleri elde edebiliriz (Şekil A.22).

Etkileşimin şiddeti $|U_0|$ 'ı, yukarıdan aşağıya arttırdığımızda; parçacıkların daha sıkı bağlı duruma geçtiğini ve bağlı durum eğrisinin banttan uzaklaştığını görürüz.

Aynı grafiklerde, solda sağa, hermitsel olmayan parametreyi açtığımızda; bağlı durum eğrisinin, K 'ya göre varyasyonunun azalıp, düz bir bant halini aldığını görürüz. Ayrıca kompleks etkileşim terimi U 'nun reel kısmının, $|U_0| < 4$ olduğu durumda; bağlı durumların, belli bölgelerde bant yapısının içine girdiğini görürüz.

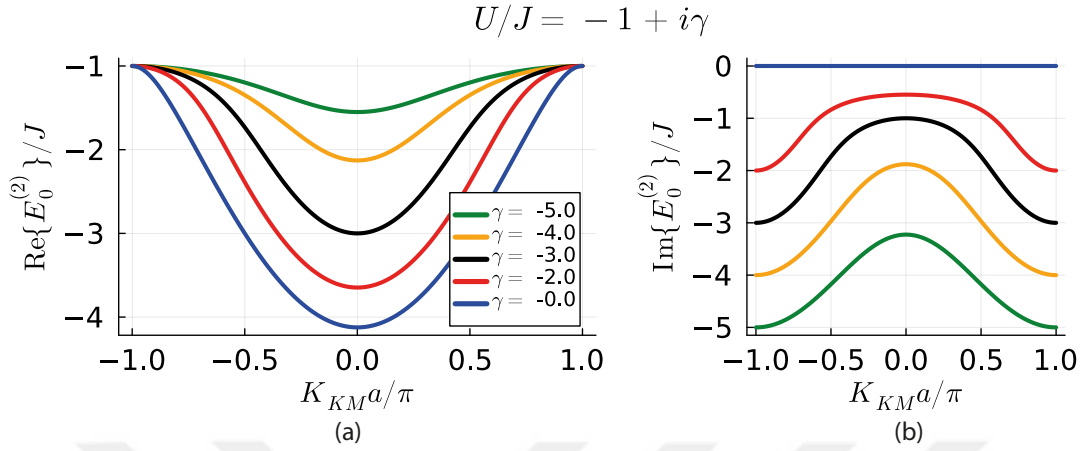


Şekil 2.10 : Kompleks etkileşim durumunda, farklı U Hubbard etkileşim sabiti ve farklı γ sönüm faktörleri için; iki parçacıklı sistem enerjilerinin, kütle merkezi kuazimomentumuna göre değişimi.

$K = -\pi$ ve $K = \pi$ noktalarındaki enerji değerleri, bağlı durum eğrisi üzerindeki maksimum enerji değerleridir ve sabittir. Bu değerler hiç bir zaman sürekli bölgeye girmez ve γ 'nın değişiminden etkilenmez.

$|U_0| > 4$ olduğunda ise eğri, sürekli bölgeye asla girmez. Örneğin üçüncü satırda (c-f-i), $U_0 = -4$ olduğunda, γ sonsuza gittiğinde bile, eğri düz bir çizgi haline gelir ve sürekli bölgeye girmez. Sürekli ortamdaki bağlı durumlar (Bound states in the continuum-BIC), yoğun madde fiziğindeki önemli etkileri nedeniyle, dikkate değer fenomenlerdir.

Şimdi etkin kütle ve parçacık ömrünü yorumlamak için bağlı durumların reel ve imajiner kısımlarının K 'ya bağlı grafiklerini ayrı ayrı çizelim. Farklı γ değerleri için bu grafikleri şekil 2.11'deki gibi elde ederiz (şekil A.25).



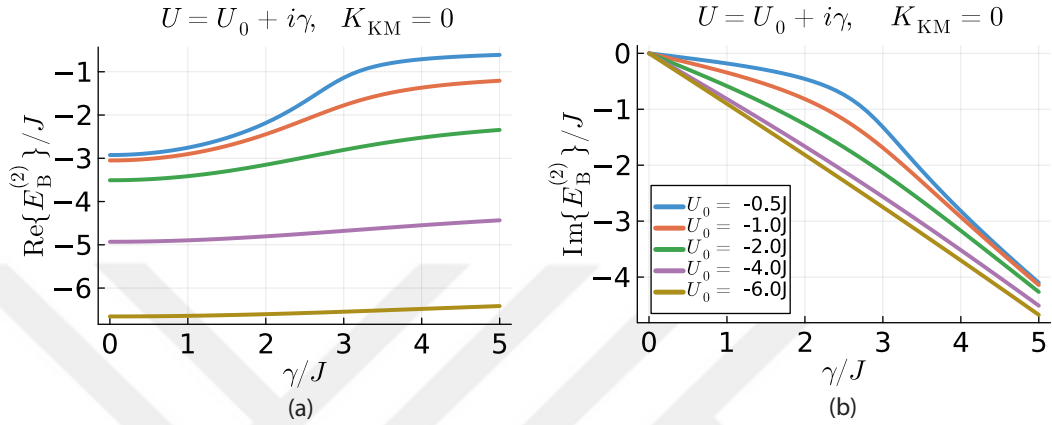
Şekil 2.11 : Bağlı durum enerjilerinin reel ve imajiner kısımlarının kütle merkezi momentumu, K_{KM} ile değişimi: Farklı renkteki eğriler etkileşim parametresinin sanal kısmının (γ) farklı değerleri içindir.

Şekil 2.11-(a)'daki enerjinin reel kısmına ait grafikte, en alttaki mavi eğri; kompleks etkilerin olmadığı durumda, şekil 2.3-(a)'da elde ettiğimiz grafikdir. Kompleks etkileşim parametresi γ 'yı eklediğimizde, grafikte yukarı doğru çıkan diğer eğrileri elde ederiz. Görüldüğü gibi, eğriler yukarı doğru çıktıkça, bağlanma enerjisi düzgün bir şekilde azalmaktadır. Buradan, kompleks etkileşim parametresi $|\gamma|$ 'nın artışının, bağlanma enerjisini monotonik bir şekilde azalttığını söyleyebiliriz. Küçük γ değerleri de dahil olmak üzere, pek çok farklı γ için hesabı tekrarladığımızda nonmonotonik bir etki gözlemlenemedik.

Şekil 2.11-(b)'de gördüğümüz, enerjinin imajiner kısmına ait grafik ise bize bozunma oranını (decay rate) verir. $\gamma = 0$ iken (en üstteki mavi yatay doğru), bozunma oranı sıfır olup parçacıkların ömrü sonsuzdur. Aşağıdaki grafiklere doğru indikçe, $|\gamma|$ parametresi arttığından bozunma hızı artar, parçacıkların ömrü azalır. Ayrıca herhangi bir eğriyi göz önüne aldığımızda, $K = 0$ durumu için parçacık ömrünün her zaman en fazla olduğunu görürüz.

Tek bant yaklaşımında örgü potansiyelinin şeklini ve derinliğini, U parametresi ile belirliyoruz. O yüzden örgünün etkisini görmek için; herhangi bir K durumunun γ 'ya bağlı grafiğini, farklı U 'lar için çizdirmemiz gerekir (Şekil 2.12).

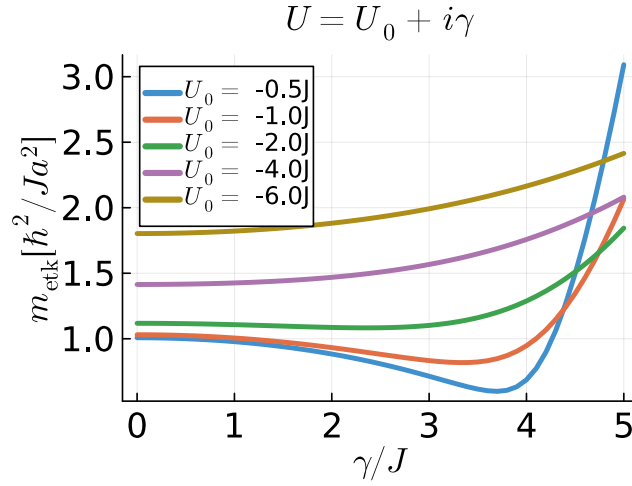
U_0 'ın artışının, bağlanma enerjisini arttırdığını şekil (2.10)'da görmüştük. Aynı şekilde, 2.12'deki grafiklerde de aynı sonucu görebiliriz. $|\gamma|$ 'nın artışının; beklendiği gibi bağlanma enerjisini azaltırken, sönüm oranını arttırdığı yani parçacık ömrünü azalttığını, gene aynı grafikte görebiliriz. Fakat ilginç bir şekilde, sabit bir γ değeri için (örneğin şekil 2.12'deki grafiklerde $\gamma = 3$ için düşey bir çizgi hayal edersek), $|U_0|$ arttığında; bağlanma enerjisi artarken, sönüm oranı da artmaktadır.



