

**ANKARA ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**DOKTORA TEZİ**

**KUANTUM ÇOK-PARÇACIK SİSTEMLERİN  
STOKASTİK ORTALAMA ALAN ÖTESİ YAKLAŞIMLARLA İNCELENMESİ**

**İbrahim ÜLGEN**

**FİZİK ANABİLİM DALI**

**ANKARA  
2020**

**Her hakkı saklıdır**

## TEZ ONAYI

**İbrahim ÜLGEN** tarafından hazırlanan “**Kuantum Çok-Parçacık Sistemlerin Stokastik Ortalama Alan Ötesi Yaklaşımlarla İncelenmesi**” adlı tez çalışması **28/01/2020** tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oy birliği ile Ankara Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı’nda **DOKTORA TEZİ** olarak kabul edilmiştir.

**Danışman:** Doç. Dr. Bülent YILMAZ

Ankara Üniversitesi Fizik Anabilim Dalı

### **Jüri Üyeleri:**

**Başkan:** Prof. Dr. Osman YILMAZ

Orta Doğu Teknik Üniversitesi Fizik Anabilim Dalı

**Üye** : Doç. Dr. Emre TAŞCI

Hacettepe Üniversitesi Fizik Mühendisliği Anabilim Dalı

**Üye** : Prof. Dr. Handan OLĞAR

Ankara Üniversitesi Fizik Mühendisliği Anabilim Dalı

**Üye** : Prof. Dr. İnanç ŞAHİN

Ankara Üniversitesi Fizik Anabilim Dalı

**Üye** : Doç. Dr. Bülent YILMAZ

Ankara Üniversitesi Fizik Anabilim Dalı

**Yukarıdaki sonucu onaylarım.**

**Prof. Dr. Özlem YILDIRIM**

**Enstitü Müdürü**

## ETİK

Ankara Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tez yazım kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez içindeki bütün bilgilerin doğru ve tam olduğunu, bilgilerin üretilmesi aşamasında bilimsel etiğe uygun davrandığımı, yararlandığım bütün kaynakları atıf yaparak belirttiğimi beyan ederim.

28.01.2020



İbrahim ÜLGEN

## ÖZET

Doktora Tezi

### KUANTUM ÇOK-PARÇACIK SİSTEMLERİN STOKASTİK ORTALAMA-ALAN ÖTESİ YAKLAŞIMLARLA İNCELENMESİ

İbrahim ÜLGEN

Ankara Üniversitesi  
Fen Bilimleri Enstitüsü  
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Bülent YILMAZ

Bu çalışmada, "Zamana-Bağlı Yoğunluk Matrisi (TDDM)", "Stokastik Ortalama-Alan (SMF)" ve "Stokastik Zamana-Bağlı Hartree-Fock (STDHF)" olarak adlandırılan üç ortalama-alan ötesi yaklaşım incelenmektedir. Bu yaklaşımlardan bir tanesi (TDDM) deterministik değerleri ise stokastiktir. TDDM yaklaşımında hareket denklemleri BBGKY hiyerarşi denklemlerinin ikinci mertebeden budanıp üç-parçacık korelasyonlarının ihmal edilmesiyle elde edilir. STDHF yaklaşımı, korelasyonlu dinamiğin zamana-bağlı Ortalama-Alan yörüngelerinin rasgele seçilen topluluğuyla incelendiği stokastik genişletilmiş Zamana-Bağlı Hartree-Fock Kuramı'na dayanır. SMF yaklaşımında tek-parçacık yoğunluk işlemcilerinin matris elemanlarıyla belirlenen rastgele başlangıç koşullarından oluşan Ortalama-Alan yörüngelerinin bir topluluğu dikkate alınır. Standart SMF yaklaşımında stokastik matris elementleri için Gaussyen rastgele sayılar kabul edilir. Gaussyen dağılım yerine en küçük kurtosis (basıklık) değerine sahip olasılık dağılımı dikkate alındığında SMF yaklaşımının tahmin gücünün geliştirilebileceği gösterilmektedir. SMF yaklaşımının iyileştirilmesinin yanı sıra, ortalama-alan ötesi üç yaklaşım ile sistemin gerçek dinamiği arasında gerçekleştirilen karşılaştırmalar TDDM'in en iyi STDHF'in ise diğerlerine göre en kötü yaklaşıklık olduğunu işaret etmektedir. "Değişkin Lipkin-Meshkov-Glick" ve "Fermi-Hubbard" şeklinde adlandırılan iki şematik modele ait bulgular sunulmaktadır.

**Ocak 2020, 105 sayfa**

**Anahtar Kelimeler:** Ortalama-Alan Yaklaşımı, Ortalama-Alan Ötesi Yaklaşımlar, Stokastik Metodlar, Yoğunluk Matrisi, Stokastik Zamana Bağlı Hartree-Fock, Stokastik Ortalama-Alan, Zamana Bağlı İndirgenmiş Yoğunluk Matrisi, Stokastik TDHF, Değişkin Lipkin-Meshkov-Glick Modeli, Fermi-Hubbard Modeli.

## ABSTRACT

Ph. D. Thesis

### ANALYSIS OF QUANTUM MANY-BODY SYSTEMS WITH STOCHASTIC BEYOND MEAN-FIELD APPROACHES

İbrahim ÜLGEN

Ankara University  
Graduate School of Natural and Applied Sciences  
Department of Physics

Supervisor: Assoc. Prof. Dr. Bülent YILMAZ

In this work, three beyond mean-field approaches named as "time-dependent density matrix (TDDM)", "stochastic time-dependent Hartree-Fock (STDHF)" and "stochastic mean-field (SMF)" are investigated. One of these approaches (TDDM) is deterministic whereas the others are stochastic. In the TDDM approach, the equations of motion are obtained by truncating the BBGKY hierarchy at the second level and neglecting the three-body correlations. The STDHF approach consists in a stochastic extension of time dependent Hartree-Fock theory in which the correlated dynamics is treated in terms of randomly chosen ensemble of time dependent mean-field paths. In the SMF approach, an ensemble of mean-field trajectories with random initial conditions for the matrix elements of the one-body densities are considered. The stochastic matrix elements are regarded as Gaussian random numbers in the standard SMF approach. It is shown that the predictive power of the SMF approach can be improved by considering probability distribution with minimum kurtosis instead of Gaussian distribution. Besides showing improvement of the SMF approach, comparisons of the three beyond mean-field approaches with the exact dynamics of one-body quantities show that the TDDM is the best and the STDHF is relatively the worst approximation. The results are presented for two schematic models called "the modified Lipkin-Meshkov-Glick" and "the Fermi-Hubbard".

**January 2020, 105 pages**

**Key Words:** Mean-field approach, Beyond mean-field approaches, Stochastic methods, Density matrix, Stochastic Time-Dependent Hartree-Fock, Stochastic Mean-Field, Time-Dependent Reduced Density Matrix, Stochastic TDHF, The modified Lipkin-Meshkov-Glick model, The Fermi-Hubbard model.

## TEŞEKKÜR

Çalışmalarım sırasında bilgi, destek ve yardımlarını esirgemeyen; sahip olduğu hoşgörüyü ve sarf ettiği yoğun emeğe daima minnettar kalacağım değerli hocam sayın Doç. Dr. Bülent YILMAZ'a (Ankara Üniversitesi Fizik Anabilim Dalı) teşekkürlerimi sunarım. Tez izleme sürecinde değerli katkılarıyla tezimin şekillenmesinde yardımcı olan hocalarım sayın Prof. Dr. Handan OLĞAR'a (Ankara Üniversitesi Fizik Mühendisliği Anabilim Dalı) ve sayın Prof. Dr. İnanç ŞAHİN'e (Ankara Üniversitesi Fizik Anabilim Dalı); tezimi değerlendirmeyi kabul eden hocalarım sayın Prof. Dr. Osman YILMAZ'a (Orta Doğu Teknik Üniversitesi Fizik Anabilim Dalı) ve Doç. Dr. Emre TAŞCI'ya (Hacettepe Üniversitesi Fizik Mühendisliği Anabilim Dalı) teşekkür ederim. Lisansüstü öğrenim hayatım boyunca hem ders içinde hem de ders dışında edindiğim kazanımları borçlu olduğum hocalarım sayın Prof. Dr. Abdullah VERÇİN'e (Ankara Üniversitesi Fizik Anabilim Dalı), sayın Prof. Dr. Ali Ulvi YILMAZER'e (Ankara Üniversitesi Fizik Mühendisliği Anabilim Dalı) ve sayın Prof. Dr. İnanç ŞAHİN'e (Ankara Üniversitesi Fizik Anabilim Dalı) saygı ve şükranlarımı sunarım.

Çalışmaları birlikte gerçekleştirdiğimiz, değerli katkılarıyla kendinden çok şey öğrendiğim araştırmacı sayın Dr. Denis LACROIX'e (Paris-Saclay Üniversitesi Teorik Nükleer Fizik Grubu); Fransa'ya gerçekleştirdiğimiz ziyaretlerimiz sırasında bize misafirperverliklerini esirgemeyen sayın LACROIX ve eşi Dr. Marcella GRASSO'ya (Paris-Saclay Üniversitesi Teorik Nükleer Fizik Grubu) ve ayrıca ziyaretlerimiz boyunca yerel masraflarımızı karşılayan Institut de Physique Nucléaire (IPN) kurumuna teşekkür ederim.

Başta yakın arkadaşlarım Dr. Adem TÜRKMEN, Gülfiz ERGİN DEMİRDAĞ, Ahmet DEMİRDAĞ ve Duygu YILDIRIM olmak üzere Ankara Üniversitesi'nde görev yapan arkadaşlarım ve hocalarıma saygı ve sevgilerimi sunarım. Hayatımın her anında sundukları maddi ve manevi desteklerini asla unutmayacağım aileme en içten sevgi ve saygılarımı arz ederim.

BİDEB 2211-A programı kapsamında verdiği burs desteği için Türkiye Bilimsel ve Teknolojik Araştırma Kurumu (TÜBİTAK)'na teşekkür ederim.

İbrahim ÜLGEN  
Ankara, Ocak 2020

## İÇİNDEKİLER

<b>TEZ ONAYI</b>	
<b>ETİK</b> . . . . .	i
<b>ÖZET</b> . . . . .	ii
<b>ABSTRACT</b> . . . . .	iii
<b>TEŞEKKÜR</b> . . . . .	iv
<b>SİMGELER DİZİNİ</b> . . . . .	vii
<b>ŞEKİLLER DİZİNİ</b> . . . . .	viii
<b>1. GİRİŞ</b> . . . . .	1
<b>2. ORTALAMA-ALAN KURAMI</b> . . . . .	3
<b>2.1 İkinci Kuantumlama</b> . . . . .	4
<b>2.1.1 N-Parçacıklı sistemin durumu</b> . . . . .	4
<b>2.1.2 Tamamen simetrik ve anti-simetrik durumlar</b> . . . . .	5
<b>2.1.3 Permanent ve Slater Determinantı</b> . . . . .	7
<b>2.1.4 İşlemcilerin Fock Uzayı gösterimi</b> . . . . .	8
<b>2.2 Çok-Parçacıklı Sistemlerde Ortalama-Alan Kuramı</b> . . . . .	11
<b>2.2.1 Statik Ortalama-Alan Yaklaşımı</b> . . . . .	11
<b>2.2.2 Statik Ortalama-Alan denklemleri</b> . . . . .	14
<b>2.2.3 Statik Ortalama-Alan Yaklaşıklığına ilişkin genel değerlendirmeler</b> . . . . .	16
<b>2.2.4 Ortalama-alan enerjisi</b> . . . . .	17
<b>2.3 Zamana Bağlı Ortalama-Alan Kuramı</b> . . . . .	18
<b>2.3.1 Balian-Vénéroni varyasyon yöntemi</b> . . . . .	19
<b>2.3.2 Zamana Bağlı Ortalama-Alan (TDHF) Denklemi</b> . . . . .	20
<b>2.3.3 Kalıntı (Residual) etkileşme</b> . . . . .	21
<b>2.3.4 Thouless Teoremi</b> . . . . .	23
<b>2.4 Ortalama-Alan Kuramının Eksiklikleri</b> . . . . .	23
<b>2.5 Ortalama-Alan Ötesi Yaklaşımlar</b> . . . . .	24
<b>2.6 Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi</b> . . . . .	25
<b>3. ZAMANA BAĞLI İNDİRGENMİŞ YOĞUNLUK MATRİSLERİNİN KURAMI</b> . . . . .	27
<b>3.1 Çok-Parçacıklı Sistemlerde Yoğunluk İşlemcileri</b> . . . . .	27
<b>3.1.1 İndirgenmiş yoğunluk işlemcileri</b> . . . . .	29
<b>3.2 BBGKY Hiyerarşi Denklemleri</b> . . . . .	31

3.3 Zamana Bağlı Yoğunluk Matrisi Teorisi . . . . .	32
<b>4. ORTALAMA-ALAN ÖTESİ STOKASTİK YAKLAŞIMLAR . . . . .</b>	<b>35</b>
4.1 Stokastik Ortalama-Alan Yaklaşımı . . . . .	35
4.1.1 Kuramsal temelleri . . . . .	35
4.1.2 Yüksek mertebeden merkezi momentler . . . . .	39
4.2 Stokastik Zamana Bağlı Hartree-Fock Yaklaşımı . . . . .	45
4.2.1 Kuramsal temelleri . . . . .	45
<b>5. ORTALAMA-ALAN ÖTESİ YAKLAŞIMLARIN UYGULAMALARI . . . . .</b>	<b>51</b>
5.1 Değişkin Lipkin-Meshkov-Glick Modeli . . . . .	51
5.1.1 Tam çözüm, Ortalama-Alan ve Stokastik Ortalama-Alan dinamikleri . . . . .	53
5.1.2 Çok-parçacıklı sistemin başlangıç durumu . . . . .	54
5.1.3 Araştırma bulguları . . . . .	55
5.2 Fermi-Hubbard Modeli . . . . .	67
5.2.1 Tam çözüm, Ortalama-Alan ve Stokastik Ortalama-Alan dinamikleri . . . . .	68
5.2.2 Çok-parçacıklı sistemin başlangıç durumu . . . . .	69
5.2.3 Araştırma bulguları . . . . .	70
5.3 Ortalama-Alan Ötesi Yaklaşımların Karşılaştırılması . . . . .	73
5.3.1 Karşılaştırma bulguları . . . . .	73
<b>6. SONUÇ VE DEĞERLENDİRMELER . . . . .</b>	<b>78</b>
<b>KAYNAKLAR . . . . .</b>	<b>81</b>
<b>EKLER . . . . .</b>	<b>88</b>
<b>EK 1 ZAMANA BAĞLI ORTALAMA-ALAN DENKLEMİNİN TÜRETİLMESİ . . . . .</b>	<b>89</b>
<b>EK 2 ORTALAMA-ALAN YAKLAŞIMINDA KORELASYON VE DALGALANMALAR . . . . .</b>	<b>91</b>
<b>EK 3 TEK-PARÇACIK İŞLEMCİLERİNİN KUANTUM MOMENTLERİ . . . . .</b>	<b>92</b>
<b>EK 4 mLMG MODELİNİN HAREKET DENKLEMLERİ . . . . .</b>	<b>97</b>
<b>ÖZGEÇMİŞ . . . . .</b>	<b>105</b>



## SİMGELER DİZİNİ

$\mathcal{H}$	Hilbert uzayı
$\mathcal{H}_1$	Tek-parçacık Hilbert uzayı
$\mathcal{H}_N$	N-parçacık Hilbert uzayı
$\otimes$	Tensörel çarpım
$\dagger$	Hermitesel eşlenik alma işlemi
$\mathbb{1}$	Birim işlemci
$\rho$	Tek-parçacık indirgenmiş yoğunluk işlemcisi
$R_{1\dots k}$	k-parçacık indirgenmiş yoğunluk işlemcisi
$D$	N-parçacık indirgenmiş yoğunluk işlemcisi
$Tr$	İz alma işlemi
$Tr_k$	k sistemi üzerinden Parçalı iz alma işlemi
$\mathcal{O}_1$	Tek-parçacık işlemcisi
$\mathcal{O}_{1\dots k}$	k-parçacık işlemcisi
$\hat{a}_k^\dagger$	k durumunda tek-parçacık yaratma işlemcisi
$\hat{a}_k$	k durumunda tek-parçacık yoketme işlemcisi
$ \textcircled{S}\rangle$	Slater durumu
$ \ominus\rangle$	Vakum durumu
$\mathcal{N}$	Olay (örneklem) sayısı

### Kısaltmalar

MF	Mean-Field
TDHF	Time-Dependent Hartree-Fock
BBGKY	Bogoliubov-Born-Green-Kirkwood-Yvon
TDRDM	Time-Dependent Reduced Density Martix
TDDM	Time-Dependent Density Martix
SMF	Stochastic Mean-Field
STDHF	Stochastic Time-Dependent Hartree-Fock
mLMG	modified Lipkin-Meshkov-Glick
DFT	Density Functional Theory

## ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1 Ortalama-Alan Yaklaşımı'nın şematik gösterimi . . . . .	12
Şekil 2.2 Hartree-Fock Yaklaşımı'nda taban durumunun şematik gösterimi . . . . .	17
Şekil 4.1 TDHF ve SMF yaklaşımlarının şematik karşılaştırması . . . . .	38
Şekil 4.2 (4.35) fonksiyonunun $\chi$ parametresine göre grafiği . . . . .	44
Şekil 4.3 STDHF yaklaşımının şematik gösterimi . . . . .	47
Şekil 4.4 TDHF, SMF ve STDHF yaklaşımlarının şematik karşılaştırılması . . . . .	49
Şekil 5.1 mLMG Modeli'nin şematik gösterimi . . . . .	52
Şekil 5.2 Dipol işlemcisinin ortalama değeri ve parçacık başına tek-parçacık entropisinin zamanla gelişim grafikleri . . . . .	57
Şekil 5.3 Şekil 5.2'deki değişkenlerin uzun zaman ölçeğindeki durumları . . . . .	59
Şekil 5.4 Kuvvetli bağlaşım durumunda Dipol işlemcisinin ortalama değeri ve parçacık başına tek-parçacık entropisinin zamanla gelişim grafikleri . . . . .	60
Şekil 5.5 Reel ( $r_{ij}$ ) ve sanal ( $s_{ij}$ ) bileşenleri farklı ağırlıklı varyanslara sahip stokastik matris elemanlarının kullanıldığı SMF çözümlerinde parçacık başına entropinin ( $S/N$ ) zamanla değişim grafikleri . . . . .	61
Şekil 5.6 Stokastik tek-parçacık yoğunluk matrisi elemanlarının reel ( $r_{\alpha\beta}$ ) ve sanal ( $s_{\alpha\beta}$ ) kısımlarının farklı zamanlardaki dağılımları . . . . .	62
Şekil 5.7 Dipol işlemcisinin olaylar (events) üzerinden beklenen değerinin farklı SMF çözümlerinde üç farklı anda gözlenme sıklığının (frekans) dağılımları . . . . .	63
Şekil 5.8 24 tek parçacık durumu ve $N = 12$ parçacıktan oluşan sisteme ait frekans dağılımı . . . . .	64
Şekil 5.9 $ \Psi(0)\rangle_2$ başlangıç durumlu sistem için Dipol işlemcisinin ortalama değeri ve parçacık başına tek-parçacık entropisinin zamanla gelişim grafikleri . . . . .	65
Şekil 5.10 $ \Psi(0)\rangle_2$ başlangıç durumlu sistem için Dipol işlemcisinin ortalama değeri ve parçacık başına tek-parçacık entropisinin uzun ölçekli zamanla gelişim grafikleri . . . . .	66
Şekil 5.11 Fermi-Hubbard Modeli'nin şematik gösterimi . . . . .	68

Şekil 5.12 Farklı bağlaşım durumları için kütle merkezinin zamanla deęişim grafikleri	71
Şekil 5.13 Farklı bağlaşım durumları için parçacık başına tek-parçacık entropisinin zamanla deęişim grafikleri	72
Şekil 5.14 Farklı yaklaşımlara göre dipol işlemcisinin beklenen deęerinin zamanla deęişim grafięi	74
Şekil 5.15 Farklı yaklaşımlara göre toplam enerjinin beklenen deęerinin zamanla deęişim grafięi	75
Şekil 5.16 Farklı yaklaşımlara göre parçacık başına tek-parçacık entropisinin zamanla deęişim grafięi	76
Şekil 5.17 Farklı yaklaşımlara göre dipol işlemcisinin karesinin ( $D^2$ ) beklenen deęerinin zamanla deęişim grafięi	77
Şekil 5.18 Farklı yaklaşımlara göre " $\hat{N}_+\hat{N}_- + \hat{N}_-\hat{N}_+$ " işlemcisinin beklenen deęerinin zamanla deęişim grafięi	77

## 1. GİRİŞ

Doğanın işleyişini anlama çabamızda çok-parçacıklı sistemler önemli yer tutar. Çok-parçacıklı bir bileşik sistem, kendisini oluşturan ve birbirleriyle etkileşen bileşenlerinin bireysel özelliklerinden daha zengin özellik ve dinamiklere sahip olabilir. Böylesi sistemlerin sergiledikleri bütüncül davranışlar, indirgemeci yaklaşım ile öngörülemeyen bilimsel keşifleri beraberinde getirmiştir ve yeni fenomenlerin ortaya çıkmasına öncülük edebilir.

Çok-parçacıklı sistemlerin kuantum mekaniği çerçevesinde nitelendirilmesi, parçacık sayısı arttıkça güçleşen bir probleme dönüşmektedir. Ortaya çıkan güçlük çok-parçacıklı sistemin, sistemi oluşturan bileşenlerinin bağımsız bir topluluğu olarak değerlendirilememesinden kaynaklanmaktadır. Kuantum mekaniksel bir çok-parçacıklı sistem, her bir parçacığın birbirinden bağımsız özelliklerinin toplamından daha zengin özelliklere sahiptir. Parçacıkların hem kolektif davranışları hem de parçacıklar arası korelasyonlar bu zenginliğin başlıca nedenleridir. Kuantum mekaniğinin kinematik yapısı, çok-parçacıklı sistemin bütüncül çok-parçacık durum vektörü ile tasvirini gerektirir. Parçacık sayısı arttıkça artan serbestlik dereceleri, durum vektörünün depolaması için gereken bilgi kapasitesini arttıracığından, böylesi sistemlerin özelliklerinin belirlenmesi oldukça güçtür.

Kuantum teorisinin inşa edildiği zamandan günümüze kadar çok-parçacık problemlerine ilişkin cebirsel ve diyagramatik yöntemler önerilmiştir. Kuantumlanmış alanlara uygulanan "ikinci kuantumlama" formalizmi 1927 yılında Dirac tarafından tanıtılmıştır. Takip eden zamanda (1927-1928) Jordan, Klein ve Wigner'in katkılarıyla bu formalizm fermiyonlar için genişletilmiştir. Alan Teorisi'nde diyagramatik yaklaşım ilk defa Feynmann tarafından 1949 yılında ortaya konmuş; 1957 yılında Hugenholtz ve Goldstone tarafından çok-parçacıklı sistemlere uygulanmıştır. Alan Teorisi ve Nükleer Fiziğe önemli metodolojik katkılar Dyson, Wick, Hubbard, Frantz ve Mills tarafından sağlanmıştır (Shavitt ve Bartlett 2009)<sup>1</sup>.

Bilişim teknolojilerinin gelişmesi daha karmaşık çok-parçacıklı sistemlerin kinematik denklemlerini çözme ve dinamiklerini belirleme olanağı sağlamıştır. Ancak bilgisayarların bilgi işleme hızı ve kapasitesi, incelenen sistemin parçacık sayısına ya da takip edilen serbestlik

---

<sup>1</sup>Detaylı bilgi için Shavitt ve Bartlett (2009) tarafından kaleme alınan kitaba başvurunuz.

derecesi sayısına baęlı olarak üstten sınırlıdır. Dięer taraftan, karmaşık çok-parçacıklı bir sistemin bütüncül tasviri, sistemden edinmeyi amaçlanandan daha fazla bilgiyi içerir. Bu durumda sisteme ilişkin gerekli bilgiyi (relevant information) azami düzeyde içeren; bilgi işleme hızı ve kapasitesini artırma amaçlı gereksiz bilgiyi (irrelevant information) asgari düzeyde tutan yaklaşımlara ihtiyaç duyulmaktadır. Varyasyonel yöntemler bu yaklaşımlardan bir tanesidir. Varyasyon yöntemi kullanarak sisteme ait özellikleri sadece belirli serbestlik dereceleri üzerine gerçekleştirilen izdüşüm işleminin belirledięi çözüm ile incelemek mümkündür.

Ortalama-Alan Yaklaşımı birbirleriyle etkileşen karmaşık çok-parçacıklı sisteme ait problemi, birbiriyle etkileşmeyen tek-parçacık problemine dönüştüren en basit yöntemdir. Bu yönüyle bir varyasyonel yaklaşımdır; dięer bir deyişle sistemin durumu sadece tek-parçacık serbestlik dereceleri üzerinden değerlendirilir. Bu yaklaşıma göre her bir parçacık, sistemi oluşturan dięer parçacıkların yarattığı ortalama potansiyel alanı içinde dięer parçacıklarla etkileşmeden hareket eder.

Ortalama-Alan Yaklaşımı çok-parçacık problemlerinde yaygın olarak kullanılsa da bu yaklaşımın eksiklikleri vardır. Bu eksiklikler yaklaşımın geçerliliğini sınırlandırmaktadır. Ortalama-Alan Teorisi çerçevesinde kalarak bu eksiklikleri gidermek için önerilen çok sayıda ortalama-alan ötesi yaklaşım vardır.

Bu tez çalışmasında, ortalama-alan ötesi yaklaşımlardan üç tanesi incelenmektedir. Bu yaklaşımları "deterministik" ve "stokastik" başlıkları altında sınıflandırmak yararlı olacaktır. Tez çalışmasının ikinci bölümünde temel kavramlar ve Ortalama-Alan Kuramı tanıtılacaktır. Üçüncü bölümde Zamana Baęlı İndirgenmiş Yoęunluk Matrislerinin Kuramı incelenecek ve bu kuram kullanılarak geliştirilen deterministik yaklaşım tartışılacaktır. Dördüncü bölüm stokastik yaklaşımlara ayrılmıştır. Bu bölümde, "Stokastik Ortalama-Alan" ve "Stokastik Zamana Baęlı Hartree-Fock" yaklaşımları irdelenecektir. Ayrıca Stokastik Ortalama-Alan Yaklaşımı'nı geliştirebilecek koşul ve öneriler bu bölümde değerlendirilecektir. Beşinci bölümde Stokastik Ortalama-Alan Yaklaşımı'na ilişkin öneriler farklı iki şematik model üzerinde test edilecektir. Ayrıca model üzerinde simülasyonları gerçekleştirilen yaklaşımlar birbirleriyle karşılaştırılacaktır. Son bölüm ise sonuç ve değerlendirmelere ayrılmıştır.

## 2. ORTALAMA-ALAN KURAMI

Fiziğin temel amacı doğayı oluşturan sistemleri, sistemleri oluşturan alt-bileşenlerinin özellikleri ile birlikte anlamaktır. Her ne kadar çeşitli kısıtlama, kabul ve basitleştirmeler yapılsa da serbestlik dereceleri büyük ya da sonsuz olan sistemlerin statik ve dinamik özelliklerini belirlemek kuramsal fiziğin zor ve geliştirilmeye uygun araştırma alanlarından biridir. Ortalama-Alan Kuramı (Mean-Field Theory), incelenen sistemlere ilişkin sorulabilecek fiziksel sorulara uygun yanıtlar sunabilen; bunu yaparken ayarlanabilir parametrelerin kullanımını gerektirmeyen, mikroskobik bir yaklaşımdır. Nükleer fizik çerçevesinde değerlendirilecek olursa sistemleri, ortalama-alan yaklaşımı üzerine inşa edilmiş bir teori ile incelemek için geçerli sebepler vardır: ortalama-alan kavramının nükleer sistemlerin taban durumlarına ilişkin işlevleri iyi bilinmektedir ve sistemlerin dinamiklerinin araştırılmasında ortalama-alan önemli rol oynamaktadır (Negele 1982). Hartree-Fock Kuramı<sup>1</sup> 1927 yılında Hartree, 1930 yılında Fock ve Slater 'ın öncül çalışmalarıyla kuramsal fiziğe kazandırılmış bir yaklaşıklık yöntemidir. Zamana bağlı Hartree-Fock (Time-Dependent Hartree-Fock/TDHF) Kuramı ilk kez Dirac tarafından önerilmiştir (Dirac 1930). Hartree-Fock Kuramı'nın Nükleer Fizik problemlerine uygulanması bilişim teknolojilerinin yetersizliği nedeniyle 1970'li yıllara kadar beklemek zorunda kalmıştır. TDHF kuramının nükleer fizikteki ilk uygulaması 1976 yılında gerçekleştirilmiştir (Bonche vd. 1976) ve kuramın öncül uygulamaları devam eden yıllarda yapılmıştır (Cusson vd. 1976, Koonin vd. 1977, Davies vd. 1978, Flocard vd. 1978, Krieger vd. 1978, Davies vd. 1979)(Sekizawa 2019<sup>2</sup>). Bilişim teknolojilerinin gelişmesi ile TDHF teorisi daha karmaşık problemlere uygulanabilmiştir ve güncel çalışmalarda uygulanmaya devam etmektedir (Umar ve Oberacker 2006, Umar vd. 2016, Godbey vd. 2019)(Sekizawa 2019, Simenel vd. 2009, Simenel 2012)<sup>3</sup>. Çalışmalar, TDHF teorisinin çok-parçacıklı sistemlerin ortalama özelliklerine başarılı tahminler sunduğunu göstermektedir. Eksik yönleri dikkate alınarak güncel araştırma ve uygulamalarla ortalama-alan kavramını temel alan TDHF ötesi teoriler geliştirilmeye devam etmektedir.

<sup>1</sup>Nükleer fizik çalışmalarında genellikle "Ortalama-Alan Kuramı" ismi yerine "Hartree-Fock Kuramı" ismi tercih edilmektedir.

<sup>2</sup>Derleme makaledir.

<sup>3</sup>Genel değerlendirmeler için bu derleme makaleler okunabilir.

Tez çalışmasının bu bölümünün ana hatları şöyledir: çok-parçacık problemlerinde sıkça kullanılan bir gösterim olan "ikinci kuantumlama" kısaca tanıtılacaktır. Sonrasında Ortalama-Alan Teorisi diğer adıyla Hartree-Fock Teorisi'nin statik ve dinamik denklemleri varyasyonel yöntemler kullanılarak türetilenlerdir. Son alt-bölümde teoriye ilişkin genel değerlendirmelere ve Ortalama-Alan Teorisi'nin eksikliklerine yer verilecektir.

## 2.1 İkinci Kuantumlama

Tez çalışmasında çok sayıda özdeş parçacıktan oluşan sistemlerin görelî-olmayan özelliklerini belirlemeyi temel alan çeşitli yaklaşımlar ele alınacaktır. Bu yaklaşımları incelenmeden önce çok-parçacıklı sistemleri betimleme kolaylığı sağlayan ve ismini Kuantumlu Alanlar Kuramı'na borçlu olan bir formalizm kısaca tanıtılacaktır: ikinci kuantumlama (second quantization).

### 2.1.1 N-Parçacıklı sistemin durumu

İkinci kuantumlama, özdeş parçacıklardan oluşan sistemlerin durumlarında ve ilgili Hilbert uzayındaki (Fock uzayı) işlemcilerinde parçacık değiş-tokuş simetrisini etkin şekilde kullanan bir formülasyondur. Doğaları gereği parçacıklar spinlerine göre bozonlar ve fermiyonlar olarak sınıflandırılmaktadır. Spin-İstatistik Teoremi'ne göre tam spinli parçacıklardan (bozonlar) oluşan bir sistem simetrik; yarım spinli parçacıklardan (fermiyon) oluşan bir sistem ise anti-simetrik dalga durumu ile temsil edilir.

N özdeş parçacıktan oluşan bir sistemin Hilbert uzayı,  $\mathcal{H}_N$ , sistemi oluşturan her bir parçacığın Hilbert uzaylarının tensörel çarpımıyla gösterilir:

$$\mathcal{H}_N = \mathcal{H}_1^{(1)} \otimes \mathcal{H}_1^{(2)} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_1^{(N)}. \quad (2.1)$$

Bu matematiksel uzayda tek-parçacık baz vektörlerinin

$$|\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N\rangle \equiv |\alpha_1\rangle_1 |\alpha_2\rangle_2 \dots |\alpha_N\rangle_N \quad (2.2)$$

çarpımı  $\mathcal{H}_N$  uzayının bazlarını oluşturur. Burada,  $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}_1$  Hilbert uzayında tanımlı  $\sum_{\alpha} |\alpha\rangle\langle\alpha| = \mathbb{1}$  tamlik bağıntısını sağlayan bir ortonormal tek-parçacık baz vektörünü temsil

etmektedir. Ket vektörlerine ait alt indisler mevcut durumun hangi parçacığa ait olduğunu, ket içindeki indisler ise parçacığın hangi durumda olduğunu simgelemektedir; örneğin  $|\alpha_k\rangle_k$ , k.ncı parçacık  $|\alpha_k\rangle$  durumundadır.  $\mathcal{H}_N$ , üzerinde bir iç çarpımın tanımlı olduğu bir tam kompleks vektör uzayıdır.  $|\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N\rangle$  ve  $|\alpha'_1 \alpha'_2 \dots \alpha'_N\rangle$  bu uzayda tanımlı iki vektör olmak üzere bu vektörler

$$(\alpha'_1 \alpha'_2 \dots \alpha'_N | \alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N) = \langle \alpha'_1 | \alpha_1 \rangle \langle \alpha'_2 | \alpha_2 \rangle \dots \langle \alpha'_N | \alpha_N \rangle \quad (2.3)$$

iç çarpım ve

$$\sum_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N} |\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N\rangle \langle \alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N| = \mathbb{1} \quad (2.4)$$

tamlık bağıntılarını sağlar.

### 2.1.2 Tamamen simetrik ve anti-simetrik durumlar

N-parçacıklı fermiyonik (ya da bozonik) bir sistemin tamamen anti-simetrik (ya da tamamen simetrik) özellikli herhangi bir durumu  $\mathcal{H}_N$  uzayında tanımlı bir vektör ile temsil edilir. Bu sistemlere ait vektörlerin geldiği durumlar uzayı,  $\mathcal{H}_N$  uzayının bir alt-uzayını oluşturur: (i) tamamen simetrik vektörlerin uzayı  $\mathcal{H}_N^S$ , (ii) tamamen anti-simetrik vektörlerin uzayı ( $\mathcal{H}_N^A$ ). Bu alt-uzaylarda tanımlı vektörler  $\mathcal{H}_N$  uzayındaki vektörlere  $\hat{S}_\pm$  izdüşüm işlemcileri uygulanarak elde edilir:

$$\hat{S}_\pm = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (\pm 1)^P \hat{P}. \quad (2.5)$$

$\hat{P}$ , parçacık çiftlerine ait  $x = \mathbf{r}, \sigma$  koordinatlarının karşılıklı değiş-tokuşunu gerçekleştiren permütasyon işlemcisi;  $(\pm 1)^P$  ise permütasyon paritesidir (çift sayıda olan için +1, tek sayıda olan için -1). Burada  $\mathbf{r}$  uzaysal koordinatı,  $\sigma$  ise içsel serbestlik derecelerini (spin, izo-spin, vb.) işaret etmektedir. Boylandırılmış tamamen simetrik veya anti-simetrik baz vektörleri,



$$\begin{aligned}
|\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N\rangle_S &= \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} \hat{S}_+ |\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N\rangle, \\
&= \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \hat{P} |\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N\rangle, \tag{2.6}
\end{aligned}$$

$$\equiv |n_1, n_2, \dots\rangle_S, \tag{2.7}$$

$$\begin{aligned}
|\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N\rangle_A &= \hat{S}_- |\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N\rangle, \\
&= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P \hat{P} |\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N\rangle, \tag{2.8}
\end{aligned}$$

$$\equiv |n_1, n_2, \dots\rangle_A, \tag{2.9}$$

kullanılarak herhangi bir simetrik ya da anti-simetrik durum, bu baz vektörlerinin bir seri açılımı biçiminde ifade edilebilir. Burada  $n_i$ ,  $i$  durumunu işgal eden parçacık sayısını temsil etmektedir.