Şekil 2.12 : Toplam momentumu sıfır olan ($K_{KM} = 0$) bağlı durumların enerjilerinin etkileşim parametresinin sanal kısmı, γ , ile değişimi. Farklı eğriler etkileşim parametresinin reel kısmının (U_0) farklı değerleri içindir.

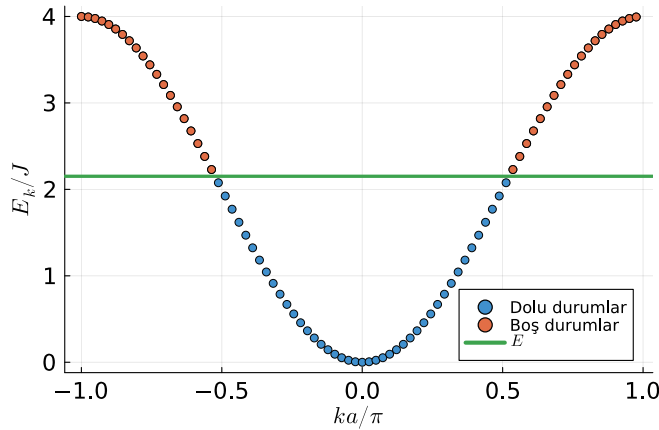
$K = 0$ durumuna ait etkin kütleli yorumlamak için, şekil 2.11-(a)'daki, enerjinin reel kısmına ait grafiklerin eğriliğine bakalım. $K = 0$ durumu için, alttaki mavi eğriden yukarı doğru çıktıkça, kabaca grafiklerin eğriliklerinin azaldığını görürüz. Fakat bu görüntü yanıltıcıdır. (2.57) denklemi yardımıyla, her bir γ durumu için etkin kütleli hesapladığımızda, şekil 2.13'deki grafiği elde ederiz (Şekil A.24).

Şekil 2.13'de Gördüğümüz gibi etkin kütleli artış her zaman monotonik değildir. Grafikte, $U_0 = -1$ ve $U_0 = -0.5$ için belirgin bir minimum noktası görülmektedir. $U_0 = -4$ değerinde ise bu minimum değer kaybolmaktadır. Yüksek γ değerlerinde ise, örneğin şekil 2.10'da üçüncü sütunda gördüğümüz bağlı durumların düz bant çıktığı durumlarda, bağlı durumların sürekli bölgenin içinde ya da dışında olması fark etmeksizin, γ arttıkça etkin kütle artmaktadır.



Şekil 2.13 : Toplam momentumu sıfır olan ($K_{KM} = 0$) bağlı durumların etkin kütlelerinin etkileşim parametresinin sanal kısmı, γ , ile değişimi. Farklı eğriler etkileşim parametresinin reel kısmının (U_0) farklı değerleri içindir.

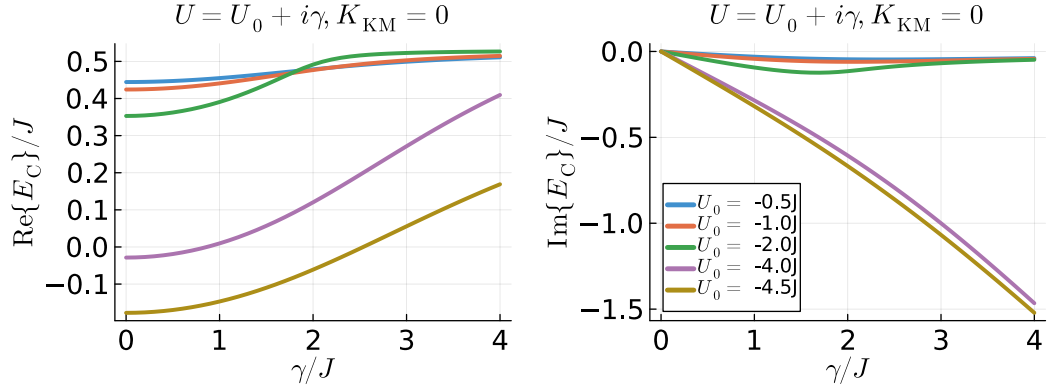
Şimdi kompleks etkileşimin, Cooper çiftine olan etkisine bakalım (Şekil A.26). Şekil 2.14'deki yeşil yatay çizgi; Fermi enerjisini göstermektedir. Bu seviyenin altındaki mavi rekle gösterilen tüm durumlar doludur ve donmuştur. Etkileşim sonucu, bu bölgedeki kuantum durumlarında bir değişiklik olmaz. Yani buradaki parçacıklar, saçılma sonucu; kırmızı renkle gösterilen üst enerjili durumlara geçemez. Aynı şekilde üstteki parçacıklar da saçılma sonucu, Fermi seviyesinin altındaki durumlara giremez.



Şekil 2.14 : Yarı dolu bant için Fermi seviyesi.

Fermi yüzeyi içinde seçtiğimiz durumlar bloke olduğunda, sadece Fermi enerjisinden daha yüksek enerjili parçacıklar etkileştiğinde; enerjinin reel ve imajiner kısımlarının γ 'ya bağlı grafiklerini şekil 2.15'deki gibi elde ederiz (Şekil A.27).

Grafiklerde, γ 'ya bağılı nonmonotonik değişimlerin yanı sıra, oluşan Cooper çiftinin bağlanma enerjisinin düştüğünü görebiliriz.



Şekil 2.15 : Yarı dolu bant ($E_F = 2J$) için toplam momentumu sıfır olan ($K_{KM} = 0$) Cooper çifti enerjilerinin etkileşim parametresinin sanal kısmı, γ , ile değişimi. Farklı eğriler etkileşim parametresinin reel kısmının (U_0) farklı değerleri içindir.



3. SONUÇ

Bu tezde, bir boyutlu periyodik potansiyel altındaki iki parçacık probleminde; etkileşimin, kayıplara sebep olduğu durumu ele aldık. Tek bant yaklaşımını kullanarak; bağlı durumları, bozunma hızına göre inceledik. Fermi denizinin varlığındaki Cooper problemi için; bağlanma enerjilerini ve bozunma hızını, kompleks etkileşim parametresinin fonksiyonu olarak hesapladık.

Sayısal hesaplamalarda, Hamiltoniyen matrisini köşegenleştirilerek, enerji özdeğerlerini ve özvektörleri bulduk.

Kayıp yokken, etkileşim şiddeti $|U_0|$ arttığında; lokalize durumların, daha sıkı bağlı duruma geçtiğini ve bağlı durum eğrisinin, sürekli banttan uzaklaştığını gördük.

Kompleks etkileşim parametresi $|\gamma|$ arttığında; bağlı durum eğrisinin, K 'ya göre varyasyonunun azalıp, düz bir çizgi halinde düz bant yapısına geldiğini gördük. Kompleks etkileşim sabiti U 'nun reel kısmının, $|U_0| < 4J$ olduğu durumda; bağlı durumların, belirli bölgelerde, sürekli bant yapısı içinde oluştuğunu gördük. Hermitsel olmayan sistemlerde, bu şekilde sürekli durumlarla birlikte ortaya çıkan bağlı durumlar (BIC), ilginç bir olay olup son yıllarda araştırılmaktadır.

Kompleks etkileşim parametresi $|\gamma|$ arttığında; bağlanma enerjisinin monotonik bir şekilde azaldığını, bozunma hızının arttığını ve parçacık ömrünün azaldığını gördük. Herhangi bir γ değeri için, kütle merkezi momentumu $K = 0$ durumunun, bağlanma enerjisinin en büyük ve parçacık ömrünün en fazla olduğunu gördük. Farklı γ değerleri için hesabı tekrarladığımızda; tek bant yaklaşımı için, bağlanma enerjisinin değişiminde, nonmonotonik bir etki görmedik. Çok parçacık sisteminde ortalama alan teorisi kullanılarak, nonmonotonik etkilerin ortaya çıkışı araştırılabilir.

Yüksek γ değerlerinde, yani bağlı durumların düz bant çıktığı durumlarda, γ arttıkça etkin kütle arttığını; $|U_0| < 4J$ olan durumlarda ise etkin kütle önce azalarak minimum değer aldığını, daha sonra arttığını gördük.

Birden fazla bant etkileri; birinci bölümde anlatılan, bant yapısına ilişkin kavramlar kullanılarak, geliştirilebilir.

Cooper probleminden yola çıkarak, örgü içindeki etkileşim kaynaklı kayıpların, süperakışkan fazın özelliklerine olan etkisi incelenebilir.