Çok-parçacıklı sistemlerin kuantum teorisi parçacık sayısı sabit olan sistemlerin yanı sıra sabit olmayan veya bilinmeyen sistemlere de uygulanabilir. Bu tasvir için genişletilmiş Hilbert uzayı kullanılır. Tek-parçacık Hilbert uzaylarının tensörel toplamıyla genişletilmiş biçimi

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}_\pm(\mathcal{H}_1) &= \bigoplus_{n=0}^{n=\infty} \hat{S}_\pm \mathcal{H}_1^{\otimes n} \tag{2.10} \\
&= \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus (\hat{S}_\pm(\mathcal{H}_1^{(1)} \otimes \mathcal{H}_1^{(2)})) \oplus \dots
\end{aligned}$$

ile tanımlanan ve Fock uzayı adı verilen matematiksel yapıdır.  $\mathcal{H}_0$  hiç bir fiziksel parçacığın bulunmadığı kabul edilen vakum durumudur. Burada + ve – işaretleri sırasıyla simetrik ve anti-simetrik durumları simgelemektedir. Olası durumlar bu uzayda  $n_k$ ,  $k$ . durumunu işgal eden parçacık sayısı olmak üzere  $|n_1 n_2 \dots\rangle$  vektörleri ile temsil edilir. Bu vektörlerin iç çarpım ve tamlık özellikleri sırasıyla

$$\langle n'_1 n'_2 \dots n'_N | n_1 n_2 \dots n_N \rangle = \delta_{n'_1 n_1} \delta_{n'_2 n_2} \dots \delta_{n'_N n_N} \tag{2.11}$$

ve

$$\sum_{n_1 n_2 \dots n_N} |n_1 n_2 \dots n_N\rangle \langle n_1 n_2 \dots n_N| = \mathbb{1}, \quad (2.12)$$

şeklinde tanımlanır. Simetrik ve anti-simetrik durumlar vakum durumuna ( $|\ominus\rangle$ ), yaratma ( $\hat{a}^\dagger$ ) ve yok etme ( $\hat{a}$ ) işlemcileri uygulanarak türetilir. Hem simetrik hem de anti-simetrik N-parçacık durumları

$$|n_i n_j \dots n_z\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_i! n_j! \dots n_z!}} (\hat{a}_i^\dagger)^{n_i} (\hat{a}_j^\dagger)^{n_j} \dots (\hat{a}_z^\dagger)^{n_z} |\ominus\rangle; \quad \sum_{v=1}^{\infty} n_v = N \quad (2.13)$$

genel yazımı dikkate alınarak ifade edilebilir.  $n_k$ , bozonlar için (simetrik durum) 0, 1, 2, ... değerlerini alırken; fermiyonlar için (anti-simetrik durum) sadece 0 ve 1 değerleri alabilmektedir. Bu kısıtlama Pauli Dışarlama İlkesi'nin bir sonucudur: aynı kuantum durumunda birden fazla fermiyon bulunamaz. (2.13) bağıntısında ifade edilen durum vektörünün eşlenik vektörü

$$\langle n_i n_j \dots n_z| = \frac{1}{\sqrt{n_i! n_j! \dots n_z!}} \langle \ominus | (\hat{a}_z)^{n_z} \dots (\hat{a}_j)^{n_j} (\hat{a}_i)^{n_i} \quad (2.14)$$

bağıntısı ile temsil edilir. İncelenen sistemin doğasına göre yaratma ve yok etme işlemcileri arasındaki ilişkiler aşağıdaki bağıntılarla uyumludur:

$$\begin{aligned} [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger]_{\pm} &\equiv \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \pm \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i^\dagger = 0, & [\hat{a}_i, \hat{a}_j]_{\pm} &\equiv \hat{a}_i \hat{a}_j \pm \hat{a}_j \hat{a}_i = 0, \\ [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger]_{\pm} &\equiv \hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger \pm \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i = \delta_{ij} \hat{\mathbb{1}}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

$[ , ]_{\pm}$  parantez gösteriminde + durumu fermiyonlar; – durumu bozonlar için kullanılır.

### 2.1.3 Permanent ve Slater Determinantı

Boylandırılmış simetrik dalga fonksiyonu

$$(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_N | \alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N \rangle_S = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} \frac{1}{\sqrt{N!}} (\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_N | \sum_P \hat{P} | \alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N \rangle) \quad (2.16)$$

anti-simetrik dalga fonksiyonu ise

$$\begin{aligned}
 (\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_N | \alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N \rangle_A &= \frac{1}{\sqrt{N!}} (\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_N | \sum_P (-1)^P \hat{P} | \alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N \rangle) \quad (2.17) \\
 &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \langle \mathbf{r}_1 | \alpha_1 \rangle & \langle \mathbf{r}_1 | \alpha_2 \rangle & \dots & \langle \mathbf{r}_1 | \alpha_N \rangle \\ \langle \mathbf{r}_2 | \alpha_1 \rangle & \langle \mathbf{r}_2 | \alpha_2 \rangle & \dots & \langle \mathbf{r}_2 | \alpha_N \rangle \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \langle \mathbf{r}_N | \alpha_1 \rangle & \langle \mathbf{r}_N | \alpha_2 \rangle & \dots & \langle \mathbf{r}_N | \alpha_N \rangle \end{vmatrix} \quad (2.18)
 \end{aligned}$$

biçiminde ifade edilir. Bu gösterimlere sırasıyla permanent ve Slater determinanı adı verilir. Permanent ve Slater durum vektörleri için Denklem (2.13) ortak gösterimi kullanılabilir. Permanent ve Slater durumları tam bir ortonormal baz kümesi oluştururlar. Dolayısıyla herhangi bir çok-parçacık durumu bu baz vektörlerinin bir üst-üste gelimi (superposition) biçiminde ifade edilebilir. Özel olarak, bire boylandırılmış bir Slater durumunun ikinci kuantumlama gösterimindeki temsili

$$|\mathbb{S}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger \dots \hat{a}_N^\dagger |\ominus\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \prod_{i=1}^N \hat{a}_i^\dagger |\ominus\rangle \quad (2.19)$$

biçimindedir. Tezin geri kalan kısımlarında Slater durumu için  $|\mathbb{S}\rangle$  sembolü kullanılacaktır.

#### 2.1.4 İşlecilerin Fock Uzayı gösterimi

Bu bölüm çok-parçacıklı sistemlerin durum vektörlerinin uzaylarında tanımlı işlemcilerin gösterimlerine ayrılmıştır. Çok-parçacık problemlerinde çokça kullanılan tek- ve iki-parçacık işlemcileri ve bunların ikinci kuantumlama imgeniminde gösterimleri tanıtılacaktır.

$\hat{\mathcal{O}}_1$ ,  $\mathcal{H}_1$  tek-parçacık Hilbert uzayında tanımlı durum vektörlerine etkiyen bir tek-parçacık işlemcisini temsil etmektedir. Tamlık bağıntısına başvurarak  $\hat{\mathcal{O}}_1$  işlemcisi

$$\hat{\mathcal{O}}_1 = \sum_{ij} |i\rangle \langle i| \hat{\mathcal{O}}_1 |j\rangle \langle j| \quad (2.20)$$

şeklinde matris bileşenlerinin açık ifadesiyle yazılabilir. Herhangi bir  $\hat{\mathcal{O}}_1^{(v)}$  işlemcisinin, (2.2) denkleminle temsil edilen çok-parçacık durumu üzerindeki etkisi

$$\mathcal{O}_1^{(v)}|\alpha_1 \dots \alpha_v \dots \alpha_N\rangle = \sum_i \langle i_v | \mathcal{O}_1 | j_v \rangle |\alpha_1 \dots i_v \dots \alpha_N\rangle \quad (2.21)$$

şeklinde tanımlanır.  $\mathcal{H}_N$  uzayında tanımlı  $\hat{\mathcal{O}}_N$  işlemcisi, N-parçacıklı bir sistemin tek-parçacık işlemcisidir ve N tane tek-parçacık işlemcisinin toplamıdır:

$$\hat{\mathcal{O}}_N = \sum_v \hat{\mathcal{O}}_1^{(v)} = \hat{\mathcal{O}}_1^{(1)} + \hat{\mathcal{O}}_1^{(2)} + \dots + \hat{\mathcal{O}}_1^{(N)}. \quad (2.22)$$

$\hat{\mathcal{O}}_N$  işlemcisinin çok-parçacık durumu üzerindeki etkisi şöyledir:

$$\mathcal{O}_N|\alpha_1 \dots \alpha_N\rangle = \sum_{v=1}^N \sum_i \langle i_v | \hat{\mathcal{O}}_1 | j_v \rangle |\alpha_1 \dots i_v \dots \alpha_N\rangle. \quad (2.23)$$

$\hat{\mathcal{O}}_N$  simetrik olduğu için ( $\hat{S}_\pm$ ) ile çarpma işlemine göre sıra değişmektedir. Bu durumda simetrik ya da anti-simetrik durum üzerinde  $\hat{\mathcal{O}}_N$ ,

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{O}}_N \hat{S}_\pm |\alpha_1 \dots \alpha_N\rangle &= \sum_{v=1}^N \sum_i \langle i_v | \hat{\mathcal{O}}_1 | j_v \rangle \hat{S}_\pm |\alpha_1 \dots i_v \dots \alpha_N\rangle \\ \hat{\mathcal{O}}_N |\alpha_1 \dots \alpha_N\rangle &= \sum_{v=1}^N \sum_i \langle i_v | \hat{\mathcal{O}}_1 | j_v \rangle |\alpha_1 \dots i_v \dots \alpha_N\rangle \end{aligned} \quad (2.24)$$

şeklinde etki eder.

$|\alpha_1 \dots \alpha_N\rangle$  vektörü Denklem (2.13)'deki gibi yaratma ve yok etme işlemcileri biçiminde yazılabilir. Bu durumda 2.24 denklemindeki  $\hat{\mathcal{O}}_N$  işlemcisinin Fock uzayı temsili şöyle edilir:

$$\hat{\mathcal{O}} = \sum_{ij} \langle i | \hat{\mathcal{O}}_1 | j \rangle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j. \quad (2.25)$$

Bu bağıntı simetrik tek-parçacık işlemcisinin ikinci kuantumlama gösterimindeki temsilidir.

Çok-parçacıklı sistemlerin  $\mathcal{H}_N$  Hilbert uzayında tanımlı vektörlere etki eden simetrik  $\hat{\mathcal{W}}_N$  işlemcisi, matris bileşenleri

$$\hat{\mathcal{W}}_{12} = \sum_{ijkl} |ij\rangle \langle ij| \hat{\mathcal{W}}_{12} |kl\rangle \langle kl| \quad (2.26)$$

olan  $\mathcal{H}_2$  uzayında tanımlı işlemcilerin toplamıdır:

$$\hat{\mathcal{W}}_N = \sum_{\mu < \nu=1}^N \hat{\mathcal{W}}_{12}(\mu, \nu) = \frac{1}{2} \sum_{\mu, \nu=1}^N \hat{\mathcal{W}}_{12}(\mu, \nu). \quad (2.27)$$

Parantez içindeki terimler işlemcinin hangi parçacık çifti üzerinde etkili olduğunu simgelemektedir. Tek-parçacık işlemcisinde uygulanan protokollerin benzeri uygulanarak iki-parçacık işlemcisinin Fock temsili aşağıdaki bağıntı ile ifade edilir:

$$\hat{\mathcal{W}} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle ij | \hat{\mathcal{W}}_{12} | kl \rangle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k. \quad (2.28)$$

Her ne kadar simetrik bir işlemci olsa da fermiyonik sistemlere ait hesaplamalarda belirgin bir kolaylık sağladığı için  $\hat{\mathcal{W}}$ 'nin

$$\hat{\mathcal{W}} = \frac{1}{4} \sum_{i,j,k,l} \langle ij | \tilde{\mathcal{W}}_{12} | kl \rangle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k \quad (2.29)$$

biçiminde anti-simetrik matris temsili de kullanılmaktadır. Anti-simetrik yazımı özellikle vurgulamak için  $\langle ij | \tilde{\mathcal{W}}_{12} | kl \rangle$  tercih edilir ve  $\langle ij | \tilde{\mathcal{W}}_{12} | kl \rangle \equiv \langle ij | \hat{\mathcal{W}}_{12} | kl \rangle - \langle ij | \hat{\mathcal{W}}_{12} | lk \rangle$ 'dir.

Simetrik bir üç-parçacık işlemcisinin Fock uzayı temsili şöyledir:

$$\hat{\mathcal{L}} = \frac{1}{3!} \sum_{i,j,k,l,m,n} \langle ijk | \tilde{\mathcal{L}}_{123} | lmn \rangle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_n \hat{a}_m \hat{a}_l. \quad (2.30)$$

Hesaplamalarda genellikle tek- ve iki-parçacık işlemcileri dikkate alınmaktadır.

## 2.2 Çok-Parçacıklı Sistemlerde Ortalama-Alan Kuramı

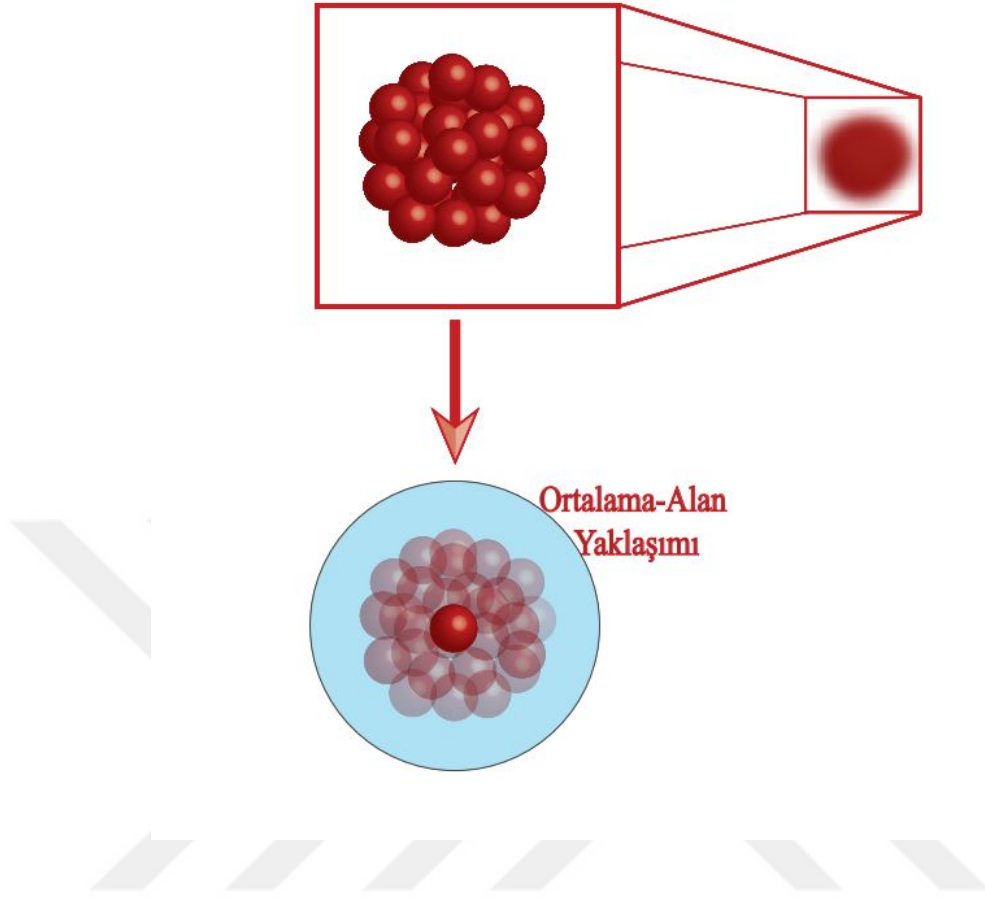
Özdeş  $N$  tane parçacıktan oluşan, hem birbirleriyle hem de varsa bir dış potansiyel ile etkileşen parçacıklar sisteminin genel Hamiltonyeni

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{T} + \hat{V} \\ &= \sum_i^N \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \hat{U}_{\text{dış}}(r_i) \right] + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \hat{v}(r_i, r_j)\end{aligned}\quad (2.31)$$

biçiminde ifade edilir. İlk terim kinetik enerji ve varsa dış potansiyel; ikinci terim ise sırasıyla iki-parçacık etkileşme potansiyeline karşılık gelmektedir. Böylesi çok-parçacıklı bir sistemin kuantum tasviri; sistemin tüm serbestlik derecelerini içeren tam dalga fonksiyonu ya da daha genel gösterim olan yoğunluk işlemcisini bilmeyi gerektirir. Az sayıda parçacığa sahip sistemler haricinde diğer sistemlerin statik ve dinamik özelliklerinin belirlenmesi imkansız olmasa da zordur. Bu zorluk bir zorunluluğu da beraberinde getirmektedir: (i) parçacık ya da durum sayısını azaltmak, (ii) faydalı yaklaşıklık yöntemleri aramak. İlki incelenebilecek çok-parçacıklı sistem sayısını kısıtlamaktadır. Karmaşık yapılı ve büyük boyutlu dalga fonksiyonu yerine, dikkate alınan sistemle ilgili yeterli bilgiyi içeren bir betimleme sunan, az serbestlik derecesine sahip bir durum vektörü kullanmak akıllıca bir yaklaşımdır. Bu amaçla özdeş fermiyonlardan oluşan bir sistem için bir Slater determinantı kullanmak başvurulabilecek birincil yöntemdir (Lacroix ve Ayik, 2008). Böylece parçacık durumları arasındaki korelasyonları içeren karmaşık dalga fonksiyonu, yerini bağımsız fermiyonların anti-simetrik durumlarını temsil eden Slater determinantına bırakır.