KAYNAKLAR

- [1] **Brody, D.C.** (2013). Biorthogonal quantum mechanics, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 47(3), 035305, <http://dx.doi.org/10.1088/1751-8113/47/3/035305>.
- [2] **Büchler, H.P.** (2010). Microscopic Derivation of Hubbard Parameters for Cold Atomic Gases, *Physical Review Letters*, 104(9), <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.104.090402>.
- [3] **Denschlag, J.H. ve Daley, A.J.** (2006). *Exotic atom pairs: Repulsively bound states in an optical lattice*, <https://arxiv.org/abs/cond-mat/0610393>, cond-mat/0610393.
- [4] **Martikainen, J.P.** (2008). *Cooper problem in a lattice*, <http://arxiv.org/abs/0808.0646>, arXiv:0808.0646 [cond-mat].
- [5] **Nguyen, J.P. ve Flach, S.** (2009). *Fermionic bound states on a one-dimensional lattice*, <https://arxiv.org/abs/0905.1255>, 0905.1255.
- [6] **Piil, R.T., Nygaard, N. ve Molmer, K.** (2008). Scattering and binding of different atomic species in a one-dimensional optical lattice, *Physical Review A*, 78(3), 033611, <http://arxiv.org/abs/0808.0120>, arXiv:0808.0120 [cond-mat].
- [7] **Valiente, M. ve Petrosyan, D.** (2008). Two-particle states in the Hubbard model, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 41(16), 161002, <http://arxiv.org/abs/0805.1812>, arXiv:0805.1812 [math-ph, physics:quant-ph].
- [8] **Watanabe, G., Dalfovo, F., Pitaevskii, L.P. ve Stringari, S.** (2011). Effects of periodic potentials on the critical velocity of superfluid Fermi gases in the BCS-BEC crossover, *Physical Review A*, 83(3), <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.83.033621>.
- [9] **Watanabe, G., Orso, G., Dalfovo, F., Pitaevskii, L.P. ve Stringari, S.** (2008). Equation of state and effective mass of the unitary Fermi gas in a one-dimensional periodic potential, *Physical Review A*, 78(6), <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.78.063619>.
- [10] **Watanabe, G. ve Pethick, C.J.** (2017). Superfluid Density of Neutrons in the Inner Crust of Neutron Stars: New Life for Pulsar Glitch Models, *Phys. Rev. Lett.*, 119, 062701, <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.119.062701>.

- [11] **Winkler, K., Thalhammer, G., Lang, F., Grimm, R., Hecker Denschlag, J., Daley, A.J., Kantian, A., Büchler, H.P. ve Zoller, P.** (2006). Repulsively bound atom pairs in an optical lattice, *Nature*, *441*(7095), 853–856, <http://dx.doi.org/10.1038/nature04918>.
- [12] **Yamamoto, K., Nakagawa, M., Adachi, K., Takasan, K., Ueda, M. ve Kawakami, N.** (2019). Theory of Non-Hermitian Fermionic Superfluidity with a Complex-Valued Interaction, *Physical Review Letters*, *123*(12), <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.123.123601>.
- [13] **Zelenayova, M. ve Bergholtz, E.J.** (2024). Non-Hermitian extended midgap states and bound states in the continuum, *Applied Physics Letters*, *124*(4), 041105, <https://doi.org/10.1063/5.0184935>.
- [14] **Zhang, J.M., Braak, D. ve Kollar, M.** (2012). Bound States in the Continuum Realized in the One-Dimensional Two-Particle Hubbard Model with an Impurity, *Physical Review Letters*, *109*(11), <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.109.116405>.

EKLER

EK A : Program Kodları

EK B : Gerçek Uzayda Çözüm Julia Program Kodları

EK C : Momentum Uzayında Çözüm Julia Program Kodları





EK A : Program Kodları

```
[12]: E0 = Ebands[:,0]

[21]: len(E0), np.prod(np.shape(Ebands))

[31]: (101, 2121)
```

Şekil A.1 : Her bantta $N_K = 101$ durum ve 21 adet bant seçildiğinde toplam $21 \times 101 = 2121$ durum olur.

```
[16]: Ebands[:,0]

[16]: array([ 2.39267661,  2.36562252,  2.28667649,  2.16176135,  1.99882021,
            1.80612413,  1.59117371,  1.36024269,  1.11834196,  0.86937794,
            0.61636441,  0.36162202,  0.10694355, -0.1462774 , -0.39694897,
           -0.64420825, -0.88736722, -1.12587244, -1.35927485, -1.58720715,
           -1.8093665 , -2.02550142, -2.23540163, -2.43889014, -2.63581713,
           -2.82605504, -3.00949469, -3.18604225, -3.35561666, -3.51814764,
           -3.67357404, -3.82184248, -3.96290624, -4.0967243 , -4.2232606 ,
           -4.34248337, -4.45436462, -4.55887964, -4.65600665, -4.74572643,
           -4.82802212, -4.90287888, -4.97028379, -5.0302256 , -5.08269466,
           -5.12768274, -5.16518297, -5.19518972, -5.21769858, -5.23270629,
           -5.24021068, -5.24021068, -5.23270629, -5.21769858, -5.19518972,
           -5.16518297, -5.12768274, -5.08269466, -5.0302256 , -4.97028379,
           -4.90287888, -4.82802212, -4.74572643, -4.65600665, -4.55887964,
           -4.45436462, -4.34248337, -4.2232606 , -4.0967243 , -3.96290624,
           -3.82184248, -3.67357404, -3.51814764, -3.35561666, -3.18604225,
           -3.00949469, -2.82605504, -2.63581713, -2.43889014, -2.23540163,
           -2.02550142, -1.8093665 , -1.58720715, -1.35927485, -1.12587244,
           -0.88736722, -0.64420825, -0.39694897, -0.1462774 ,  0.10694355,
            0.36162202,  0.61636441,  0.86937794,  1.11834196,  1.36024269,
            1.59117371,  1.80612413,  1.99882021,  2.16176135,  2.28667649,
            2.36562252])
```

Şekil A.2 : Birinci banttaki enerji değerleri.

```
[17]: E0 = Ebands[:,0]

[18]: max(E0), min(E0), max(E0)-min(E0)

[18]: (2.39267660790832, -5.240210680861267, 7.632887288769587)
```

Şekil A.3 : Birinci bandın genişliği.

```

# length unit is a: unit cell size
xmin = -50
xmax = 50
Nsteps = 40
L = xmax - xmin

b_position = PositionBasis(xmin, xmax, Nsteps)
xpoints = samplepoints(b_position)

x = position(b_position)
p = momentum(b_position)

m = 1

# half of wavevector of the periodic lattice wave vector
qB = pi

# strength of the sin^2(qB*x) periodic potential
s = 0.
sER = s*qB^2

potential = x -> sER*sin(qB*x)^2

```

Şekil A.4 : Gerçek uzayda baz kümesinin oluşturulması.

```

[5]: V = potentialoperator(b_position, potential)
      Hkin = p^2/(2*m)
      H = Hkin + dense(V)

[6]: Operator(dim=404x404)
      basis: Position(xmin=-50, xmax=50, N=404)
      26.8483-3.542e-14im ... -16.3219+2.08833e-12im
      -16.3219+1.40993e-12im ... 4.08073-1.30124e-12im
      4.08073+8.663e-14im ... -1.81384+4.4709e-13im
      -1.81384+3.7051e-13im ... 1.02043-4.9283e-13im
      1.02043-1.5482e-13im ... -0.653193+2.4031e-13im
      -0.653193+2.3453e-13im ... 0.453707-2.5294e-13im
      0.453707-1.2942e-13im ... -0.333423+2.0875e-13im
      -0.333423+1.4663e-13im ... 0.255354-2.1602e-13im
      0.255354-1.5699e-13im ... -0.201831+1.7375e-13im
      -0.201831+1.3906e-13im ... 0.163545-1.365e-13im
      0.163545-1.0361e-13im ... -0.135219+7.636e-14im
      -0.135219+5.418e-14im ... 0.113674-5.926e-14im
      0.113674-4.233e-14im ... -0.0969072+9.59e-14im
      ...
      0.113674+5.471e-14im ... -0.135219-2.259e-14im
      -0.135219-1.5549e-13im ... 0.163545+9.376e-14im
      0.163545+9.689e-14im ... -0.201831-4.61e-14im
      -0.201831+1.0933e-13im ... 0.255354-1.7344e-13im
      0.255354-1.069e-14im ... -0.333423+2.479e-14im
      -0.333423-3.5894e-13im ... 0.453707+3.7792e-13im
      0.453707+3.5938e-13im ... -0.653193-2.8055e-13im
      -0.653193-1.561e-13im ... 1.02043+3.44e-15im
      1.02043+6.52e-15im ... -1.81384+2.7631e-13im

```

Şekil A.5 : Gerçek uzayda hamiltoniyen operatörünün oluşturulması ve öz durumlarının listelenmesi.

```
[26]: # orthonormality in k-x
      in1=0
      ik1=0
      in2=1
      ik2=ik1
      Cnk = Ubands[ik1,:,in1]
      Cnk2 = Ubands[ik2,:,in2]
      np.linalg.norm(Cnk), np.linalg.norm(Cnk2), np.conj(Cnk).dot(Cnk2)

[26]: (1.0, 1.0000000000000002, -2.220446049250313e-16)
```

Şekil A.6 : Bloch durumlarının ortonormalliği.

```
[7]: E, states = eigenstates((H + dagger(H))/2);

[8]: plot(1:Nsteps,E, ".")
```

Şekil A.7 : Gerçek uzayda enerji özdeğerlerinin çizdirilmesi.

```
[26]: # orthonormality in k-x
      in1=0
      ik1=0
      in2=1
      ik2=ik1
      Cnk = Ubands[ik1,:,in1]
      Cnk2 = Ubands[ik2,:,in2]
      np.linalg.norm(Cnk), np.linalg.norm(Cnk2), np.conj(Cnk).dot(Cnk2)

[26]: (1.0, 1.0000000000000002, -2.220446049250313e-16)
```

Şekil A.8 : Bloch durumlarının ortonormalliği.