### 2.2.1 Statik Ortalama-Alan Yaklaşımı

Tezin bu kısmında ve geri kalanlarında aksi belirtilmedikçe fermiyonlardan oluşan çok-parçacıklı sistemler dikkate alınacaktır. Ortalama-Alan Kuramı bozonik sistemlere de uygulanabilmektedir. Parçacık yaratma ve yoketme işlemcileri arasındaki ilişki, bir kuantum durumunda bulunabilecek maksimum parçacık sayısı vb. özellikler bakımından bozonik sistemlerin Ortalama-Alan Kuramı fermiyonik sistemlerinkinden farklıdır.



Şekil 2.1 Ortalama-Alan Yaklaşımı'nın şematik gösterimi. Ortalama-Alan Yaklaşımı'na göre çok-parçacıklı sistemde parçacıklar birbirleriyle değil, parçacıkların oluşturduğu ortalama-alan ile etkileşirler.

İkinci kuantumlama gösteriminde genel Hamiltonyen, fermiyon yaratma ve yoketme işlemcileri kullanılarak

$$\hat{H} = \sum_{ij} \langle i|\hat{t}|j\rangle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \langle ij|\hat{v}|kl\rangle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k \quad (2.32)$$

$$= \sum_{ij} \langle i|\hat{t}|j\rangle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \langle ij|\tilde{v}|kl\rangle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k$$

$$= \sum_{ij} t_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \tilde{v}_{ijkl} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k \quad (2.33)$$

biçiminde yazılır. Her ne kadar Hamiltonyen'in tüm bileşenleri birer simetrik işlemci olsa da fermiyonlara ait cebirsel yapı dikkate alınarak son terim anti-simetrik biçimde yazılmıştır:  $\tilde{v}_{ijkl} = v_{ijkl} - v_{ijlk}$ . Bu eylem işlem kolaylığı sağlayan bir ustalık olarak değerlendirilebilir. Sistemin taban durumuna ait tasvir Schrödinger denkleminin durağan

çözümünden elde edilir:

$$\hat{H} |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle. \quad (2.34)$$

Her bir öz durum Slater durumları kullanılarak ifade edilebilir:

$$|\Psi\rangle = \sum_{i_1 < i_2 < \dots < i_N} c_{i_1, i_2, \dots, i_N} \hat{a}_{i_1}^\dagger \hat{a}_{i_2}^\dagger \dots \hat{a}_{i_N}^\dagger |\Theta\rangle. \quad (2.35)$$

Bu açılımda yer alan Slater durumlarının sayısı, sistemin statik özelliklerinin belirlenmesindeki güçlüğü gözler önüne sermektedir. Ortalama-Alan Yaklaşımı radikal bir çaba üzerine şekillendirilmiştir. Öyle ki, yukarıda ifade edilen toplam yalnızca bir tane Slater durumuyla sınırlandırılmıştır:

$$|\Psi\rangle \longrightarrow |\textcircled{S}\rangle = \hat{a}_{\lambda_1}^\dagger \hat{a}_{\lambda_2}^\dagger \dots \hat{a}_{\lambda_N}^\dagger |\Theta\rangle = \left( \prod_{k=1}^N \hat{a}_{\lambda_k}^\dagger \right) |\Theta\rangle. \quad (2.36)$$

Sistemin bir durumu  $|\Psi\rangle$  yerine en düşük enerjili N tane ortonormal tek-parçacık durumlarından oluşan  $|\textcircled{S}\rangle$  ile temsil edilir. Bu yaklaşıma **Hartree-Fock Yaklaşımı** denir. Bir Slater determinantı etkileşmeyen parçacık durumlarından oluştuğu için kimi zaman bu yaklaşım "bağımsız parçacık yaklaşımı" adıyla anılmaktadır.

(2.36) bağıntısındaki Slater durumu elbette (2.34) denkleminin çözümü değildir. Ancak  $\hat{H}$ 'nin taban durumu,  $\langle \textcircled{S} | \hat{H} | \textcircled{S} \rangle$  enerji değerini minimum yapan  $|\textcircled{S}\rangle$  ya da buna karşılık gelen yoğunluk işlemcisi kullanılarak belirlenir. Rayleigh-Ritz Varyasyon İlkesi (Blaziot ve Ripka 1986) kullanılarak Hamiltonyen'in taban durumu en iyi yaklaşıklıkla bulunabilir (Maruhn vd. 2010). Rayleigh-Ritz varyasyon ilkesine göre enerji fonksiyoneli,

$$E[\Phi] = \frac{\langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle}, \quad (2.37)$$

değişmez bırakan  $|\Phi\rangle$ , Hamiltonyenin  $E$  enerjili bir öz durumudur (Blaziot ve Ripka 1986).  $|\Phi\rangle$  bir deneme dalga durumudur.

Slater determinantı yerine tek-parçacık yoğunluk işlemcisini ( $\hat{\rho}$ ) kullanmak çoğu zaman daha kullanışlıdır. Bir  $|\textcircled{S}\rangle$  durumuna göre tek-parçacık yoğunluk işlemcisi  $\hat{\rho}$  bileşenleri



cinsinden

$$\rho_{ij} \equiv \langle i|\hat{\rho}|j\rangle = \langle \mathbb{S}|\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i|\mathbb{S}\rangle \quad (2.38)$$

şeklinde ifade edilir <sup>1</sup>. Ek olarak yoğunluk işlemcisi (2.36) denklemini dikkate alınarak  $|\mathbb{S}\rangle$  durumunu oluşturan tek-parçacık öz durumlarıyla (orbitaller) ifade edilebilir:

$$\hat{\rho} = \sum_{k=1}^N |\lambda_k\rangle \langle \lambda_k| = \sum_k n_k |\lambda_k\rangle \langle \lambda_k|. \quad (2.39)$$

Dikkatlice incelenecek olursa tek-parçacık yoğunluk işlemcisi, üzerine etkidiği durumu orbital durumları üzerine izdüşüren bir projeksiyon işlemcisidir ( $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$ ). Yani Slater durumu sistemin bir saf durumunu temsil etmektedir. (2.39) bağıntısı açıkça göstermektedir ki bu işlemcinin özdeğerleri ( $n_k$ ) yalnızca 0 ve 1 değerlerini alabilmektedir <sup>2</sup>. İşlemcinin izi ( $Tr\hat{\rho} = N$ ) olduğundan özdeğerlerinin N tanesi 1 geri kalanı 0'dır. Yoğunluk işlemcisinin özvektörleri etiketlendirilirken ilk N tane özvektör, işgal sayısı  $n_k = 1$  olan öz durumlardan seçilir.

## 2.2.2 Statik Ortalama-Alan denklemleri

Hartree-Fock Yaklaşımı'nda sistemin taban durumu, enerjinin en-küçüklenmesiyle (minimization) bulunur. Bu işlem Rayleigh-Ritz Varyasyon İlkesi ile gerçekleştirilebilir:

$$\delta \{ \langle \mathbb{S}|\hat{H}|\mathbb{S}\rangle - E \langle \mathbb{S}|\mathbb{S}\rangle \} = 0. \quad (2.40)$$

İkinci kuantumlama gösteriminde (2.32) ile genel olarak betimlenen bir sistemin enerji fonksiyoneli,  $E[\rho]$ , Wick teoremi (Maruhn vd 2010, Blaizot ve Ripka 1986) kullanılarak şöyle ifade edilir<sup>3</sup>

$$E[\rho] = \langle \mathbb{S}|\hat{H}|\mathbb{S}\rangle = \sum_{ij} \langle i|\hat{t}|j\rangle \rho_{ji} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \langle ij|\tilde{v}|kl\rangle \rho_{ki} \rho_{lj}. \quad (2.41)$$

<sup>1</sup>Yoğunluk işlemcilerine ait detaylı bilgi üçüncü bölümde verilmiştir.

<sup>2</sup>Bozonik sistemlerde böyle bir kısıtlama yoktur.

<sup>3</sup>Wick Teoremi işlemciler arasındaki karmaşık ve uzun işlemleri basitleştiren bir yöntemdir. Tez çalışmasının bütünlüğünü bozmamak amacıyla Wick Teoremi'ne ait okumalar okuyucuya bırakılmıştır. Blaizot ve Ripka (1986), Shavitt ve Bartlett (2009), Maruhn vd (2010) referansı kitaplardan ya da başka kaynaklardan Wick Teoremi öğrenilebilir.

Bu fonksiyoneli deđişmez bırakan tek-parçacık yoğunluk işlemcisini bulmak amaçlanmaktadır:

$$\delta\{E[\rho] - \text{Tr}(\Lambda(\rho^2 - \rho))\} = 0. \quad (2.42)$$

Bir Slater durumuna karşılık gelen tek-parçacık yoğunluk işlemcisi bulmak için Lagrange çarpanları matrisi  $\Lambda$  kullanılmıştır. (2.42) varyasyon denklemi,

$$\text{Tr}(\hat{h} - \hat{\rho}\Lambda - \Lambda\hat{\rho} + \Lambda)\delta\hat{\rho} = 0, \quad (2.43)$$

biçiminde yazılır; burada  $\hat{h}$ , bileşenleri

$$h_{ij} = \langle i|\hat{h}|j\rangle = \frac{\partial E[\rho]}{\partial \rho_{ji}} = \langle i|\hat{T}|j\rangle + \sum_{kl} \langle ik|\tilde{v}|jl\rangle \rho_{lk} \quad (2.44)$$

$$= t_{ij} + \sum_{kl} \tilde{v}_{ikjl} \rho_{lk} \quad (2.45)$$

$$= t_{ij} + \sum_k n_k \tilde{v}_{i\lambda_k j \lambda_k} \quad (2.46)$$

olan tek-parçacık Hartree-Fock Hamiltonyeni'dir.

(2.43) bağıntısı her  $\delta\hat{\rho}$  için sağlanmalıdır. Bu yüzden parantez içindeki terim sıfır olmalıdır:

$$\hat{h} - \hat{\rho}\Lambda - \Lambda\hat{\rho} + \Lambda = 0. \quad (2.47)$$

$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$  koşulu dikkate alınarak bu ifadeden

$$\hat{h}\hat{\rho} - \hat{\rho}\hat{h} = [\hat{h}, \hat{\rho}] = 0 \quad (2.48)$$

sonucu çıkarılır. Bu sonuca göre enerji fonksiyoneli ( $E[\rho]$ ) deđişmez bırakan  $\hat{\rho}$  yoğunluk işlemcisi, Hartree-Fock Hamiltonyeni  $\hat{h}$  ile sıra deđişmektedir.

Enerjinin en-küçüklenmesi eylemi Hartree-Fock Yaklaşımı'nı bir özdeđer denklemine indirger:

$$\hat{h}|\lambda_k\rangle = \varepsilon_k|\lambda_k\rangle. \quad (2.49)$$

Burada  $\varepsilon_k, |\lambda_k\rangle$  ilgili Hartree-Fock (HF) özvektörlerinin (orbitaler) enerjileridir. (2.48) bağıntısına göre hem  $E[\rho]$  hem de  $\hat{\rho}$ 'yi köşegenleştiren ortak tek-parçacık baz vektörleri kümesi ( $\{|\lambda_k\rangle\}$ ) vardır. Bu baz vektörleri kullanılarak Hartree-Fock Hamiltonyeni,

$$\hat{h} = \sum_{k=1}^N \varepsilon_k |\lambda_k\rangle \langle \lambda_k|, \quad (2.50)$$

biçiminde ifade edilebilir. Ayrıca (2.45) denklemleri ile bileşenleri gösterilen Hartree-Fock Hamiltonyeni'ni kısmi iz (partial trace) işlemcisi kullanarak

$$\begin{aligned} \hat{h}[\rho] &= \hat{t} + \text{Tr}_2(\tilde{v}_{12}\hat{\rho}_2), \\ &= \hat{t} + \hat{U}_{HF}[\rho], \end{aligned} \quad (2.51)$$

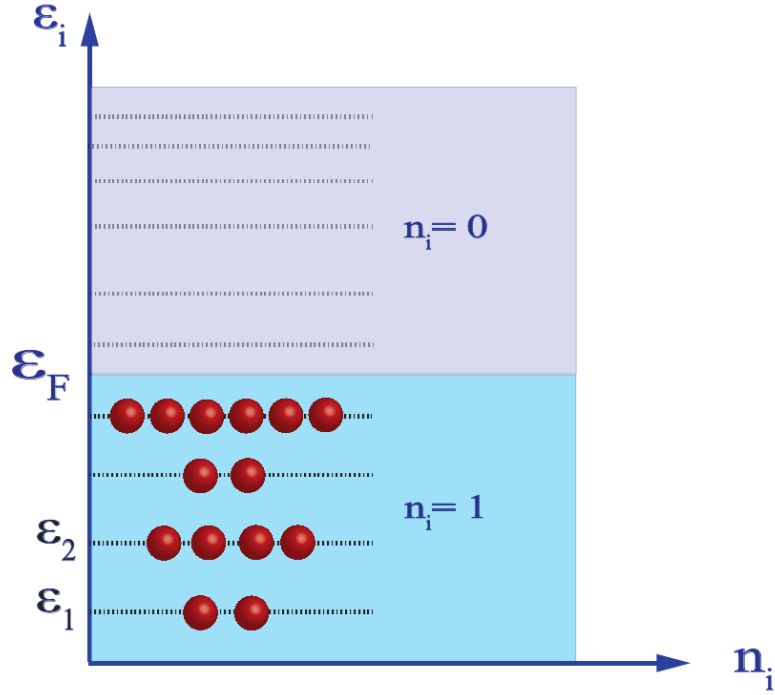
şeklinde yazmak mümkündür.  $\text{Tr}_2(\dots)$  ikinci parçacık durumu üzerinden iz alma işlemini temsil etmektedir<sup>1</sup>. Burada ilk terim Hamiltonyen'in kinetik (ve varsa dış potansiyel) kısmını, ikinci terim ise N parçacığın oluşturduğu ortalama etkileşme potansiyelini temsil etmektedir.  $U_{HF}$  potansiyelinin bu özelliği HF Yaklaşımı'na zenginlik katar. Öyle ki; Hartree-Fock Yaklaşımı'nda parçacıklar birbirleriyle etkileşmezler; ancak her bir parçacık,  $U_{HF}$  ortalama-alan potansiyeli etkisindedir (Bkz. Şekil 2.1). Bu açıdan bakıldığında Hartree-Fock yaklaşımı bir ortalama-alan teorisidir. Bu nedenle "Hartree-Fock Yaklaşıklığı" 'na çoğu zaman "Ortalama-Alan Yaklaşıklığı" da denmektedir.

### 2.2.3 Statik Ortalama-Alan Yaklaşıklığına ilişkin genel değerlendirmeler

Ortalama-alan (Hartree-Fock) Hamiltonyeni ( $\hat{h} = \hat{h}_{MF} = \hat{h}_{HF}$ ), tek-parçacık durumları üzerine etkiyen bir tek-parçacık işlemcisidir. Ortalama-Alan Yaklaşımı ile çok-parçacık Hamiltonyeni'nden bir tek-parçacık Hamiltonyeni türetilmiştir. Bu açıdan bakılırsa Ortalama-Alan Yaklaşımı bir çok-parçacık problemini daha basit bir tek-parçacık problemine indirgeyen etkin bir yaklaşımdır. Bu yaklaşımda tek-parçacık durumları,  $\hat{h}_{MF}$  Hamiltonyeni'nin en düşük enerjili N tane öz durumundan oluşur. Bu öz durumlardan sonuncusunun sahip olduğu enerjiye Fermi Enerjisi denir (Bkz Şekil 2.2)<sup>2</sup>.

<sup>1</sup> $\langle \alpha | \text{Tr}_2(\tilde{v}_{12}\rho_2) | \beta \rangle = \sum_{ij} \langle \alpha i | \tilde{v}_{12} | \beta j \rangle \langle j | \rho | i \rangle$

<sup>2</sup>Bu gösterim (Lacroix 2011) referanslı çalışmadan ilham alınarak çizilmiştir.



Şekil 2.2 Hartree-Fock Yaklaşımı'nın şematik gösterimi. Fermi enerji seviyesine kadar parçacıklar enerji seviyelerine farklı durumlarda nüfuslanmıştır ve durumların işgal sayıları 1 'dir. Fermi seviyesinin üzerinde fiziksel bir parçacık yoktur.

Ortalama-Alan Hamiltonyeni (2.51), tek-parçacık yoğunluk işlemcisinin bir fonksiyoneldir. Bu nedenle Statik Ortalama-Alan Denklemleri (2.48 ya da 2.49) çizgisel-olmayan (nonlinear) denklemlerdir ve yineleme (iteration) yöntemiyle çözülür. Başlangıçta belirlenen deneme tek-parçacık durumları kullanılarak Ortalama-Alan Hamiltonyeni düzenlenir. Hamiltonyen köşegenleştirilerek yeni tek-parçacık durumları elde edilir. Tek-parçacık durumlarının enerjileri kabul edilebilir bir değere yakınsayana kadar bu protokoller yinelenerek öz-tutarlı (self-consistent) biçimde Statik Ortalama-Alan Denklemleri çözülür (Lacroix 2011, EJC2011). Sistemin statik özellikleri böylece belirlenir.