$|n_1, k_1\rangle \otimes |n_2, k_2\rangle$

```
[61]: Bloch_states = np.array( list( itertools.product(np.arange(dB),np.arange(Nkz)) ) )

      Bloch_2states = np.array( list( itertools.product( Bloch_states, Bloch_states ) ) )
      len(Bloch_states), len(Bloch_2states)

[61]: (24, 576)

[62]: Bloch_states[8]

[62]: array([1, 0])

[63]: # state index from quantum numbers
      ni = 1
      ik = 4

      ind = ni*Nkz+ik
      ind, Bloch_states[ind], ni, ik

[63]: (12, array([1, 4]), 1, 4)
```

Şekil A.9 : Bloch durumları listesi.

```
[7]: E, states = eigenstates((H + dagger(H))/2);
[8]: plot(1:Nsteps,E, ".")
```

Şekil A.10 : Gerçek uzayda enerji özdeğerlerinin çizdirilmesi.

```
[90]: ni1 = 1
      ik1 = 3
      ni2 = 2
      ik2 = 4

      ind1 = ni1*Nkz+ik1
      ind2 = ni2*Nkz+ik2

      ind_2 = ind1*len(Bloch_states)+ind2

      Bloch_2states[ind_2]
      ind_2, Bloch_2states[ind_2], np.array( [[ni1,ik1],[ni2,ik2]] )

[90]: (284,
      array([[1, 3],
            [2, 4]]),
      array([[1, 3],
            [2, 4]]))
```

Şekil A.11 : İki parçacık Bloch durumları.

```
non-zero matrix elements

[131]: k4 = np.array( list( itertools.product(kkz,kkz,-kkz,-kkz) ))

[132]: len( k4[np.sum(k4,axis=1)==0] ) / len(k4)

[132]: 0.083984375

[133]: np.sum( k4/np.pi, axis=1 )[:20]

[133]: array([ 0. , -0.25, -0.5 , -0.75, -1. , -1.25, -1.5 , -1.75, -0.25,
            -0.5 , -0.75, -1. , -1.25, -1.5 , -1.75, -2. , -0.5 , -0.75,
            -1. , -1.25])

[134]: k4sum_values = np.arange(-4,4+1,2)
      k4sum_values

[134]: array([-4, -2,  0,  2,  4])
```

Şekil A.12 : Sıfırdan farklı matris elemanları.

```
[172]: V121p2p=0
      for n4 in n4_list[2]:
          g1, g2, g1p, g2p = n4[-4:]
          V121p2p += np.conj(Ubands[ik1,g1,ni1])*np.conj(Ubands[ik2,g2,ni2])*Ubands[ikp1,g1p,nip1]*Ubands[ikp2,g2p,nip2]
      V121p2p

[172]: np.float64(-0.8208461781799515)
```

Şekil A.13 : Sıfırdan farklı matris elemanları (k uzayında).

```
[170]: (np.int64(18), np.int64(41))

[171]: Cnk1 = Ubands[ik1,:,ni1]
      Cnk2 = Ubands[ik2,:,ni2]
      unk1 = f_unk(xGL,Cnk1,Gnn)
      unk2 = f_unk(xGL,Cnk2,Gnn)
      Cnkp1 = Ubands[ikp1,:,nip1]
      Cnkp2 = Ubands[ikp2,:,nip2]
      unkp1 = f_unk(xGL,Cnkp1,Gnn)
      unkp2 = f_unk(xGL,Cnkp2,Gnn)
      nsum = nn[ni1]+nn[ni2]-nn[nip1]-nn[nip2]
      ksum = kkz[ik1]+kkz[ik2]-kkz[ikp1]-kkz[ikp2]
      if np.mod(ksum,2*np.pi) == 0:
          integrand = np.conj(unk1*unk2)*unkp1*unkp2*np.exp(1j*ksum*xGL)
          print(wGL.dot(integrand))

      (-0.8208461781799377+2.7722528095796195e-18j)
```

Şekil A.14 : Etkileşen iki durum arasındaki matris elemanı.

```
[6]: function fJK(K)
      return 2*J*cos(K/2)
      end

[6]: fJK (generic function with 1 method)

[626]: function fH2rel(K,U,brel)
      JK = fJK(K);
      H2rel = SparseOperator(brel)
      Nrel = brel.N
      for i in 1:Nrel-1
          H2rel += -JK*transition(brel,i+1,i)
      end
      # PBC
      H2rel += -JK*transition(brel,1,Nrel)
      #
      H2rel += H2rel'
      i0 = Integer((Nrel+1)//2)+3
      H2rel += U*transition(brel,i0,i0)
      return H2rel
      end
```

Şekil A.15 : Valiente ve Petrosyan (1.yöntem).

(Bloch basis) k-space

```
[131]: xmin = -R1
      xmax = R1
      b_position = PositionBasis(xmin, xmax, N1)
      b_momentum = MomentumBasis(b_position)

      x_op = position(b_position)
      p_op = momentum(b_position);
```

```
[132]: xpoints = samplepoints(b_position);
      kpoints = samplepoints(b_momentum);
      dk = spacing(b_momentum)
```

```
[132]: 0.6283185307179586
```

```
[133]: xpoints
```

```
[133]: 10-element Vector{Float64}:
      -5.0
      -4.0
      -3.0
      -2.0
      -1.0
       0.0
       1.0
       2.0
       3.0
       4.0
```

```
[135]: kpoints/pi
```

```
[135]: 10-element Vector{Float64}:
      -1.0
      -0.8
      -0.6
      -0.4
      -0.2
       0.0
       0.2
       0.4
       0.6
       0.8
```

Şekil A.16 : Bloch bazı k değerleri.

```

#for nksum in N1half+2:N1+1
for nksum in 2:N1+1
    # @show nksum
    ik2_list=[]
    for ik in 1:Integer(floor(nksum/2))
        push!(ik2_list,(ik,nksum-ik))
    end
    for ik in 1:N1half-Integer(ceil(nksum/2))+1
        push!(ik2_list,(ik+nksum-1,N1-ik+1))
        #push!(ik2_list,(mod(N1+ik-2,N1+1),mod(nksum-ik+1,N1+1)+1))
    end
    @show ik2_list
    push!(KCM_values,kpoints[1]+kpoints[nksum-1])
    push!(K2sub_list,ik2_list)
end

ik2_list = Any[(1, 1), (2, 10), (3, 9), (4, 8), (5, 7), (6, 6)]
ik2_list = Any[(1, 2), (3, 10), (4, 9), (5, 8), (6, 7)]
ik2_list = Any[(1, 3), (2, 2), (4, 10), (5, 9), (6, 8), (7, 7)]
ik2_list = Any[(1, 4), (2, 3), (5, 10), (6, 9), (7, 8)]
ik2_list = Any[(1, 5), (2, 4), (3, 3), (6, 10), (7, 9), (8, 8)]
ik2_list = Any[(1, 6), (2, 5), (3, 4), (7, 10), (8, 9)]
ik2_list = Any[(1, 7), (2, 6), (3, 5), (4, 4), (8, 10), (9, 9)]
ik2_list = Any[(1, 8), (2, 7), (3, 6), (4, 5), (9, 10)]
ik2_list = Any[(1, 9), (2, 8), (3, 7), (4, 6), (5, 5), (10, 10)]
ik2_list = Any[(1, 10), (2, 9), (3, 8), (4, 7), (5, 6)]

```

Şekil A.17 : K'ya göre gruplanmış durumlar.

```

[175]: resE2U2 = []
for (ik, KCM) in enumerate(KCM_values)
    dH = length(K2sub_list[ik])
    HK2 = zeros(dH,dH)
    # diagonal elements
    for (i,(ik1,ik2)) in enumerate(K2sub_list[ik])
        k1 = kpoints[ik1]
        k2 = kpoints[ik2]
        #HK2[i,i] = -2*J*(cos(k1)+cos(k2)) + U/N1
        HK2[i,i] = -2*J*(cos(k1)+cos(k2)) - 0*U/N1
    end
    # off-diagonal elements
    if dH>1
        #HK2 .+= 2*U/N1*(ones(dH,dH)-diagm(repeat([1],dH)))
        HK2 .+= 2*U/N1*ones(dH,dH)
    end
    push!(resE2U2, eigen(HK2))
end

```

Şekil A.18 : Tek bant yaklaşımında E-K grafiği (İkinci yöntem).

```
[69]: ishermitian(H2K)
```

```
[69]: true
```

Şekil A.19 : Hermitsel hamiltoniyen.

```
Complex interaction
[70]: UR = U
      UI = U/10
      UC = UR + 1j*UI
      H2K = rH2rel(K,UC,brel)
[70]: Operator(dim=11x11)
      basis: MLevel(N=11)sparse([2, 11, 1, 3, 2, 4, 3, 5, 4, 6, - 8, 7, 0, 8, 9, 10, 9, 11, 1, 10], [1, 1, 2, 2, 3, 3, 4, 4, 5, 5, - 7, 8, 8, 9, 9, 9, 10, 10, 11, 11], ComplexF64[-1.2
e-16 + 0.0im, -1.2e-16 + 0.0im, -1.2e-16 + 0.0im, -1.2e-16 + 0.0im, -1.2e-16 + 0.0im, -1.2e-16 + 0.0im, -1.2e-16 + 0.0im, -1.2e-16 + 0.0im, -1.2e-16 + 0.0im, -1.2e-16 + 0.0im, -
1.2e-16 + 0.0im, -1.2e-16 + 0.0im, -1.2e-16 + 0.0im, -5.0 - 0.5im, -1.2e-16 + 0.0im, -1.2e-16 + 0.0im, -1.2e-16 + 0.0im, -1.2e-16 + 0.0im, -1.2e-16 + 0.0im, 11, 1
1])
[71]: ishermitian(H2K)
[71]: false
```

Şekil A.20 : Hermitsel olmayan hamiltoniyen.

```
[85]: E2C, U2C = eigen(dense(H2K).data)
```

```
[85]: Eigen{ComplexF64, ComplexF64, Matrix{ComplexF64}, Vector{ComplexF64}}
      values:
```

```
11-element Vector{ComplexF64}:
```

```
-6.395586903944114 - 0.39084795387730664im
-3.7823526051424143 - 0.006559960343473493im
-3.3650141313247195 - 6.292803136600501e-17im
-2.28832589523924 - 0.028933275619595078im
-1.6616600520075449 + 6.950652929398098e-17im
-0.08269920677149173 - 0.035429561953416316im
0.5692593530931408 - 4.631696153059408e-17im
2.0474086282474 - 0.02765122379034774im
2.619442935781141 + 4.8531446623206047e-17im
3.5015559828498475 - 0.010578024415860542im
3.8379718944579824 + 4.018578170612977e-17im
```

```
vectors:
```

```
11x11 Matrix{ComplexF64}:
```

```
0.0370173-0.00890228im ... -0.322253-2.77556e-17im
0.0131042-0.00436547im ... 0.387868+2.77556e-17im
0.00574044-0.00249673im ... -0.422061-8.32667e-17im
0.00574044-0.00249673im ... 0.422061+0.0im
0.0131042-0.00436547im ... -0.387868-6.93889e-17im
0.0370173-0.00890228im ... 0.322253-1.38778e-17im
0.107009-0.0168681im ... -0.23053-1.04083e-16im
0.308472-0.0241263im ... 0.120131+0.0im
0.884136+0.0im ... 4.15806e-16-7.76378e-17im
0.308472-0.0241263im ... -0.120131-6.93889e-17im
0.107009-0.0168681im ... -0.23053-1.04083e-16im
```

Şekil A.21 : Kompleks hamiltoniyenin özdeğerleri.

```
[14]: function calc_plot_spectrum(U)
      plt=scatter(ylims=[-6,4.5], xlabel=L"$K_{CM}a/\pi$", ylabel=L"$\mathrm{Re}\{E\}/J$");
      plot!(size=(600,400))

      E2Ks = []
      EBs = []
      for KCM in Klist
          H2K = fH2rel(KCM,J,U,brel)
          E2K, U2K = eigen( dense(H2K).data )
          PR = []
          #for psi in U2K
          #    push!(PR, sum( 1/abs.(psi.data).^4/Nrel ) )
          #end
          for ipsi in 1:length(E2K)
              push!(PR, sum( 1/abs.(U2K[:,ipsi]).^4/Nrel ) )
          end
          #scatter!(repeat([KCM/pi], Nrel), real(E2K), zcolor=PR,
          #    markersize=2, markerstrokewidth=0, markeralpha=1, c=:oslo, label="");
          scatter!(repeat([KCM/pi], Nrel), real(E2K),
              markersize=2, markerstrokewidth=0, markeralpha=.25, c=:lightblue, label="");
          #scatter!(repeat([KCM/pi], Nrel), real(E2K), c=:oslo, label="");
          idx = sortperm(PR)
          push!(EBs,E2K[idx][1])
          push!(E2Ks,E2K)
      end
      #annotate!([.6, 3*J, (L"$U=\$(real(U))-i\$(imag(U))", 12, :left )
      # i = 1 latexstring("\omega_{\{i\}}") # L"$\omega_{1}$"
      UR = real(U)
      UI = imag(U)
      #plot!(Klist/pi,real(EBs),c=:black, lw=3, label="",
      #    title = latexstring("\$U/J=\$(Int(UR))-\$(Int(-UI))\$,i\$")
      plot!(Klist/pi,real(EBs),c=:black, lw=3, label=""), title = L"U/J=\$(Int(UR))-\$(Int(-UI)) i"
      #annotate!([.45, 3.5*J, (latexstring("\$U=\$(UR)-\$(UI)\$,i\$"), 10, :left )
      hline!(xlims=[-1.1,1.1],[4*J], linestyle=:dash, c=:orange, label="")
      hline!(xlims=[-1.1,1.1],[-4*J], linestyle=:dash, c=:orange, label="")
      #hline!([U], linestyle=:dash, c=:grey, label="")
      #hline!([-sqrt(U^2+4*(2*J)^2)], linestyle=:dash, c=:grey, label="")
      meff = 1/derivative2(Klist, real(EBs), trunc(Int, length(Klist)/2+1))
      return plt, meff
end

[14]: calc_plot_spectrum (generic function with 1 method)
```

Şekil A.22 : PR hesabıyla bağlı durumların tespiti.

```
• [114... # expectation value of r^2: <r^2>
sum( (xpoints.^2).*abs.(U2K[1].data).^2)

[114]: 0.32154516000236616
```

Şekil A.23 : Bağ uzunluğu hesabı.

```
[45]: gs = collect(0:0.1:5)
      U0s = [-0.5, -1, -2, -4, -6]
      meffU0s=[]
      for U0 in U0s
          meffs = []
          for U in [U0-lim*g for g in gs ]
              plt, meff = calc_plot_spectrum(U)
              push!(meffs,meff)
          end
          push!(meffU0s,meffs)
      end

[46]: fig4 = scatter(xlabel=L"$\gamma/J$", ylabel=L"$m_{\mathrm{eff}} [ \hbar^2/J a^2 ] ", title=L
      for (iU, U0) in enumerate(U0s)
          #scatter!(gs,meffU0s[iU],label=L"$U_0 =\$ \$(U0)J")
          plot!(gs,meffU0s[iU],lw=3, label=L"$U_0 =\$ \$(U0)J")
      end
      fig4
```

Şekil A.24 : Etkin kütle hesabı.

```

[31]: plt=scatter()
      for ip in 1:length(Ulist)
      M = stack( resU[ip] )
      M = M[i, sortperm(real(M[1, :]))]

      #scatter!(real(M[1,:]), real(M[2,:]), c=cols[ip], label=latexstring("gamma")+string(imag(Ulist[ip])), xlabel="K_{CM}", ylabel="Real(E_b)")
      plot!(real(M[1,:]), real(M[2,:]), c=cols[ip], label=L"\gamma \rightarrow s \gamma(imag(Ulist[ip]))", fonts=24,
            xlabel=L"$K_{CM}$", ylabel=L"\mathrm{Re}\{E_{\mathrm{b}}\}/J", title=L"$U/J=-2+i\gamma$")
      plot!(real(M[1,:]), real(M[2,:]), c=cols[ip], label="")

      end

[32]: plt2=scatter()

      for ip in 1:length(Ulist)

      M = stack( resU[ip] )
      M = M[i, sortperm(real(M[1, :]))]

      plot!(real(M[1,:]), imag(M[2,:]), c=cols[ip], xlabel=L"$K_{CM}$", fonts=24,
            ylabel=L"\mathrm{Im}\{E_{\mathrm{b}}\}/J", label="")
      plot!(real(M[1,:]), imag(M[2,:]), c=cols[ip], label="")

      end

[33]: fig1 = plot(plt,plt2, layout=grid(1,2, widths=(0.6,0.4)), size=(600,300), margin=5Plots.mm)

```

Şekil A.25 : Kompleks etkileşimde E-K grafiği.

```

[1561... eF = feq(kF,J)
figF = scatter(xlabel=L"$k/\pi$", ylabel=L"$E_k$")
scatter!(kpoints/pi, feq.(kpoints,J), label="Dolu durumlar")
scatter!( kpoints[abs.(kpoints).>=kF]/pi, feq.(kpoints[abs.(kpoints).>=kF],J), label="Boş durumlar" )
hline!(eF, label=L"$E_{\mathrm{F}}$")
savefig("figs/fermi_seviyesi.pdf")
savefig("figs/fermi_seviyesi.png")
figF

```

Şekil A.26 : Cooper problemi.

```

[1627... gs = collect(0:0.1:10)
U0s = [-0.5, -1, -2, -4, -4.5]
ECs=[]
for U0 in U0s
    EC = []
    for U in [U0-1im*g for g in gs ]
        K2sub=K2sub_list[1]
        HK2 = HCM(K2sub,J,U,N1)
        E2, U2 = eigen(HK2)
        Eval = E2[1] #[ sortperm( imag(E2)) ][1]
        push!(EC, Eval)
    end
    push!(ECs,EC)
end

[1628... figCR = scatter(xlabel=L"$\gamma/J$", ylabel=L"\mathrm{Re}\{E\}/J", title=L"$U = U_0 + i \gamma$")

[1629... figCI = scatter(xlabel=L"$\gamma/J$", ylabel=L"\mathrm{Im}\{E\}/J", title=L"$U = U_0 + i \gamma$")
for (iU, EC) in enumerate(ECs)
    #scatter!(gs, meffU0s[iU], label=L"$U_0 = \$ \$(U0)J$")
    plot!(gs, imag(EC), lw=3, label=L"$U_0 = \$ \$(U0s[iU])J$")
end
figCI

```

Şekil A.27 : Cooper probleminde enerjilerin sönüm oranına göre değişimi.