#### 2.2.4 Ortalama-alan enerjisi

Ortalama-Alan Hamiltonyeni'nin Hartree-Fock durumunda beklenen değeri,

$$\langle \mathbb{S} | \hat{h}_{MF} | \mathbb{S} \rangle = \sum_{k=1}^N t_{kk} + \sum_{k,l=1}^N \tilde{v}_{klkl}, \quad (2.52)$$

olmak üzere çok-parçacıklı sistemin gerçek Hamiltonyeni'nin Hartree-Fock durumunda beklenen değeri sistemin Ortalama-Alan Enerjisi'ni verir:

$$\begin{aligned}
 E_{MF} &= \langle \mathbb{S} | \hat{H} | \mathbb{S} \rangle, \\
 &= \sum_{k=1}^N t_{kk} + \frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^N \tilde{v}_{klkl}, \tag{2.53}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{k=1}^N h_{kk} - \frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^N \tilde{v}_{klkl}, \\
 &= \sum_{k=1}^N \varepsilon_k - \frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^N \tilde{v}_{klkl}. \tag{2.54}
 \end{aligned}$$

Bu ifadeden çıkarılabilecek önemli bir sonuç vardır: Ortalama-Alan Enerjisi sadece tek-parçacık durumlarının enerjilerinin toplamından oluşmaz; enerjiye etkileşme potansiyelinin enerjisi ilave bir katkı getirir. Çünkü sistemin gerçek Hamiltonyeni yalnızca tek-parçacık kısmından ibaret değildir; ek olarak iki-parçacık etkileşimlerini de etkin bir biçimde içerir.

(2.52) ve (2.53) denklemlerinde ifade edilen enerjiler arasındaki fark, Slater durumlarına göre ortalama değeri sıfır olan bir fark teriminden kaynaklanmaktadır. Bu fark kalıntı etkileşme (residual interaction) adı verilen bir terimden kaynaklanmaktadır.

### 2.3 Zamana Bağlı Ortalama-Alan Kuramı

Önceki alt-bölümde çok-parçacıklı bir sistemin denge durumunu bağımsız-parçacık yaklaşıklığı çerçevesinde niteleyen Statik Ortalama-Alan Denklemleri'ne yer verilmiştir. Bu bölümde denge durumunda olmayan çok-parçacıklı bir fermiyonik sistemin gelişimi, zamana bağlı ortalama-alan (Time-Dependent Hartree-Fock-TDHF) yaklaşıklığı ile incelenecektir. Tıpkı statik denklemlerde olduğu gibi zamanla gelişen çok-parçacıklı sisteme ait problem bir tek-parçacık problemine indirgenir. Probleme ilişkin farklı varyasyon yöntemleri önerilmiştir (Simenel, 2012). Balian-Vénéroni varyasyon yöntemi tek-parçacık gözlenebilirlerin beklenen değerlerinin zamanla gelişimine ilişkin zenginleştirilebilir sonuçlar vermektedir (Balian ve Vénéroni 1981). Bu alt-bölümde bu varyasyon yöntemi incelenecek; bu yöntem ile TDHF denklemleri irdelenecektir.

### 2.3.1 Balian-Vénéroni varyasyon yöntemi

Balian-Vénéroni yönteminde iki varyasyon değişkeni vardır:  $\hat{D}(t)$  ve  $\hat{\mathcal{O}}(t)$ .  $\hat{D}(t)$  N-parçacıklı bileşik sistemin durumunu bir  $t$  anında niteleyen N-parçacık yoğunluk işlemcisi;  $\hat{\mathcal{O}}(t)$  ise Heisenberg gösteriminde zamana bağlı bir işlemcidir. Balian ve Vénéroni, çalışmalarında (1981) gözlenebilirlerin beklenen değerinin zaman evrimine ilişkin eylem-benzeri (action-like)

$$I = \text{Tr}[\hat{\mathcal{O}}(t_s)\hat{D}(t_s)] - \int_{t_i}^{t_s} dt \text{Tr} \left[ \hat{\mathcal{O}}(t) \left( \hbar \frac{d\hat{D}(t)}{dt} + i[\hat{H}(t), \hat{D}(t)] \right) \right], \quad (2.55)$$

$$= \text{Tr}[\hat{\mathcal{O}}(t_i)\hat{D}(t_i)] + \int_{t_i}^{t_s} dt \text{Tr} \left[ \hat{D}(t) \left( \hbar \frac{d\hat{\mathcal{O}}(t)}{dt} + i[\hat{H}(t), \hat{\mathcal{O}}(t)] \right) \right], \quad (2.56)$$

fonksiyoneli öne sürmüşlerdir <sup>1</sup>. Varyasyon değişkenleri zamanla değiştikçe eylem-benzeri fonksiyonel de değişecektir.  $\hat{\mathcal{O}}(t)$  değişirken (2.55) eylem-benzeri fonksiyoneli değişmez bırakan ( $\delta_{\mathcal{O}}I = 0$ ) dinamik <sup>2</sup>

$$\delta_{\mathcal{O}}I = - \int_{t_i}^{t_s} dt \text{Tr} \left[ \delta_{\mathcal{O}} \hat{\mathcal{O}}(t) \left( \hbar \frac{d\hat{D}(t)}{dt} + i[\hat{H}(t), \hat{D}(t)] \right) \right] = 0, \quad (2.57)$$

koşulunu gerçekleştiren

$$i\hbar \frac{d\hat{D}(t)}{dt} = [\hat{H}(t), \hat{D}(t)], \quad (2.58)$$

Schrödinger-Liouville-von Neumann Denklemi ile belirlenir. Benzer şekilde  $\hat{D}(t)$  'nin varyasyonunda

$$\delta_D I = \int_{t_i}^{t_s} dt \text{Tr} \left[ \delta_D \hat{D}(t) \left( \hbar \frac{d\hat{\mathcal{O}}(t)}{dt} + i[\hat{H}(t), \hat{\mathcal{O}}(t)] \right) \right] = 0, \quad (2.59)$$

değişmezliğini sağlayan dinamik,

$$i\hbar \frac{d\hat{\mathcal{O}}(t)}{dt} = [\hat{H}(t), \hat{\mathcal{O}}(t)], \quad (2.60)$$

Heisenberg gösteriminde Schrödinger denklemi tarafından indüklenir.

<sup>1</sup>(2.55) denklemindeki parantez içindeki ilk integral alındıktan sonra sıra değişme (commutation) bağıntısının iz işlemi altında çevrimsel özelliği kullanılarak (2.56) denklemi elde edilir.

<sup>2</sup>Varyasyona ait iki tane sınır koşulu vardır: (i)  $t_i$  başlangıç anında sistemin durumu  $\hat{D}(t_i) = \hat{D}_0$  tam olarak bilinmektedir, (ii)  $\hat{\mathcal{O}}(t_s)$ ,  $t_s > t_i$  olmak üzere  $t_s$  anında ortalama değeri hesaplanacak gözlenebilirdir.

### 2.3.2 Zamana Bağlı Ortalama-Alan (TDHF) Denklemi

Zamana Bağlı Ortalama-Alan Kuramı, incelenen sistemin durumuna ve gözlenebilirliğe atanan kısıtlamalar üzerine inşa edilen bir yaklaşımdır. Sistemin durumu herhangi bir anda bağımsız parçacık durumu ile temsil edilir. Ayrıca gözlenebilirler yalnızca tek-parçacık gözlenebilirleri ile sınırlandırılır. Bu kısıtlamalar etkisinde varyasyon ilkesi kullanılarak zamana bağlı ortalama-alan denklemleri türetilecektir.

Herhangi bir gözlenebilir olan  $\hat{O}(t)$ 'nin  $t_i \leq t \leq t_s$  anında varyasyonu tek-parçacık işlemcilerinin uzayında kalacak şekilde seçilir <sup>1</sup>;

$$\delta_{\mathcal{O}} \hat{O}(t) \equiv \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{\beta}. \quad (2.61)$$

Balian-Vénéroni eyleminin değişmez kalması için (2.57) denklemi

$$\text{Tr} \left[ \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{\beta} \left( \hbar \frac{d\hat{D}(t)}{dt} + i[\hat{H}(t), \hat{D}(t)] \right) \right] = 0 \quad (2.62)$$

bağıntısını sağlamalıdır. Fermiyonik bir sistemin durumu ortalama-alan çerçevesinde Slater determinantı ile temsil edildiğinden çok-parçacıklı bileşik sistemin bir  $t$  anındaki durumu  $\hat{D}(t) = |\mathbb{S}\rangle\langle\mathbb{S}|$  şeklinde Slater Determinantı ile temsil edilir. (2.38) denklemindeki tanım göz önünde bulundurularak, bir tek-parçacık gözlenebilirinin beklenen değerindeki gelişim şöyle takip edilir:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho_{\beta\alpha}(t) = \langle\mathbb{S}(t)| \left[ \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{\beta}, \hat{H} \right] |\mathbb{S}(t)\rangle. \quad (2.63)$$

Bu sonuç Ehrenfest Teoremi'nin gözlenebilirlerin beklenen değerlerine ilişkin sunduğu tarifin aynısıdır. Hamiltonyeni Denklem (2.33) ile temsil edilen N-parçacıklı bir sistemin tek-parçacık yoğunluk işlemcisinin bileşenlerinin zamanla gelişimi,

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho_{\beta\alpha}(t) = \left[ \hat{h}_{MF}[\rho], \hat{\rho}(t) \right]_{\beta\alpha}, \quad (2.64)$$

denklemleriyle belirlenir. Bu sonuca göre Slater determinantları ve tek-parçacık gözlenebilirleri ile sınırlandırılan varyasyonel uzayda tek-parçacık serbestlik dereceleri için en uygun

<sup>1</sup>Bu gösterim bir tek-parçacık işlemcisinin ikinci kuantumlama dilinde temsilidir.

dinamiği, matris gösterimi

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}(t) = [\hat{h}_{MF}[\rho], \hat{\rho}(t)] \quad (2.65)$$

olan Zamana Bağlı Ortalama-Alan (Zamana Bağlı Hartree-Fock ya da Time Dependent Hartree-Fock) Denklemi betimler (Bkz. EK 1). Önceki bölümde incelenen ve sistemin denge durumunu betimleyen denklem,  $i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}(t) = 0$  özel durumuna karşılık gelen Statik Ortalama-Alan Denklemi'dir.

Ortalama-Alan Kuramı  $\hat{A}^{(1)} = \sum_{ij} A_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j$  genel biçiminde ifade edilen herhangi bir tek-parçacık gözlenebilirinin ortalamasının,  $\langle \hat{A}^{(1)} \rangle = \sum_{ij} A_{ij} \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \rangle = \sum_{ij} A_{ij} \rho_{ji}$ , hem statik hem de dinamik özelliklerinin belirlenmesinde kolay, tutarlı ve elverişli bir çerçeve sunar<sup>1</sup>. Sisteme ait tüm serbestlik derecelerinin oluşturduğu matematiksel uzayın, yalnızca tek-parçacık serbestlik derecelerinin bulunduğu alt-uzaya üzerine izdüşümü bu çerçeveyi oluşturur. Bu çerçevede tek-parçacık serbestlik dereceleri, geri kalan diğerlerinden izole edilmiş durumdadır. Başka bir deyişle iki-, üç-, ..., N-parçacık serbestlik dereceleri ile tek-parçacık serbestlik dereceleri arasındaki bağlaşımlar yok sayılır (ya da ihmal edilir). Ortalama-Alan Kuramı'nda yer almayan bu olgu korelasyon etkileridir.

### 2.3.3 Kalıntı (Residual) etkileşme

Çok-parçacıklı sistemin Hamiltonyeni'ni ayrıştırmak, korelasyonları kontrol eden terimi anlamaya, Ortalama-Alan Kuramı'nın geçerliliğinin ve sınırlarının tartışılmasında fayda sağlar.

Tamlık bağıntısını oluşturan baz vektörleri iki kısma ayrılabilir (Lacroix ve Ayik 2008):

$$\sum_h |h\rangle \langle h| + \sum_p |p\rangle \langle p| \equiv \hat{\rho} + (1 - \hat{\rho}) = 1. \quad (2.66)$$

İlk terimi parçacıklar tarafından işgal edilen (occupied) deşik (hole) durumu vektörleri; ikinci kısmı ise parçacıkların bulunmadığı (unoccupied) parçacık (particle) durumu vektörleri<sup>2</sup>

<sup>1</sup> $\langle \mathbb{S} | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j | \mathbb{S} \rangle = \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \rangle$  gösterimi kullanılmıştır.

<sup>2</sup>Bu kısım okuyucuyu yanıltmamak amacıyla önemle vurgulanmalıdır:  $|p\rangle$ , işgal sayısı  $n_p = 0$  olan parçacık durumlarını temsil etmektedir.



oluşturmaktadır<sup>1</sup>. Tamlik bağıntısının bu gösterimi kullanılarak herhangi bir tek-parçacık durumu

$$\hat{a}_i^\dagger = \sum_h \hat{a}_h^\dagger \langle h|i \rangle + \sum_p \hat{a}_p^\dagger \langle p|i \rangle = \mathbb{1} \quad (2.67)$$

biçiminde yazılabilir. Bu tanımlama Denklem (2.33)' de tanımlanan genel Hamiltonyen'de kullanılarak şu sonuca varılır<sup>2</sup>:

$$\begin{aligned} \hat{H}|\mathbb{S}\rangle &= \left\{ -\frac{1}{2} \text{Tr}_{12}(\tilde{\nu}_{12} \hat{\rho}_1 \hat{\rho}_2) \right. \\ &+ \sum_{hh'} \langle h|\hat{h}_{MF}[\rho]|h'\rangle \hat{a}_h^\dagger \hat{a}_{h'} + \sum_{ph} \langle p|\hat{h}_{MF}[\rho]|h\rangle \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_h \\ &+ \left. \frac{1}{4} \sum_{pp'hh'} \langle pp'|\tilde{\nu}_{12}|hh'\rangle \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_{p'}^\dagger \hat{a}_h \hat{a}_{h'} \right\} |\mathbb{S}\rangle \\ &\equiv \left\{ \hat{H}_{MF} + \hat{V}_{res} \right\} |\mathbb{S}\rangle. \end{aligned} \quad (2.68)$$

Bu sonuca göre çok-parçacıklı bir sistemin genel Hamiltonyeni  $\hat{H} = \hat{H}_{MF} + \hat{V}_{res}$  biçiminde yazılabilir:

$$\hat{H} = \hat{H}_{MF} + \hat{V}_{res}; \quad (2.69)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{MF}[\rho] &= -\frac{1}{2} \text{Tr}_{12}(\tilde{\nu}_{12} \hat{\rho}_1 \hat{\rho}_2) + \sum_{hh'} \langle h|\hat{h}_{MF}[\rho]|h'\rangle \hat{a}_h^\dagger \hat{a}_{h'} + \sum_{ph} \langle p|\hat{h}_{MF}[\rho]|h\rangle \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_h, \\ &= -\frac{1}{2} \text{Tr}_1 \left( \hat{\rho}_1 \text{Tr}_2(\tilde{\nu}_{12} \hat{\rho}_2) \right) + \sum_{ih} \langle i|\hat{h}_{MF}[\rho]|h\rangle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_h, \\ &= -\frac{1}{2} \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{U}_{MF}[\rho]) + \sum_{ih} \langle i|\hat{h}_{MF}[\rho]|h\rangle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_h, \end{aligned} \quad (2.70)$$

$$\hat{V}_{res} = \frac{1}{4} \sum_{pp'hh'} \langle pp'|\tilde{\nu}_{12}|hh'\rangle \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_{p'}^\dagger \hat{a}_h \hat{a}_{h'}. \quad (2.71)$$

$\hat{V}_{res}$  terimi kalıntı (residual) etkileşme terimi olarak adlandırılır. Ortalaması sıfır olan bu terim, 2 parçacık (particle)- 2 deşik (hole) uyarılmış durumlarının üreticisidir (Lacroix ve Ayik 2008).  $\hat{V}_{res}$  işlemcisi korelasyonlardan sorumludur ve iki-parçacık işlemcisi olduğu

<sup>1</sup>Deşik (hole) durumlarını belirtmek için kullanılan  $h$  sembolü ile Ortalama-Alan Hamiltonyeni için kullanılan  $\hat{h}$  sembolü birbirine karıştırılmamalıdır.

<sup>2</sup>Bu bağıntı türetilirken Wick teoremi kullanılabilir. Ayrıca bir Slater determinantına göre  $\hat{a}_h^\dagger|\mathbb{S}\rangle = 0$  ve  $\hat{a}_p|\mathbb{S}\rangle = 0$  olduğu hatırlanmalıdır.

için ortalama-alan teorisinin geçerli olduğu varyasyonel uzayda tanımlı değildir. Bu terim hesaplamalarda kullanılmaz.

### 2.3.4 Thouless Teoremi

Dinamik süreçlerde sistem

$$|\mathbb{S}'\rangle \simeq \exp\left(\frac{dt}{i\hbar}\hat{H}_{MF}[\rho]\right)|\mathbb{S}\rangle \quad (2.72)$$

biçimde evrilir.  $\hat{H}_{MF}[\rho]$  'nin üreticisi olduğu dönüşüm bir Slater determinantını başka bir Slater determinantına dönüştürür. Bu dönüşümü özel kılan, dönüşümün üreticisi  $\hat{H}_{MF}[\rho]$ 'nin bir Hermitelesel tek-parçacık işlemcisi olmasıdır. Thouless Teoremi'ne göre; Hermitelesel bir tek-parçacık işlemcisinin ürettiği üniter dönüşüm, bir Slater durumunu bir başka Slater durumuna götürür (Thouless 1961).

### 2.4 Ortalama-Alan Kuramının Eksiklikleri

Ortalama-Alan Kuramı, çok-parçacıklı sistemin statik ve dinamik özelliklerine, her ne kadar sistemin tam çözümünden daha basit bir çerçeve sunuyor olsa da bu teorisin eksiklikleri vardır.

Ortalama-Alan Kuramı, tek-parçacık gözlenebilirlerinin korelasyonları ve dalgalanmaları için yeterli öngörüye sahip değildir. Korelasyon ve dalgalanmaların iki-parçacık serbestlik derecelerinden oluşması bu sonucun temel sebebidir (EK 2).

Thouless Teoremi'ne göre Ortalama-Alan Kuramı'nda sistemin durumu dinamik boyunca Slater determinantı ile tasvir edilir. Ancak; sistem başlangıçta bir Slater determinantı ile temsil edilse de zaman içinde ortaya çıkan korelasyonlar, sistemi bağımsız-parçacık perspektifinden uzaklaştırmaktadır (Lacroix ve Ayık 2008). Bu nedenle Ortalama-Alan Kuramı zaman geçtikçe geçerliliğini yitirmektedir. Ortalama-Alan Yaklaşımı'nın ömrünü, Hamiltonyen'de korelasyonların üreticisi olan kalıntı (residual) etkileşim teriminin şiddeti

belirlemektedir (Lichtner ve Griffin 1976):

$$\tau_{\text{S}} = \frac{\hbar}{2} \left( \frac{1}{N} \sum_{pp'hh'} |\langle pp' | \tilde{v} | hh' \rangle|^2 \right)^{-1/2}. \quad (2.73)$$

Şiddet arttıkça sistemin gerçek dinamiği kısa zamanda Ortalama-Alan dinamiğinden sapacaktır.

Ortalama-Alan Yaklaşımı'nın çok-parçacık problemlerine sunduğu yalın çerçeveden ayrılmadan eksik parçalarını tamamlayıp, teorinin öngörü kabiliyetini geliştirecek ortalama-alan ötesi yaklaşımlara ihtiyaç duyulmaktadır.

## 2.5 Ortalama-Alan Ötesi Yaklaşımlar

Ortalama-Alan Kuramı, çok-parçacıklı sisteme ait seçilmiş özel serbestlik derecelerini kullanarak karmaşık sistemi basitleştirilmiş bir çerçevede betimler. Bir deneme durum vektörünün (Slater) belirlenip, varyasyon prensibinin uygulandığı bu yaklaşım, tek-parçacık işlemcilerinin kısa zaman gelişimine iyi bir tahmin sunmaktadır. Varyasyon uzayının özel seçiminden kaynaklanmak üzere, bir tek-parçacık işlemcisinin zamanla gelişimini tek-parçacık serbestlik derecelerinin çizgisel olmayan bir fonksiyoneli üretir. Bu açıdan bakıldığında ortalama-alan yaklaşımı sistemin gerçek dinamiğini, tüm serbestlik derecelerinin karmaşık uzayı yerine sadece tek-parçacık serbestlik derecelerinin oluşturduğu alt-uzaya izdüşürerek inceler. Çok-parçacıklı sistemin tüm serbestlik dereceleri bir bileşik sistem olarak düşünülebilir. Tek-parçacık serbestlik dereceleri bu bileşik sistemde dinamiği incelenen sistemi; geri kalanlar ise çevreyi oluşturur. Bileşik sistemde tek-parçacık serbestlik dereceleri ile artakalan serbestlik dereceleri arasındaki bağlaşımlar Ortalama-Alan Teorisi'nin geçerliliğini belirler. Böylesi bir benzetim problemi bir Açık Kuantum Sistem (Open Quantum System) problemine dönüştürür. (Lacroix ve Ayık, 2014).

Önceki bölümde Ortalama-Alan Kuramı'nın eksikliklerinden bahsedilmiştir. Bu eksikliklerin temel sebepleri sisteme ait tek-parçacık yoğunluk işlemcisinin taşıdığı bilgi içeriği ve Ortalama-Alan Teorisinde hesaba katılmayan korelasyon etkileridir. Bu eksiklikleri tamamlama amacıyla günümüze kadar çeşitli ortalama-alan ötesi yaklaşımlar önerilmiştir ve

önerilmeye devam etmektedir. Ortalama-Alan Teorisi'nin geçerliliğini ve çok-parçacık dinamiğine ilişkin tahmin kabiliyetini geliştirmek, tek-parçacık serbestlik dereceleri üzerine diğer serbestlik derecelerinin etkilerini katmakla sağlanır. Bu düşüncüyü hem deterministik hem de stokastik yöntemlerle gerçekleştirmek mümkündür.

Takip eden iki bölümde bu yöntemler incelenecektir: ilk olarak ortalama-alan ötesi deterministik bir yaklaşım olan Zamana Bağlı İndirgenmiş Yoğunluk Matrisi Kuramı (Time-Dependent Reduced Density Matrix Theory-TDRDM) tanıtılacaktır. Sonraki bölümde ise stokastik iki yaklaşım olan Stokastik Ortalama-Alan (Stochastic Mean-Field) ve Stokastik Zamana Bağlı Hartree-Fock (Stochastic Time-Dependent Hartree-Fock-STDHF) yaklaşımlarına yer verilecektir.

## **2.6 Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi**

Bağımsız parçacık tasviri ve ortalama-alan potansiyeli kavramları üzerinde şekillendirilen çeşitli ortalama-alan teorileri vardır. Bunların büyük bir kısmı bu bölümde de incelendiği gibi korelasyon etkilerini içermez. Yoğun madde fiziğinde yaygın olarak kullanılan "Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (Density Functional Theory)" kuramsal temelleri ve içerdiği korelasyon etkileri bağlamında diğer ortalama-alan teorilerinden ayrılır.

DFT, 1960'lı yıllarda çok-elektronlu sistemlerin özelliklerini belirlemek amacıyla önerilmiş, temellerini Hohenberg-Kohn Teoremi (Hohenberg ve Kohn 1964) ve Kohn-Sham denklemlerine (Kohn ve Sham 1965) borçlu olan bir ortalama-alan kuramıdır. DFT ya da bunun zamana bağlı biçimi (Time-Dependent Density Functional Theory-TDDFT), etkileşen fermiyonlar sistemine ait karmaşık problemi bir ortalama-alan potansiyeli içerisinde yer alan bağımsız parçacık problemine dönüştürür. Bu açıdan (TD)Hartree-Fock ortalama-alan yaklaşımı ile benzerlik göstermektedir. Ancak sistemi niteleyen durum vektörünü ya da yoğunluk matrisini elde ederken kullanılan yöntemler dikkate alındığında (TD)HF ile DFT arasında önemli bir fark vardır. (TD)HF yaklaşımında sistemin Hamiltonyeni dikkate alınarak efektif bir tek-parçacık Hamiltonyeni elde edilir. Bu yeni Hamiltonyen kullanılarak sistemin dalga fonksiyonu ya da yoğunluk işlemcisi elde edilir. Sonrasında sistemin durumu ya da gözlenebilirlerin ortalama değerleri bu nicelikler kullanılarak belirlenir. DFT yaklaşımında esas alınan nicelik ise Hamiltonyen değil yoğunluk işlemcisi

$\rho$  ve toplam enerjidir. Hohenberg-Kohn Teoremine göre eğer taban durumu yoğunluğu bilinirse dış potansiyel, sistemin taban durumu ve gözlenebilirlerin ortalama değerleri yoğunluğun bir fonksiyoneli biçiminde belirlenebilir. Taban durumu, yoğunluğun bir fonksiyoneli biçiminde ifade edilen toplam enerjinin en-küçüklenmesiyle (minimization) tayin edilir. Bu işlem için Kohn-Sham denklemleri kullanılır. Elde edilen sonuçlar itibariyle DFT yaklaşımı, Hartree-Fock ortalama-alan yaklaşımından farklı olarak korelasyonların taban durumu ve toplam enerji üzerindeki etkilerini de içermektedir.

Tez kapsamında korelasyon etkilerinin yok sayıldığı ortalama-alan yaklaşımları dikkate alındığı için DFT ve TDDFT'ye ait teknik ve detaylı bilgiler okuyucuya bırakılmıştır (Dreizler ve Gross 1990, Marquez vd 2012, Runge ve Gross 1984).

### 3. ZAMANA BAĞLI İNDİRGENMİŞ YOĞUNLUK MATRİSLERİNİN KURAMI

Etkileşen fermiyonik sistemlerin parçacık sayısıyla üssel biçimde katlanarak artan serbestlik derecelerinin zamanla gelişimlerinin getirdiği hesaplama güçlüğü azaltmanın yollarından birine önceki bölümde yer verilmiştir. İncelenen sisteme ilişkin belirgin serbestlik derecelerini tayin edip, onların zaman içindeki davranışını incelemek bu yollardan biridir. Bu planlamaya uyan özgün örnek, yalnızca tek-parçacık serbestlik derecelerinin dikkate alındığı Hartree-Fock (TDHF) ya da Ortalama Alan (Mean-Field) Teorisi'dir. Tek-parçacık gözlenebilirleri öte-mertebe gözlenebilirler kısımlarına göre sisteme ait daha önemli bilgiler taşır. Örneğin; konum, momentum, parçacık başına enerji, spin, dipol moment, kütle merkezi, ... gibi sisteme ait özellikler tek-parçacık serbestlik dereceleri kullanılarak belirlenebilir.

Ortalama-alan ötesi yaklaşımlar için geliştirilebilecek yaygın strateji, önem mertebelerine göre serbestlik dereceleri arasında bir hiyerarşi belirlemek ve bu hiyerarşinin en alt basamağından başlayarak sadece belirli mertebe serbestlik derecelerinin kinematik denklemlerini çözmektir. Bu açıdan bakıldığında sadece tek-parçacık serbestlik derecelerinin dinamiğini temel alan Ortalama-Alan Yaklaşımı birinci mertebe bir yaklaşıklıkta. Tek- ve iki-parçacık serbestlik derecelerini dinamiğe eş zamanlı dahil etmek ortalama-alan ötesi başvurulabilecek en temel yöntemdir. Artan mertebeli serbestlik derecelerinin zamanla değişimini ve bunlar arasındaki bağlaşımları Bogoliubov-Born-Green-Kirkwood-Yvon (BBGKY) hiyerarşi denklemleri belirler. Bu hiyerarşi denklemleri Zamana-Bağlı İndirgenmiş Yoğunluk Matrisi (Time-Dependent Reduced Density Matrix) Teorisi adıyla bilinen çeşitlendirilebilir yaklaşımlar için bir kılavuz görevi görmektedir (Lacroix vd. 2004).

Tez çalışmasının bu bölümünde BBGKY hiyerarşi denklemlerine, zamana bağlı indirgenmiş yoğunluk işlemcilerinin kuramsal temellerine ve bu kuramın uygulamalarına yer verilecektir.

#### 3.1 Çok-Parçacıklı Sistemlerde Yoğunluk İşlemcileri

Çok-parçacıklı sistemlerin durumlarını dalga vektörlerinden daha genel çerçevede temsil etme imkanı sunan yoğunluk işlemcileri bu alt-bölümde incelenecektir. Tez çalışmasının tamamında iki istisna durum haricinde herhangi mertebeden bir yoğunluk işlemcisini  $\hat{R}_{1,\dots,k}$

sembolü temsil etmektedir. Özel olarak tek-parçacık ve N-parçacık yoğunluk işlemcileri için sırasıyla  $\hat{R}_1 \equiv \hat{\rho}$  ve  $\hat{R}_{1\dots N} \equiv \hat{D}$  sembolleri kullanılacaktır.

N tane parçacıklardan oluşan sistemin durumu N-parçacık yoğunluk işlemcisi ile temsil edilir:

$$\hat{D} \equiv \hat{R}_{1\dots N} = \sum_{i=1}^M P_i^{(N)} |\Psi^{(i)}\rangle \langle \Psi^{(i)}|. \quad (3.1)$$

$\{|\Psi^{(i)}\rangle\}_{i=1}^M$ , elemanlarını N-parçacıklı sistemin mümkün kuantum durumlarının oluşturduğu tam ortonormal baz kümesidir:

$$\langle \Psi^{(i)} | \Psi^{(j)} \rangle = \delta_{i,j}, \quad (3.2)$$

$$\sum_{i=1}^M |\Psi^{(i)}\rangle \langle \Psi^{(i)}| = \hat{1}. \quad (3.3)$$

Sistem, mümkün durumlar içinde  $P_i^{(N)}$  olasılıkla  $|\Psi^{(i)}\rangle$  durumunda bulunmaktadır:

$$P_i^{(N)} \geq 0, \quad (3.4)$$

$$\sum_{i=1}^M P_i^{(N)} = 1. \quad (3.5)$$

Yoğunluk işlemcisi aşağıdaki özelliklere sahiptir:

- $\hat{D}$ , sistemin N-parçacık durumlarının içerdiği kuantum mekaniksel tüm bilgiyi depolar.
- Bileşik sistem bir saf durum ise ( $|\Psi^{(\alpha)}\rangle$ ) bu durumda  $P_i^{(N)} = \delta_{i\alpha}$ 'dir. Sistemin durumu tam olarak bilinmektedir. Sistemin N-parçacık yoğunluk işlemcisi bu durumun bir izdüşüm işlemcisidir. Saf olmayan durumda ise yoğunluk işlemcisi sistemin istatistiksel olarak hangi olasılıkla hangi durumda bulunabileceği bilgisini taşır.
- $\text{Tr}_{1\dots N} \hat{D} = 1$ .
- Yoğunluk işlemcisi Hermiteseldir.
- Yoğunluk işlemcisi pozitifdir; yani her durumda beklenen değeri pozitif bir reel sayıdır.

- Yoğunluk işlemcisinin belirlenen herhangi bir bazdaki matris temsili  $\langle \alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N | \hat{D} | \alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N \rangle$  biçiminde gösterilir. Matrisin bu temsilde köşegen elemanları bileşik sistemi i.nci baz durumu ile temsil edilen durumda bulunma olasılığını verir. Köşegen dışı elemanlar ise farklı iki durum arası geçiş olasılığı bilgilerini taşır.
- Bir N-parçacık gözlenebilirinin beklenen değeri için aşağıdaki bağıntı geçerlidir:

$$\langle \hat{O}_{1\dots N} \rangle = \text{Tr}_{1\dots N}(\hat{O}_{1\dots N} \hat{D}). \quad (3.6)$$

- N-parçacıklı sistemin dinamik özellikleri, N-parçacıklı Schrödinger denklemi,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi^{(i)}\rangle = \hat{H} |\Psi^{(i)}\rangle, \quad (3.7)$$

ya da eşdeğeri,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{D} = [\hat{H}, \hat{D}], \quad (3.8)$$

Schrödinger-Liouville-von Neumann denklemi ile belirlenir.

### 3.1.1 İndirgenmiş yoğunluk işlemcileri

N-parçacık yoğunluk işlemcisi yerine daha küçük boyutlu matrislerle işlem yaparak problemi basitleştirmek yaygın bir yöntemdir. Kuantum çok-parçacık problemleri incelenirken kullanılan bu yöntemde indirgenmiş yoğunluk işlemcileri kullanılır. Kuramsal temelleri 1927 yılında von-Neumann tarafından atılan indirgenmiş yoğunluk işlemcileri (Reduced Density Matrix-RDM), bileşik sistemi oluşturan alt-sistemlerin özelliklerini niteleyen matematiksel nesnelere dir.

N-parçacıklı bir sistemde k-parçacık indirgenmiş yoğunluk işlemcisi

$$\hat{R}_{1\dots k} = C_k^N \text{Tr}_{k+1\dots N} \hat{D} \quad (3.9)$$



biçiminde tanımlıdır.  $C_k^N$ , N tane parçacık içinden k tanesini seçmenin farklı yollarının sayısını tanımlayan permütasyon katsayısıdır:  $C_k^N = \frac{N!}{(N-k)!}$ . N-parçacık yoğunluk işlemcisi  $\hat{D}$ , 1'e boylandırılmış olduğu için k-parçacık yoğunluk işlemcisinin k-parçacık serbestlik dereceleri üzerinden izi şöyledir:

$$\text{Tr}_{1\dots k} \hat{R}_{1\dots k} = C_k^N = \frac{N!}{(N-k)!}. \quad (3.10)$$

Özel olarak, tek- ve iki-parçacık indirgenmiş yoğunluk işlemcilerinin temsilleri ve bunların izleri aşağıdaki biçimde ifade edilir:

- Tek-parçacık yoğunluk işlemcisi:

$$\hat{\rho} \equiv \hat{R}_1 = N \text{Tr}_{2\dots N} \hat{D}, \quad (3.11)$$

$$\text{Tr}_1 \hat{\rho} = N. \quad (3.12)$$

- İki-parçacık indirgenmiş yoğunluk işlemcisi:

$$\hat{R}_{12} = N(N-1) \text{Tr}_{3\dots N} \hat{D}, \quad (3.13)$$

$$\text{Tr}_{12} \hat{R}_{12} = N(N-1). \quad (3.14)$$

Farklı iki indirgenmiş yoğunluk işlemcisi (3.9) ve (3.10) bağıntıları kullanılarak ilişkilendirilebilir. Örneğin ikinci parçacıkların serbestlik dereceleri üzerinden iz alarak iki-parçacık yoğunluk işlemcisinden tek-parçacık yoğunluk işlemcisi elde edilir:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{(N-1)} \text{Tr}_2 \hat{R}_{12}. \quad (3.15)$$

Herhangi bir k-parçacık gözlenebilirinin ortalama değeri aşağıdaki bağıntı kullanılarak hesaplanabilir:

$$\langle \mathcal{O}_{1\dots k} \rangle = \frac{1}{k!} \text{Tr}_{1\dots k} \hat{\mathcal{O}}_{1\dots k} \hat{R}_{1\dots k}. \quad (3.16)$$

Matris elementleri aşağıda gösterilen tek- ve iki-parçacık indirgenmiş yoğunluk işlemcilerini köşegenleştirerek doğal bazlarında yazmak mümkündür:

$$\begin{aligned}\langle i_1|\hat{\rho}|j_1\rangle &= N \sum_{i_2i_3\dots i_N} \langle i_1i_2\dots i_N|\hat{D}|j_1i_2\dots i_N\rangle, \\ \hat{\rho} &= \sum_i NP_i^{(1)}|n_i\rangle\langle n_i|,\end{aligned}\quad (3.17)$$

$$= \sum_i n_i|n_i\rangle\langle n_i|,\quad (3.18)$$

$$\begin{aligned}\langle i_1i_2|\hat{D}|j_1j_2\rangle &= N(N-1) \sum_{i_3\dots i_N} \langle i_1i_2i_3\dots i_N|\hat{R}_{12}|j_1j_2i_3\dots i_N\rangle, \\ \hat{R}_{12} &= \sum_i N(N-1)P_i^{(2)}|g_i\rangle\langle g_i|,\end{aligned}\quad (3.19)$$

$$= \sum_i g_i|g_i\rangle\langle g_i|.\quad (3.20)$$

Bu durumda indirgenmiş yoğunluk işlemcilerinin köşegen elemanları olasılık değil, "i" ile etiketlenirilmiş durumu işgal eden parçacık sayısı (occupation number) olarak yorumlanır. Yukarıdaki yazımda kullanılan  $|i_1i_2\dots i_N\rangle$  terimi, N-parçacık durumunu temsil etmektedir. Tez çalışmasında özdeş fermiyonlardan oluşan çok-parçacıklı sistemler ele alınmaktadır. Bu nedenle  $|i_1i_2\dots i_N\rangle \rightarrow |\textcircled{S}\rangle$  bir Slater durumudur. Yukarıdaki genellemeler bozonik sistemler için de yapılabilir.