EK B : Gerçek Uzayda Çözüm Julia Program Kodları



```

1  using QuantumOptics, Plots, LinearAlgebra, LaTeXStrings
2
3  # second derivative on a grid
4  function derivative2(x, y, i)
5      Nx = length(x)
6      @assert Nx >= 5
7      dx = x[2] - x[1]
8      if i == 1
9          dy = 35*y[i] - 104*y[i + 1] + 114*y[i+2] - 56*y[i+3] +
10             11*y[i+4]
11      elseif i == 2
12          dy = 11*y[i-1] - 20*y[i] + 6*y[i+1] + 4*y[i+2] - y[i+3]
13      elseif i == Nx-1
14          dy = -y[i-3] + 4*y[i-2] + 6*y[i-1] - 20*y[i] + 11*y[i
15             +1]
16      elseif i == Nx
17          dy = 11*y[i-4] - 56*y[i-3] + 114*y[i-2] - 104*y[i-1] +
18             35*y[i]
19      else
20          dy = -y[i-2] + 16*y[i-1] - 30*y[i] + 16*y[i+1] - y[i
21             +2]
22      end
23      dy = dy / (12 * dx^2)
24      return dy
25  end
26
27  x = range(-10, 10, length=101)
28  y = @. x.^2
29
30  dy = [derivative2(x, y, i) for i=1:length(x)]
31
32  @assert isapprox(dy, 2*ones(length(x)))
33
34  # pair CM of mass quasi-momentum in Valiente and Petrosyan
35  # this is Ekα in Matikainen
36  function fJK(K,J)
37      return 2*J*cos(K/2)
38  end

```

Şekil B.1 : Gerçek uzay kod 1.

```

36 # two-particle Hamiltonian, b1 is the real space relative
    coordinate basis
37 function fh2rel(K,J,U,b1)
38     JK = fJK(K,J);
39     H2rel = SparseOperator(b1)
40     N1 = b1.N
41     #println(Nrel)
42     for i in 1:Nrel-1
43         H2rel += -JK*transition(b1,i+1,i)
44     end
45     # PBC
46     H2rel += -JK*transition(b1,1,N1)
47     #
48     H2rel += H2rel'
49     # interaction
50     i0 = Integer((N1)//2)+1
51     #i0 = 3
52     H2rel += U*transition(b1,i0,i0)
53     return H2rel
54 end
55
56 R1 = 21
57 xpoints = collect(-R1:1:R1-1);
58 N1 = 2*R1;
59 b1 = NLevelBasis(N1);
60 xpoints, b1
61
62 KCM = 0*pi;
63 J = 1;
64 U = -1-1im*2.
65
66 H2K = fh2rel(KCM,J,U,b1)
67
68 E2K, U2K = eigen( dense(H2K).data );
69 E22K, V2K = eigen( dense(H2K').data );
70
71 abs.(U2K[:,1]).^2;
72
73 dK=2*pi/(2*N1)
74 Klist=collect(-pi:dK:pi+dK);
75 #Klist=collect(-3*dK:dK:3*dK+dK);
76
77 # calculate and plot energy spectrum
78 function calc_plot_spectrum(U, etiket="")
79
80     plt=scatter(ylims=[-6,4.5], xlabel=L"$K_{\text{KM}}a/\pi$",
81                 ylabel=L"$\mathrm{Re}\{E\}/J$");
81     plot!(size=(400,400),xtickfontsize=14,ytickfontsize=14,
82           xguidefontsize=14,yguidefontsize=14,legendfontsize=14)

```

Şekil B.2 : Gerçek uzay kod 2.

```

83     E2Ks = []
84     EBs = []
85     for KCM in Klist
86         H2K = fh2rel(KCM,J,U,b1)
87         E2K, U2K = eigen( dense(H2K).data )
88         PR = []
89         #for psi in U2K
90         #    push!(PR, sum( 1/abs.(psi.data).^4/N1 ) )
91         #end
92         for ipsi in 1:length(E2K)
93             push!(PR, sum( 1/abs.(U2K[:,ipsi]).^4/N1 ) )
94         end
95         #scatter!(repeat([KCM/pi], Nrel), real(E2K), zcolor=PR
96     ,
97         #    markersize=2, markerstrokewidth=0, markeralpha=1,
98         c=:oslo, label="");
99         scatter!(repeat([KCM/pi], Nrel), real(E2K),
100             markersize=2, markerstrokewidth=0, markeralpha=.5,
101             c=:lightblue, label="");
102         #scatter!(repeat([KCM/pi], Nrel), real(E2K), c=:oslo,
103         label="");
104         idx = sortperm(PR)
105         push!(EBs,E2K[idx][1])
106         push!(E2Ks,E2K)
107     end
108     # i = 1 latexstring("\$\omega_{$(i)}\$") # L"\omega_{1}$
109     "
110     UR, UI = real(U), imag(U)
111     annotate!(-1.5, 5*J, etiket, :left)
112     #annotate!(-.0, 5*J, (L"U/J=%$(Int(UR))-%$(Int(-UI)) i", :
113     center) )
114     #plot!(Klist/pi,real(EBs),c=:black, lw=3, label="",
115     #    title = latexstring("\$U/J={$(Int(UR))}-{$(Int(-UI))
116     }\$,i\$"))
117     plot!(Klist/pi,real(EBs),c=:black, lw=3, label="")#, title
118     = L"U/J=%$(Int(UR))-%$(Int(-UI)) i"
119     #annotate!(.45, 3.5*J, (latexstring("\$U={$(UR)}-{$( -UI)
120     }\$,i\$"), 10, :left) )
121     hline!(xlims=[-1.1,1.1],[4*J], linestyle=:dash, c=:orange,
122     label="")
123     hline!(xlims=[-1.1,1.1],[-4*J], linestyle=:dash, c=:orange
124     ,label="")
125     #hline!([U], linestyle=:dash, c=:grey, label="")
126     #hline!([-sqrt(U^2+4*(2*J)^2)], linestyle=:dash, c=:grey,
127     label="")
128     meff = 1/derivative2(Klist, real(EBs), trunc(Int, length(
129     Klist)/2+1))
130     return plt, meff, EBs[N1+2]
131 end
132

```

Şekil B.3 : Gerçek uzay kod 3.

```

120 plt, meff, EBs = calc_plot_spectrum(U, "(a)")
121 plt
122
123 J=1
124 resU = []
125 U0 = -1.
126 Ulist = [U0-1im*0, U0-1im*2, U0-1im*3, U0-1im*4, U0-1im*5]
127 for U in Ulist
128   res=[]
129   for (iK, KCM) in enumerate(Klist)
130     H2K = fH2rel(KCM,J,U,b1)
131     E2K, U2K = eigen( dense(H2K).data )
132     PR = []
133     #for psi in U2K
134     #   push!(PR, sum( 1/abs.(psi.data).^4/N1 ) )
135     #end
136     for ipsi in 1:length(E2K)
137       push!(PR, sum( 1/abs.(U2K[:,ipsi]).^4/N1 ) )
138     end
139     idx = sortperm(PR)
140     push!(res, [KCM,E2K[idx][1]])
141   end
142   push!(resU,res)
143 end
144
145 cols=:blue, :red, :black, :orange, :green;
146
147 plt=scatter(xtickfontsize=14,ytickfontsize=14,xguidefontsize
             =14,yguidefontsize=14,legendfontsize=10)
148
149 for ip in length(Ulist):-1:1
150   M = stack( resU[ip] )
151   #M = M[:, sortperm(real(M[1, :]))]
152
153   #annotate!(-1.45, -1., "(a)", :center)
154
155   #scatter!(real(M[1,:]), real(M[2,:]), c=cols[ip], label=
             latexstring("gamma")+string(imag(Ulist[ip])), xlabel="K_{
             CM}", ylabel="Real(E_b)")
156   plot!(real(M[1,:])./pi, real(M[2,:]), c=cols[ip], label=L"$\
             gamma = $ %$(imag(Ulist[ip]))", fonts=24, lw=3,
             xlabel=L"$K_{KM}a/\pi$", ylabel=L"\mathrm{Re}\{E^{(2)}\}
             -\mathrm{0}\}/J")
157
158   #plot!(real(M[1,:]), real(M[2,:]), c=cols[ip], label="")
159
160 end
161
162 plt2=scatter(xtickfontsize=14,ytickfontsize=14,xguidefontsize
             =14,yguidefontsize=14,legendfontsize=10)
163