### 3.2 BBGKY Hiyerarşi Denklemleri

N-parçacıklı fermiyonik bir sistemin zaman içerisindeki davranışı,

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}_1 &= [\hat{t}_1, \hat{\rho}_1] + \frac{1}{2} \text{Tr}_2 [\tilde{v}_{12}, \hat{R}_{12}], \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{R}_{12} &= \left[ \hat{t}_1 + \hat{t}_2 + \frac{1}{2} \tilde{v}_{12}, \hat{R}_{12} \right] + \frac{1}{2} \text{Tr}_3 [\tilde{v}_{13} + \tilde{v}_{23}, \hat{R}_{123}], \\ &\vdots = \vdots, \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{R}_{1\dots k} &= \left[ \sum_{i=1}^k (\hat{t}_i + \sum_{j<i=1}^k \tilde{v}_{ij}), \hat{R}_{1\dots k} \right] + \sum_{i=1}^k \text{Tr}_{k+1} ([\tilde{v}_{ik+1}, \hat{R}_{1\dots k+1}]), \\ &\vdots = \vdots,\end{aligned}\quad (3.21)$$

biçiminde ifade edilen, Bogoliubov-Born-Green-Kirkwood-Yvon (BBGKY) hiyerarşi denklemleri olarak adlandırılan, farklı mertebeli serbestlik derecelerinin zamanla gelişimlerini ve birbirleriyle bağlaşımlarını sistematik bir biçimde sunan denklemler takımıyla

belirlenir (Bogoliubov 1946, Born ve Green 1946, Kirkwood 1946). Denklemlerde yer alan  $\hat{\rho}_1$ ,  $\hat{R}_{12}$ ,  $\hat{R}_{1\dots k}$  terimleri sırasıyla tek-parçacık, iki-parçacık, k-parçacık indirgenmiş yoğunluk işlemcileridir (reduced density matrices). Alt indisler, işlemcilerin hangi parçacık durumu üzerine etki edeceğini göstermektedir. Örneğin;  $\hat{t}_1$  birinci parçacığa ait kinetik terimi,  $\hat{v}_{12}$  eş zamanlı hem birinci hem de ikinci parçacığa ait anti-simetrik etkileşme potansiyelini temsil eder. Bağlaşımlı BBGKY denklemlerini çözmek, N-parçacıklı sistemin Schrödinger denklemini çözmeye eşdeğerdir. Mertebelerine göre ayrıştırılmış denklemlerin böylesi bir yazımı, dinamik süreçlerin analizini kolaylaştırdığı gibi; önerilebilecek yaklaşık yöntemler için bir başlangıç noktası niteliğindedir.

### 3.3 Zamana Bağlı Yoğunluk Matrisi Teorisi

İndirgenmiş yoğunluk işlemcilerinin dinamik denklemlerinin bir hiyerarşik sıra içinde değerlendirilmesi, çok-parçacıklı sistemin özelliklerinin yeterli mertebeden yoğunluk işlemcileri ile belirlenebildiği durumlarda kolaylık sağlar. Başka bir deyişle BBGKY denklemlerini k.ncı mertebede budamak (truncate) ve dinamiği k tane bağlaşımlı denklemlerle ifade etmek k.ncı mertebeden Zamana Bağlı İndirgenmiş Yoğunluk Matrisi Teorisi (TDRDM)'nin temelini oluşturur. Bu teoride tek-parçacık yoğunluk işlemcisi iki-parçacık; iki-parçacık yoğunluk işlemcisi üç-parçacık, vb. serbestlik dereceleri ile bağlaşımlıdır<sup>1</sup>. k.ncı mertebede budanan BBGKY denklemlerinde k-parçacık yoğunluk işlemcisinin dinamiğini belirleyen k+1-mertebeli işlemciye atanan çeşitli kısıtlamalar ile k-mertebeli TDRDM kapalı (closed) kinematik denklemler elde edilir. Bu yaklaşımların bazıları şunlardır (Bonitz 2016):

- Tüm korelasyonları ihmal etmek ( $\hat{C}_{12} = 0$ ,  $\hat{C}_{123} = 0$ , ... = 0). Bu yaklaşım ile doğrudan ortalama-alan denklemleri elde edilir.
- Üç-ve üstü-parçacık korelasyonlarını ihmal edip iki-parçacık korelasyon etkilerini dinamiğe katmak ( $\hat{C}_{123} = 0$ ,  $\hat{C}_{1234} = 0$ , ... = 0).
- Dört-ve üstü-parçacık korelasyonlarını ihmal edip iki- ve üç-parçacık korelasyonlarını hesaba katmak. Yapılan çalışmaların bir kısmında üç-parçacık korelasyon

<sup>1</sup>Çalışmanın geri kalanında "İndirgenmiş yoğunluk işlemcisi" yerine "yoğunluk işlemcisi" deyişi kullanılacaktır.

matrislerinin iki-parçacık korelasyon matrislerinin çarpımı biçiminde ele alındığı örneklere rastlanmaktadır.

Üç-parçacık ve ötesi korelasyon etkilerinin yok sayıldığı ( $\hat{C}_{123} = 0$ ,  $\hat{C}_{1234} = 0$ , ... = 0) ve üç-parçacık indirgenmiş yoğunluk işlemcisinin (3RDM) iki-parçacık indirgenmiş yoğunluk işlemcilerinin bir fonksiyoneli olarak yeniden yapılandırıldığı özel durumda ilk iki BBGKY bağıntısı **Zamana-Bağlı Yoğunluk Matrisi** (Time-Dependent Density Matrix-TDDM) hareket denklemlerini verir. TDDM hareket denklemleri aşağıdaki biçimde ifade edilmektedir: <sup>1</sup>

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}_1 = \left[ \hat{h}_1[\rho], \hat{\rho}_1 \right] + \frac{1}{2} \text{Tr}_2 \left[ \tilde{v}_{12}, \hat{C}_{12} \right], \quad (3.22)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{C}_{12} = \left[ \hat{h}_1[\rho] + \hat{h}_2[\rho], \hat{C}_{12} \right] + \hat{\mathcal{B}}_{12} + \hat{\mathcal{P}}_{12} + \hat{\mathcal{H}}_{12}. \quad (3.23)$$

$\hat{\mathcal{B}}_{12}$  önceki bölümde gösterilen 2p-2h kalıntı etkileşme (residual interaction) potansiyelini içeren Born terimidir. Bu terim nükleer fizikte çarpışma (collision) etkilerinden sorumludur.  $\hat{\mathcal{P}}_{12}$  çiftlenim (pairing) etkilerini dinamiğe kazandırır. Son olarak  $\hat{\mathcal{H}}_{12}$  yüksek mertebeden p-p ve h-h korelasyonlarını içeren terimdir (Lacroix ve Ayik 2014). Sırasıyla bu terimlerin açık ifadeleri şöyledir:

$$\hat{\mathcal{B}}_{12} = \frac{1}{2} \left\{ (\hat{1} - \hat{\rho}_1)(\hat{1} - \hat{\rho}_2) \tilde{v}_{12} \hat{\rho}_1 \hat{\rho}_2 - \hat{\rho}_1 \hat{\rho}_2 \tilde{v}_{12} (\hat{1} - \hat{\rho}_1)(\hat{1} - \hat{\rho}_2) \right\}, \quad (3.24)$$

$$\hat{\mathcal{P}}_{12} = \frac{1}{2} \left\{ (\hat{1} - \hat{\rho}_1 - \hat{\rho}_2) \tilde{v}_{12} \hat{C}_{12} - \hat{C}_{12} \tilde{v}_{12} (\hat{1} - \hat{\rho}_1 - \hat{\rho}_2) \right\}, \quad (3.25)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{12} = \text{Tr}_3 \left[ \tilde{v}_{13}, (\hat{1} - \hat{P}_{13}) \hat{\rho}_1 \hat{C}_{23} (\hat{1} - \hat{P}_{12}) \right] + \text{Tr}_3 \left[ \tilde{v}_{23}, (\hat{1} - \hat{P}_{23}) \hat{\rho}_1 \hat{C}_{23} (\hat{1} - \hat{P}_{12}) \right]. \quad (3.26)$$

Ortalama-alan (ya da TDHF) çerçevesinde kalarak çok-parçacık problemlerine çözüm aramak genellikle yetersiz kalmaktadır. Ortalama-alan düzeyinde eksik kalan korelasyon etkilerini dinamiğe katan TDDM yaklaşımının Ortalama-Alan Yaklaşımı'ndan daha iyi

<sup>1</sup> $\hat{P}_{ij}$  değiş-tokuş işlemcisi olmak üzere iki- ve üç- parçacık indirgenmiş yoğunluk işlemcileri için aşağıdaki ifadeler geçerlidir:

$$\begin{aligned} \hat{R}_{12} &= \hat{\rho}_1 \hat{\rho}_2 (\hat{1} - \hat{P}_{12}) + \hat{C}_{12} \\ \hat{R}_{123} &= \hat{C}_{123} + \hat{\rho}_1 \hat{\rho}_2 \hat{\rho}_3 (1 - \hat{P}_{12}) (\hat{1} - \hat{P}_{13} - \hat{P}_{23}) \\ &+ \hat{\rho}_1 \hat{C}_{23} (\hat{1} - \hat{P}_{12} - \hat{P}_{13}) + \hat{\rho}_2 \hat{C}_{13} (\hat{1} - \hat{P}_{21} - \hat{P}_{23}) + \hat{\rho}_3 \hat{C}_{12} (\hat{1} - \hat{P}_{31} - \hat{P}_{32}). \end{aligned}$$

sonular vereceđi aıktır. Fiziđin diđer alt disiplinlerinde TDDM teorisi oka kullanılsa da teorisinin nkleer ok-paracık problemlerine uygulamaları TDHF kadar yaygın deđildir. Bunun bařlıca sebebi, korelasyon matrislerinin boyutlarıdır. Elementleri zamanla deđiřim gsteren byk boyutlu bu matrislerin ierdiđi bilgiyi iřleme ve depolama iři, en kk mertebeli korelasyon matrisleri ( $\hat{C}_{12}$ ) iin dahi gtr. Buna rađmen TDDM yaklařımının nkleer ok-paracık problemlerine uygulamaları vardır (Tohyama 1988, De Blasio vd 1992, Luo vd 1999, Tohyama ve Umar 2001, Tohyama ve Umar 2002a, Tohyama ve Umar 2002b, Assie vd 2009, Tohyama 2015, Tohyama ve Schuck 2014, 2017, 2019, vb...).

Hem Klasik hem de Kuantum Mekaniđi'nde incelenen sistemin Hamiltonyeni'nin sahip olduđu simetriler ile korunumlu nicelikler arasında sıkı bir iliři olduđu bilinmektedir. Hamiltonyen'in simetrisi sistemi daha az sayıda serbestlik dereceleri kullanarak inceleme imkanı verirken, korunumlu nicelikler karmařık sistemlerin statik ve dinamik zellikleri incelenirken bir kontrol anahtarı vazifesi grmektedir. TDDM yaklařımında BBGKY hiyerarři denklemlerini ikinci mertebede kesmek ve st mertebeli terimleri dođrudan dıřarılacak sistemin isel simetrilerini kırmaktadır. Kırılan simetri sebebiyle BBGKY denklemlerinde korunan toplam enerji ve paracık sayısı TDDM dinamiđinde korunmaz. Ayrıca simetri kırılması sonucunda TDDM uygulamalarının uzun zaman lekli dinamiđinde ıraksaklık ve fiziksel olmayan sonular ortaya ıkmaktadır. Simetrisi TDDM dinamiđine tekrar kazandırmak iin -paracık korelasyon etkileri iin uygun yapılandırma fonksiyoneli (reconstruction functional) tayin edilmelidir. Simetrisi dinamiđe kazandırmak, uzun zaman leđinde ortaya ıkan fiziksel olmayan etkileri ortadan kaldırmak ve TDDM yaklařımının tahmin kabiliyetini geliřtirmek iin eřitli reeteler nerilmiř; bu neriler řematik ve gereki sistemlere uygulanmıřtır (Shun-jin ve Cassing 1985, Schmitt vd 1990, Cassing ve Pfitzner 1992, Yasuda ve Nakatsuji 1997, Mazziotti 2000, Tohyama ve Schuck 2010, 2014, 2017, 2019, Akbari vd 2012). Yakın zamanda yapılmıř ilgi ekici iki ncl alıřmada TDDM'in yukarıda deđinilen problemlerine tam olarak zm getirdiđi iddia edilen saflařtırma (purification) tekniđi tanıtılmıřtır (Lackner vd 2015, 2017). ok-paracık problemlerine artan sayıda uygulamaları ile bu teknik olgunlařtırılmayı beklemektedir.

## 4. ORTALAMA-ALAN ÖTESİ STOKASTİK YAKLAŞIMLAR

Tez kapsamında ortalama-alan ötesi farklı iki yaklaşım "Stokastik Ortalama-Alan Yaklaşımı" ve "Stokastik Zamana Bağlı Hartree-Fock Yaklaşımı" başlıklarıyla bu bölümde incelenecektir.

### 4.1 Stokastik Ortalama-Alan Yaklaşımı

Ortalama-Alan ya da Zamana Bağlı Hartree-Fock (TDHF) Yaklaşımı'nın genel özellikleri ikinci bölümde sunulmuştur. Tüm korelasyon etkilerini yok sayarak BBGKY dinamik denklemlerini birinci mertebeden budamanın TDHF ile eşdeğer hareket teorisi sunduğu üçüncü bölümde gösterilmiştir. Ortalama-Alan Yaklaşımı çok parçacık problemlerine iyi tanımlanmış bir başlangıç durumu ile başlayan ve bir tek durumda son bulan bir yaklaşıklık çerçevesi sunar (Lacroix ve Ayık 2014). Tek-parçacık gözlenebilirlerinin zaman içindeki ortalama değerlerine ilişkin uygun tasvir sunan Ortalama-Alan Teorisi'nde dalgalanma (fluctuation) etkileri genellikle eksik kalmaktadır. Dalgalanmaların yaklaşık etkilerini TDHF çerçevesinde kalarak dinamiğe kazandırma amacıyla 2008 yılında Ayık tarafından Stokastik Ortalama-Alan (Stochastic Mean Field- SMF) Yaklaşımı önerilmiştir.

#### 4.1.1 Kuramsal temelleri

Stokastik Ortalama-Alan Yaklaşımı şu temel düşünce üzerine geliştirilmiştir: incelenen sistemlerin kuantum mekaniksel davranışı, uygun belirlenen farklı başlangıç durumlarının klasik topluluğu ile incelenebilir. Ballentine'a göre bir kuantum durumunun klasik limiti tek bir yörünge değil, yörüngelerin bir topluluğudur (Ballentine 1970, Ballentine vd 1994).