```

Şekil B.4 : Gerçek uzay kod 4.

```

164 for ip in 1:length(Ulist)
165
166 M = stack( resU[ip] )
167 M = M[:, sortperm(real(M[1, :]))]
168
169 plot!(real(M[1,:])./pi, imag(M[2,:]), c=cols[ip], xlabel=L"$K_{\mathrm{a}}/\pi$", fonts=24, lw=3,
170        ylabel=L"$\mathrm{Im}\{E^{(2)}-\mathrm{0}\}/J$", label="")
171 #plot!(real(M[1,:]), imag(M[2,:]), c=cols[ip], label="")
172 #annotate!(-1.6, 0, "(b)", :center)
173
174
175 end
176
177 fig1 = plot(plt,plt2, layout=grid(1,2, widths=(0.6,0.4)), size
178           =(800,300), margin=5Plots.mm,
179           supitle=L"$U/J=-1+i\gamma$")
180
181 savefig(fig1,"figs/fig1.pdf")
182 savefig(fig1,"figs/fig1.png")
183
184 figs = []
185 etiketler=["(a)", "(d)", "(g)", "(b)", "(e)", "(h)", "(c)", "(f)", "(i)"]
186
187 for (iU,U) in enumerate([-1-1im*0., -1-1im*2., -1-1im*10.,
188                        -2-1im*0., -2-1im*2., -2-1im*10.,
189                        -4-1im*0., -4-1im*2., -4-1im*10.])
190     push!(figs, calc_plot_spectrum(U,etiketler[iU])[1])
191 end
192
193 fig3x3 = plot(figs..., layout=(3,3), size=(1000,1000))
194
195 savefig(fig3x3, "./figs/fig3x3.png")
196 savefig(fig3x3, "./figs/fig3x3.pdf")
197
198
199
200 gs = collect(0:0.1:5)
201 U0s = [-0.5, -1, -2, -4, -6]
202 meffU0s=[]
203 EBU0s=[]
204 for U0 in U0s
205     meffs = []
206     EBs = []
207     for U in [U0-1im*g for g in gs]
208         plt, meff, EB = calc_plot_spectrum(U)
209         push!(meffs,meff)

```

Şekil B.5 : Gerçek uzay kod 5.

```

210         push!(EBs,EB)
211     end
212     push!(meffU0s,meffs)
213     push!(EBU0s,EBs)
214 end
215
216 fig4 = scatter(xlabel=L"$\gamma/J$", ylabel=L"$m_{\mathrm{etk}} [\hbar^2/J a^2]$", title=L"$U = U_0 + i \gamma$",
217               xtickfontsize=14,ytickfontsize=14,
218               xguidefontsize=14,yguidefontsize=14,legendfontsize=10,size
219               =(400,300))
220 for (iU, U0) in enumerate(U0s)
221     #scatter!(gs,meffU0s[iU],label=L"$U_0 = $ %$(U0)J")
222     plot!(gs,meffU0s[iU],lw=3, label=L"$U_0 = $ %$(U0)J")
223 end
224 fig4
225
226 savefig(fig4, "./figs/fig4.png")
227 savefig(fig4, "./figs/fig4.pdf")
228
229 figCR = scatter(xlabel=L"$\gamma/J$", ylabel=L"$\mathrm{Re}\{E^{(2)}_{\mathrm{B}}\}/J$", title=L"$U = U_0 + i \gamma, K_{\mathrm{KM}}=0$",
230               xtickfontsize=14,ytickfontsize=14,
231               xguidefontsize=14,yguidefontsize=14,legendfontsize=10,
232               size=(400,300))
233 for (iU, U0) in enumerate(U0s)
234     plot!(gs,real(EBU0s[iU]),lw=3, label="", #, label=L"$U_0 = $ %$(U0s[iU])J")
235 end
236 figCR
237
238 figCI = scatter(xlabel=L"$\gamma/J$", ylabel=L"$\mathrm{Im}\{E^{(2)}_{\mathrm{B}}\}/J$", title=L"$U = U_0 + i \gamma, K_{\mathrm{KM}}=0$",
239               xtickfontsize=14,ytickfontsize=14,
240               xguidefontsize=14,yguidefontsize=14,legendfontsize=10,
241               legend=:bottomleft, size=(400,300))
242 for (iU, U0) in enumerate(U0s)
243     plot!(gs,imag(EBU0s[iU]),lw=3, label=L"$U_0 = $ %$(U0s[iU])J")
244 end
245 figCI
246
247 savefig(figCR,"figs/EB_real.pdf")
248 savefig(figCR,"figs/EB_real.png")
249 savefig(figCI,"figs/EB_imag.pdf")
250 savefig(figCI,"figs/EB_imag.png")

```

Şekil B.6 : Gerçek uzay kod 6.



EK C : Momentum Uzayında Çözüm Julia Program Kodları



```

1  using QuantumOptics, Plots, LinearAlgebra, LaTeXStrings
2
3  function derivative2(x, y, i)
4      Nx = length(x)
5      @assert Nx >= 5
6      dx = x[2] - x[1]
7      if i == 1
8          dy = 35*y[i] - 104*y[i + 1] + 114*y[i+2] - 56*y[i+3] +
10         11*y[i+4]
9      elseif i == 2
10         dy = 12*y[i-1] -20*y[i] + 6*y[i+1] + 4*y[i+2] - y[i+3]
11     elseif i == Nx-1
12         dy = -y[i-3] + 4*y[i-2] + 6*y[i-1] - 20*y[i] + 11*y[i
13         +1]
14     elseif i == Nx
15         dy = 11*y[i-4] - 56*y[i-3] + 114*y[i-2] - 104*y[i-1] +
16         35*y[i]
17     else
18         dy = -y[i-2] + 16*y[i-1] - 30*y[i] + 16*y[i+1] - y[i
19         +2]
20     end
21     dy = dy / (12 * dx^2)
22     return dy
23 end
24
25 x = range(-10, 10, length=101)
26 y = @. x.^2
27
28 dy = [derivative2(x, y, i) for i=1:length(x)]
29
30 @assert isapprox(dy, 2*ones(length(x)))
31
32 function fKCM(k1, k2)
33     return k1+k2
34 end
35
36 function fkrel(k1, k2)
37     return (k1-k2)/2
38 end
39
40 function feq(q,J)
41     return 2*J*(1-cos(q))
42 end
43
44 end

```

Şekil C.1 : Momentum uzayı kod 1.

```

41 J = 1
42 R1=21
43 xmin = -R1
44 xmax = R1
45 N1 = 2*R1
46 b_position = PositionBasis(xmin, xmax, N1)
47 b_momentum = MomentumBasis(b_position)
48
49 x_op = position(b_position)
50 p_op = momentum(b_position);
51
52 xpoints = samplepoints(b_position);
53 kpoints = samplepoints(b_momentum);
54 dk = spacing(b_momentum)
55
56 kF = kpoints[R1+2+1*Int(round(R1/2))] + 1e-6
57
58 eF = feq(kF,J) + 0.075
59 figF = scatter(xlabel=L"$k_a/\pi$", ylabel=L"$E_k$",
60               xtickfontsize=14,ytickfontsize=14,xguidefontsize=14,
61               yguidefontsize=14,legendfontsize=10)
62 scatter!(kpoints/pi, feq.(kpoints,J), label="Dolu durumlar")
63 scatter!( kpoints[abs.(kpoints).>=kF]/pi, feq.(kpoints[abs.(
64               kpoints).>=kF],J), label="$Bo durumlar" )
65 hline!([eF], label=L"$E_{\mathrm{F}}$", lw=3)
66 savefig("figs/fermi_seviyesi.pdf")
67 savefig("figs/fermi_seviyesi.png")
68 figF
69
70 kpoints[abs.(kpoints).>=kF]./pi
71
72 KCM_values = []
73 K2sub_list = []
74 N1half = Integer(ceil(N1/2))
75
76 #for nksum in N1half+2:N1+1
77 for nksum in 2:N1+1
78     # @show nksum
79     ik2_list=[]
80     for ik in 1:Integer(floor(nksum/2))
81         push!(ik2_list,(ik,nksum-ik))
82     end
83     for ik in 1:N1half-Integer(ceil(nksum/2))+1
84         push!(ik2_list,(ik+nksum-1,N1-ik+1))
85         #push!(ik2_list,(mod(N1+ik-2,N1+1),mod(nksum-ik+1,N1
86         +1)+1))
87     end
88     push!(KCM_values,pi*(mod(kpoints[1]/pi+kpoints[nksum-1]/pi
89     +1,2)-1))
90     push!(K2sub_list,ik2_list)

```

Şekil C.2 : Momentum uzayı kod 2.

```

87     #@show ik2_list, KCM_values[end]/pi
88 end
89
90 #M_KCM = fKCM.(kpoints,kpoints')
91 M_KCM = fKCM.(kpoints[abs.(kpoints).>=kF],kpoints[abs.(kpoints)
92     ].>=kF]')
93 Int_M_KCM = mod.(Int.(round.(M_KCM./pi*R1)), 2*R1)/ R1
94 #Int_M_KCM = mod.(M_KCM./pi, 2)
95 Int_KCM = unique( Int_M_KCM )
96 KCM_vals = Int_KCM.*pi;
97
98 ik_list = collect(1:N1)[abs.(kpoints).>=kF];
99
100 ik_list = collect(1:N1)[abs.(kpoints).>=kF]
101 Mik = Array{Any}(undef, length(ik_list), length(ik_list));
102 for (i1,ik1) in enumerate(ik_list)
103     for (i2,ik2) in enumerate(ik_list)
104         Mik[i1,i2] = sort( [ik1, ik2])
105     end end
106
107 unique( Mik[ findall( Int_M_KCM .== Int_KCM[1] ) ] )
108
109 K2sub_list = []
110 for iK in 1:length(KCM_vals)
111     K2sub = Tuple.( findall( Int_M_KCM .== Int_KCM[iK] ) )
112     K2sub = [ sort([K2...]) for K2 in K2sub]
113     K2sub = unique( Mik[ findall( Int_M_KCM .== Int_KCM[iK] )
114         ] )
115     #K2sub = unique( Mik[ findall( Int_M_KCM .== iK ) ] )
116     push!(K2sub_list, unique(K2sub) )
117     #@show length(unique(K2sub))
118 end
119
120 K2sub_list[1];
121
122 sort( [K2sub_list[1][2]...] )
123
124 M_KCM[ Int_M_KCM .== Int_KCM[1] ]
125
126 for (i,(ik1,ik2)) in enumerate(K2sub_list[1])
127     @show ik1, ik2
128 end
129
130 for (iKCM,K2sub) in enumerate(K2sub_list)
131     for (ik1,ik2) in K2sub
132         #println(KCM_values[iKCM],": ", kpoints[ik1]/pi, " +
133             ", kpoints[ik2]/pi)
134     end
135 end
136
137 end
138
139 end

```

Şekil C.3 : Momentum uzayı kod 3.

```

134 function HCM(K2sub,J,U,N1)
135     dH = length(K2sub)
136     HK2 = zeros(ComplexF64,(dH,dH))
137     same_state=[]
138     for (i,(ik1,ik2)) in enumerate(K2sub)
139         if ik1==ik2
140             push!(same_state,i)
141         end
142     end
143     if length(same_state) > 2 @show same_state end
144     # diagonal elements
145     for (i,(ik1,ik2)) in enumerate(K2sub)
146         k1 = kpoints[ik1]
147         k2 = kpoints[ik2]
148         HK2[i,i] = -2*J*(cos(k1)+cos(k2)) #+ 2*U/N1
149     end
150     # interaction, mostly off-diagonal elements
151     #@show HK2
152     if dH>1
153         #HK2 .+= 2*U/N1*(ones(dH,dH)-diagm(repeat([1],dH)))
154         HK2 .+= 2*U/N1*ones(dH,dH)
155         for i in same_state
156             HK2[i,i] -= U/N1
157             for j in 1:dH
158                 if i != j
159                     HK2[i,j] = sqrt(2)*U/N1
160                     HK2[j,i] = sqrt(2)*U/N1
161                 end
162             end
163         end
164         #@show HK2
165         #if same_state != []
166         if length(same_state) > 1
167             HK2[same_state[1],same_state[2]] = U/N1
168             HK2[same_state[2],same_state[1]] = U/N1
169         end
170         #@show HK2
171     end
172     return HK2
173 end
174
175 U = -1
176
177 H2 = HCM(K2sub_list[1],J,U,N1);
178
179 J=1
180 U=-0.5-1im*0.
181 resE2U2 = []
182
183 Ulist = [-5-1im*0, -5-1im*0.1, -5-1im*0.2]

```

Şekil C.4 : Momentum uzayı kod 4.

```

184 for U in Ulist[1]
185 for (iK, KCM) in enumerate(KCM_vals[:])
186     K2sub=K2sub_list[iK]
187     HK2 = HCM(K2sub,J,U,N1)
188     push!(resE2U2, eigen(HK2))
189 end
190 end
191
192 fig0=scatter()#xlims=[-1.1,1.])
193 #hline!([4*J], linestyle=:dash, label="")
194 #hline!([-4*J], linestyle=:dash, label="")
195 #hline!([U], linestyle=:dash, label="")
196 #hline!([-sqrt(U^2+4*(2*J)^2)], linestyle=:dash, label="")
197 for (iK, (E2, U2)) in enumerate(resE2U2)
198     #@show E2
199     #scatter!(repeat([KCM_vals[iK]/pi], length(E2)),real(E2),
200     c=:blue, label="", xlabel=L"$K_{CM}a/\pi$", fonts=24,
201     ylabel=L"E/J")
202     scatter!(repeat([mod(KCM_vals[iK]/pi+1,2)-1], length(E2)),
203     real(E2), c=:blue, label="", xlabel=L"$K_{CM}a/\pi$",
204     fonts=24, ylabel=L"E/J")
205 end
206 #for (iK, (E2, U2)) in enumerate(resE2U2[22:22])
207 #    #@show E2
208 #    scatter!(repeat([1], length(E2)),real(E2), c=:blue, label
209 #    = "", xlabel=L"$K_{CM}a/\pi$", fonts=24, ylabel=L"E/J")
210 #end
211 #plot!(kpoints./pi,-sqrt.((real(Ulist[1])^2).+(4*J)^2*cos.(
212 #    kpoints/2).^2), lw=4, label="analytic 2body")
213
214 fig0
215
216 #savefig(fig0,"figs/fig0.pdf")
217 #savefig(fig0,"figs/fig0.png")
218
219
220
221
222
223
224
225
226
227

```

Şekil C.5 : Momentum uzayı kod 5.

```

228     push!(ECs,EC)
229 end
230
231 figCR = scatter(xlabel=L"$\gamma/J$", ylabel=L"\mathrm{Re}\{E_{\mathrm{C}}\}/J", title=L"U = U_0 + i \gamma, K_{\mathrm{KM}}=0",
                xtickfontsize=14,ytickfontsize=14,
                xguidefontsize=14,yguidefontsize=14,legendfontsize=10,
                size=(400,300))
232 for (iU, EC) in enumerate(ECs)
233     #scatter!(gs,meffU0s[iU],label=L"$U_0 = $ %$(U0)J")
234     plot!(gs,real(EC),lw=3, label="") #label=L"$U_0 = $ %$(U0s[
235         iU])J")
236 end
237 savefig("figs/EC_real.pdf")
238 savefig("figs/EC_real.png")
239 figCR
240
241 figCI = scatter(xlabel=L"$\gamma/J$", ylabel=L"\mathrm{Im}\{E_{\mathrm{C}}\}/J", title=L"U = U_0 + i \gamma, K_{\mathrm{KM}}=0",
                xtickfontsize=14,ytickfontsize=14,
                xguidefontsize=14,yguidefontsize=14,legendfontsize=10,
                size=(400,300))
242 for (iU, EC) in enumerate(ECs)
243     #scatter!(gs,meffU0s[iU],label=L"$U_0 = $ %$(U0)J")
244     plot!(gs,imag(EC),lw=3, label=L"$U_0 = $ %$(U0s[iU])J")
245 end
246 savefig("figs/EC_imag.pdf")
247 savefig("figs/EC_imag.png")
248 figCI
249
250
251 J=1
252 U=-5-1im*0.1
253 resU = []
254 U0 = -5.
255 Ulist = [U0-1im*0, U0-1im*2, U0-1im*4, U0-1im*6]
256 Ulist = [U0-1im*i/12 for i in 0:24]
257 for U in Ulist
258     res=[]
259     for (iK, KCM) in enumerate(KCM_vals[:])
260         K2sub=K2sub_list[iK]
261         HK2 = HCM(K2sub,J,U,N1)
262         E2, U2 = eigen(HK2)
263         push!(res, [KCM,E2[1]])
264     end
265     push!(resU,res)
266 end
267
268 Klist = [ real(el[1]) for el in resU[1]]

```

Şekil C.6 : Momentum uzayı kod 6.



ÖZGEÇMİŞ

Adı SOYADI: M. Koray Hurma

ÖĞRENİM DURUMU:

- **Lisans:** 2003, İstanbul Teknik Üniversitesi, Makina Fakültesi, Makina Mühendisliği Bölümü
- **Y. Lisans:** 2006, Marmara Üniversitesi, Ortaöğretim Fen ve Matematik Alanları Eğitimi Anabilim Dalı, Fizik Öğretmenliği Tezsiz Yüksek Lisans Programı

DİĞER YAYINLAR, SUNUMLAR VE PATENTLER:

- **Hurma, K., Subaşı, A.L.** (2025). Two-Body Problem In A Periodic Potential With A Complex Interaction. *4th International Graduate Research Symposium*, Mayıs 12-14, 2025 İstanbul-Türkiye. (Poster bildirisi)