Çok-parçacıklı sistemin tüm serbestlik derecelerinin bir alt-kümesini oluşturan tek-parçacık serbestlik dereceleri,  $\{\hat{A}_i\}$  tek-parçacık gözlenebilirlerine ait bilgileri içerir. Ortalama-Alan Yaklaşımı çerçevesinde, incelenen çok-parçacıklı sistemin başlangıç durumu Slater determinantının ya da ona karşılık gelen N-parçacık yoğunluk işlemcisinin ( $\hat{D}(0)$ ) bilindiğini varsayalım. Sistemin tek-parçacık durumlarına ait tüm bilgi tek-parçacık indirgenmiş

yoğunluk işlemcisinde kodlanmıştır. Tek-parçacık gözlenebilirlerinin başlangıç durumlarına ait ortalama değer ve kuantal dalgalanmalar sırasıyla

$$\langle \hat{A}_i(0) \rangle = \text{Tr}(\hat{A}_i \hat{\rho}(0)), \quad (4.1)$$

$$\sigma_{ij}(0) = \langle \hat{A}_i \hat{A}_j \rangle - \langle \hat{A}_i \rangle \langle \hat{A}_j \rangle = \frac{1}{2} \left( \langle \hat{A}_i \hat{A}_j \rangle + \langle \hat{A}_j \hat{A}_i \rangle \right) - \langle \hat{A}_i \rangle \langle \hat{A}_j \rangle \quad (4.2)$$

biçiminde gösterilir. Ortalama-Alan Yaklaşımı'nda korelasyon etkileri ihmal edildiği için iki gözlenebilirin çarpımlarının ortalama değeri her birinin ortalama değerlerinin çarpımına eşdeğerdir:

$$\langle \hat{A}_i \hat{A}_j \rangle \approx \langle \hat{A}_i \rangle \langle \hat{A}_j \rangle \quad (4.3)$$

Ortalama-Alan Yaklaşımı'nın sanki-klasik (quasi-classical) bu doğası sebebiyle başlangıç durumu kuantal dalgalanmaları ortalama-alan teorisinde yer almaz ( $\sigma_{ij}(0) = 0$ ). SMF, ortalama-alan teorisinin bu eksikliğini gidermek için önerilmiş bir yaklaşımdır. Bu yaklaşımda,  $\{\hat{A}_i^\lambda(0)\}$  gözlenebilirlerinin istatistiksel topluluğu dikkate alınır.  $\lambda$  bu topluluktaki her bir olayı (event) ya da örneklemini (sample) etiketlemektedir. Topluluğun her elemanı SMF yaklaşımına göre

$$\overline{\hat{A}_i^\lambda(0)} = \langle \hat{A}_i(0) \rangle, \quad (4.4)$$

$$\overline{\hat{A}_i^\lambda(0) \hat{A}_j^\lambda(0)} - \overline{\hat{A}_i^\lambda(0)} \overline{\hat{A}_j^\lambda(0)} = \sigma_{ij}(0) \quad (4.5)$$

koşulunu sağlayacak biçimde seçilen birer klasik değişkendir. Üst-çizgi  $\mathcal{N}$  tane olay üzerinden alınan klasik topluluk ortalamasını temsil etmektedir. Yukarıdaki yapı  $\{\hat{A}_i^\lambda(0)\}$  tek-parçacık gözlenebilirlerini özelleştiren yoğunluk işlemcileri dikkate alınarak genişletilebilir.  $\{\hat{A}_i^\lambda(0)\}$  kümesinin bir elemanını dikkate alalım. Topluluktaki her bir olay için  $\hat{A}$  tek-parçacık gözlenebilirinin beklenen değeri şöyle ifade edilir:

$$\langle \hat{A} \rangle^\lambda = \text{Tr}(\hat{\rho}^\lambda \hat{A}). \quad (4.6)$$

$\hat{\rho}^\lambda$  her bir olay için tanımlanan ve kendine has ortalama-alan dinamiğine sahip,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}^\lambda = [\hat{h}[\hat{\rho}^\lambda], \hat{\rho}^\lambda], \quad (4.7)$$

stokastik tek-parçacık yoğunluk işlemcisidir. SMF yaklaşımında  $\hat{A}^\lambda$  değerlerinin istatistiksel ortalaması şöyledir:

$$\begin{aligned}\overline{\langle \hat{A} \rangle^\lambda} &= \text{Tr}(\overline{\hat{\rho}^\lambda} \hat{A}) \\ &= \sum_{ij} \overline{\rho_{ij}^\lambda} A_{ji}.\end{aligned}\quad (4.8)$$

$\overline{\rho_{ij}^\lambda}$ , stokastik yoğunluk işlemcilerinin topluluk ortalamasıdır:

$$\overline{\rho_{ij}^\lambda} = \lim_{\mathcal{N} \rightarrow \infty} \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\lambda=1}^{\mathcal{N}} \rho_{ij}^\lambda. \quad (4.9)$$

SMF yaklaşımına göre tek-cisim gözlenebilirinin ikinci mertebeden merkezi momenti (varyans),  $\delta \hat{\rho}^\lambda = \hat{\rho}^\lambda - \overline{\hat{\rho}^\lambda}$  olmak üzere

$$\begin{aligned}\sigma_A^{(2)} &= \overline{(\langle \hat{A} \rangle^\lambda - \overline{\langle \hat{A} \rangle^\lambda})^2} \\ &= \overline{[\text{Tr}(\delta \hat{\rho}^\lambda \hat{A})]^2} \\ &= \sum_{ijkl} \overline{\delta \rho_{ij}^\lambda \delta \rho_{kl}^\lambda} A_{ji} A_{lk}\end{aligned}\quad (4.10)$$

şeklinde tanımlanır. Başlangıç durumu niteleyen stokastik matrislerin bileşenleri,  $\rho_{ij}^\lambda(0)$ , ortalama ve ikinci mertebeden merkezi momenti değerleri,  $\rho(0)$  matrisinin başlangıç ortalama değer ve varyans değerleri ile SMF yaklaşımında karşı gelen başlangıç değerleri örtüşecek şekilde seçilir.

(4.1) denkleminde gösterilen kuantal ortalama ve (4.2) denkleminde ifade edilen ikinci mertebeden merkezi moment değerleri uygun bir temsil seçilerek yeniden ifade edilebilir. Başlangıç durumu yoğunluk işlemcisini köşegenleştiren,  $\langle i | \hat{\rho}(0) | j \rangle = n_i \delta_{ij}$ , öz-vektörler (doğal bazlar),  $\{|i\rangle\}$ , kullanılarak  $A$  tek-parçacık işlemcisinin başlangıç durumu ortalama değeri ve ikinci mertebeden merkezi momenti (varyans) sırasıyla aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$\langle \hat{A}(0) \rangle = \sum_i n_i A_{ii}, \quad (4.11)$$

$$\langle \hat{A}^2(0) \rangle - \langle \hat{A}(0) \rangle^2 = \frac{1}{2} \sum_{ij} [n_i(1-n_j) + n_j(1-n_i)] A_{ji} A_{ij}. \quad (4.12)$$



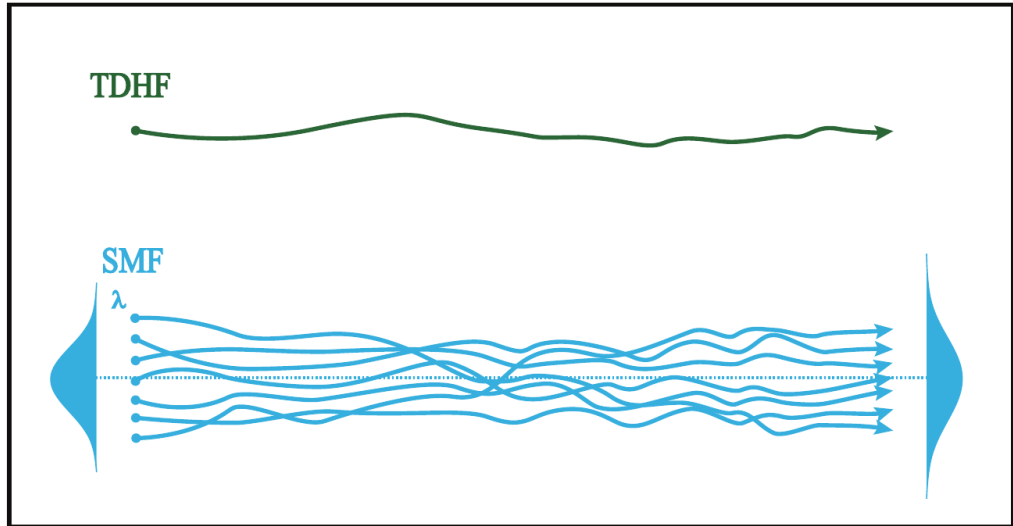
SMF yaklaşımına göre kuantal ortalama ve ikinci mertebeden merkezi moment değerleri, istatistiksel topluluk ile temsil edilen klasik karşılıklarıyla örtüşmelidir. Bu koşulun gerçekleşmesi için

$$\overline{\rho_{ij}^{\lambda}(0)} = n_i \delta_{ij}, \quad (4.13)$$

$$\overline{\delta\rho_{ij}^{\lambda}(0)\delta\rho_{kl}^{\lambda}(0)} = \delta_{il}\delta_{jk} \frac{1}{2} [n_i(1-n_j) + n_j(1-n_i)]. \quad (4.14)$$

bağıntılarını gerçekleştiren stokastik matris elemanları seçilmelidir (Ayık 2008). SMF yaklaşımının özgün formülasyonunda (Ayık 2008), stokastik matris elementler  $\delta\rho_{ij}^{\lambda}(0)$ , (4.13) ve (4.14) koşul denklemlerini sağlayan Gaussyen rastgele sayılardan seçilmesi önerilmiştir.

Şekil 4.1, Ortalama-Alan (MF ya da TDHF) ve SMF yaklaşımının nasıl çalıştığını özetlemektedir <sup>1</sup>. Ortalama-Alan Yaklaşımı'nda sistem iyi tanımlanmış bir başlangıç durumu ile başlar. SMF yaklaşımında ise başlangıç  $\lambda$  ile etiketlenen farklı başlangıç durumlarının istatistiksel bir topluluğuyla temsil edilir. Topluluğun her bir üyesi kendi TDHF denklemi ile zaman içinde değişime uğrar. Böylece başlangıç dalgalanmaları dinamiğe katılmış olur. Sürecin herhangi bir anında sisteme ait özellikler topluluk ortalamasıyla belirlenir.



Şekil 4.1 TDHF ve SMF yaklaşımlarının şematik karşılaştırması

<sup>1</sup>Bu şekil Lacroix ve Ayık tarafından 2014 yılında yayımlanan derleme makaleden (review article) esinlenerek çizilmiştir.

SMF, çok-parçacık problemlerinde ortalama-alan ötesi etkilerin bir kısmını Ortalama-Alan Yaklaşımı'na dahil etmek amacıyla önerilen yaklaşımlardan biridir. Çeşitli alanlarda gerçekçi sistemlerde gerçekleştirilen uygulamalarıyla başarılı sonuçlar veren bu yaklaşım, gelecekte önerilebilecek yeni yöntemler için ilham kaynağı olabilir. Uygulamalarının bazıları şöyledir: Washiyama vd 2009, Ayik vd 2009, 2015, 2016, 2017, 2018, 2019, Yılmaz vd 2011, 2014, 2018, Lacroix vd 2014b.

#### 4.1.2 Yüksek mertebeden merkezi momentler

Bu bölümde SMF yaklaşımının orijinal çalışmasında yer almayan stokastik matrislerin bileşenlerinin yüksek mertebeden momentleri analitik olarak hesaplanacaktır. Ayrıca hesaplamaların detaylı analizi sonucunda Gaussyen olarak önerilen rastgele sayılar için yeni bir öneri sunulacaktır. Bahsi geçen geliştirmeler doktora tezi kapsamında yapılmıştır ve öneriler bir şematik model üzerinde sınanmıştır (Ulgen vd 2019a).

Bir tek-parçacık işlemcisi olan  $\hat{A}$ 'nın  $m$ -nci mertebeden merkezi momentini aşağıdaki bağıntı ile hesaplanır:

$$\begin{aligned}\sigma_{\hat{A}}^{(m)} &= \overline{\left(\langle \hat{A} \rangle_\lambda - \langle \hat{A} \rangle_\lambda\right)^m} \\ &= \left[\text{Tr}(\delta \hat{\rho}^\lambda \hat{A})\right]^m.\end{aligned}\quad (4.15)$$

Burada  $\delta \hat{\rho}^\lambda = \hat{\rho}^\lambda - \overline{\hat{\rho}^\lambda}$ 'dir. Tanıma göre üçüncü ve dördüncü merkezi momentler şöyledir:

$$\sigma_A^{(3)} = \sum_{ijklmn} \overline{\delta \rho_{ij}^\lambda \delta \rho_{kl}^\lambda \delta \rho_{mn}^\lambda} A_{ji} A_{lk} A_{nm}, \quad (4.16)$$

$$\sigma_A^{(4)} = \sum_{ijklmnp} \overline{\delta \rho_{ij}^\lambda \delta \rho_{kl}^\lambda \delta \rho_{mn}^\lambda \delta \rho_{pr}^\lambda} A_{ji} A_{lk} A_{nm} A_{rp}. \quad (4.17)$$

Başlangıç durumu üçüncü ve dördüncü mertebeden kuantum merkezi momentler

$$\langle (\Delta \hat{A})^3 \rangle = \sum_{ijk} \Lambda_{ijk}^{(3)} A_{ij} A_{jk} A_{ki}, \quad (4.18)$$

$$\begin{aligned}\langle (\Delta \hat{A})^4 \rangle &= \sum_{ijkl} \Lambda_{ijkl}^{(4a)} A_{ij} A_{jk} A_{kl} A_{li} \\ &+ 3 \sum_{ijkl} \Lambda_{ijkl}^{(4b)} A_{ij} A_{ji} A_{kl} A_{lk},\end{aligned}\quad (4.19)$$

bağıntılarıyla ifade edilir. Burada  $\Delta\hat{A} = \hat{A} - \langle\hat{A}\rangle$  ve

$$\Lambda_{ijk}^{(3)} = \frac{1}{3} [n_i(1-3n_j)(1-n_jn_k) + n_k(1-3n_i)(1-n_in_j) + n_j(1-3n_k)(1-n_kn_i)], \quad (4.20)$$

$$\Lambda_{ijkl}^{(4a)} = \frac{1}{4} [n_i(1-4n_j)(1-3n_k)(1-n_jn_kn_l) + n_l(1-4n_i)(1-3n_j)(1-n_in_jn_k) + n_k(1-4n_l)(1-3n_i)(1-n_ln_in_j) + n_j(1-4n_k)(1-3n_l)(1-n_kn_ln_i)], \quad (4.21)$$

$$\Lambda_{ijkl}^{(4b)} = \frac{1}{8} \{n_in_k [(1-2n_l)(1-n_ln_j) + (1-2n_j)(1-n_jn_l)] + n_jn_k [(1-2n_l)(1-n_ln_i) + (1-2n_i)(1-n_in_l)] + n_in_l [(1-2n_k)(1-n_kn_j) + (1-2n_j)(1-n_jn_k)] + n_jn_l [(1-2n_k)(1-n_kn_i) + (1-2n_i)(1-n_in_k)]\}. \quad (4.22)$$

(4.13) ve (4.14) koşul denklemleri için takip edilen protokoller sırasıyla (4.16), (4.17) ve (4.18), (4.19) denklemlerine uygulandığında,

$$\overline{\delta\rho_{ij}^\lambda(0)\delta\rho_{kl}^\lambda(0)\delta\rho_{mn}^\lambda(0)} = \delta_{il}\delta_{jm}\delta_{kn}\Lambda_{jik}^{(3)} \quad (4.23)$$

$$\overline{\delta\rho_{ij}^\lambda(0)\delta\rho_{kl}^\lambda(0)\delta\rho_{mn}^\lambda(0)\delta\rho_{pr}^\lambda(0)} = \delta_{il}\delta_{kn}\delta_{rm}\delta_{jp}\Lambda_{jikr}^{(4a)} + \delta_{il}\delta_{jk}\delta_{rm}\delta_{pn}3\Lambda_{jipr}^{(4b)} \quad (4.24)$$

ek-koşul denklemlerini sağlayan stokastik matrisler seçerek klasik ve kuantum ortalamaların örtüşürülebileceği sonucuna ulaşılır.

Topluluktaki tüm başlangıç yoğunluk işlemcilerinin Hermitelesel olduğunu dikkate alarak (4.14) denkleminin incelenmesinden

$$\overline{(\delta\rho_{ii})^2} = 0 \quad (4.25)$$

$$\delta\rho_{ii} = 0 \quad (4.26)$$

sonuçlarına ulaşılır<sup>1</sup>.(4.26) denkleminde anlaşıldığı kadarıyla matrisin  $\rho_{ii}$  köşegen elemanları sabittir ve dalgalanmamaktadır. Üstelik, matris elemanlarının dağılımı reel ve sanal kısımlarına ayrılarak incelenirse,  $\delta\rho_{ij} = r_{ij} + is_{ij}$ ,  $i \neq j$  durumu için

$$\overline{r_{ij}^2} + \overline{s_{ij}^2} = \begin{cases} \frac{1}{2} & , \quad (i, j) = (p, h) \\ 0 & , \quad \text{diğer durumlar,} \end{cases} \quad (4.27)$$

$(i, j) = (p, h)$  koşul denklemini elde edilir.  $(i, j) = (p, h)$  mümkün durumlardan birinin parçacık (particle) diğerinin ise boşluk (hole) durumunda olduğunu göstermektedir. Varyans negatif olamayacağından (4.27) denkleminde  $(i, j) = (p, p)$  ya da  $(i, j) = (h, h)$  için  $\overline{r_{ij}^2} = \overline{s_{ij}^2} = 0$  elde edilir.<sup>2</sup>

(4.23) ve (4.24) koşullarını sağlayan  $\delta\rho$  'nun özelliklerinin belirlenmesi için  $\Lambda$  terimlerinin mümkün tüm değerleri incelenmelidir:

$$\begin{aligned} \Lambda_{pph}^{(3)} &= \Lambda_{php}^{(3)} = \Lambda_{hpp}^{(3)} = -\frac{1}{3}, \\ \Lambda_{pjh}^{(3)} &= \Lambda_{hph}^{(3)} = \Lambda_{hhp}^{(3)} = +\frac{1}{3}, \\ \Lambda_{ppph}^{(4a)} &= \Lambda_{pphp}^{(4a)} = \Lambda_{phpp}^{(4a)} = \Lambda_{hppp}^{(4a)} = +\frac{1}{4}, \\ \Lambda_{hhhp}^{(4a)} &= \Lambda_{hhph}^{(4a)} = \Lambda_{hphh}^{(4a)} = \Lambda_{phhh}^{(4a)} = +\frac{1}{4}, \\ \Lambda_{pphh}^{(4a)} &= \Lambda_{hhpp}^{(4a)} = \Lambda_{hpph}^{(4a)} = \Lambda_{phhp}^{(4a)} = -\frac{1}{2}, \\ \Lambda_{phph}^{(4a)} &= \Lambda_{hphp}^{(4a)} = -1, \\ \Lambda_{phph}^{(4b)} &= \Lambda_{hphp}^{(4b)} = \Lambda_{hpph}^{(4b)} = \Lambda_{phhp}^{(4b)} = +\frac{1}{4}. \end{aligned} \quad (4.28)$$

(4.23) ve (4.24) bağıntılarında sıfırdan farklı terimler şöyledir:

$$\overline{\delta\rho_{ij}\delta\rho_{ki}\delta\rho_{jk}} = \Lambda_{jik}^{(3)}, \quad (4.29)$$

$$\overline{\delta\rho_{ij}\delta\rho_{ki}\delta\rho_{rk}\delta\rho_{jr}} = \Lambda_{jikr}^{(4a)}, \quad (4.30)$$

$$\overline{\delta\rho_{ij}\delta\rho_{ji}\delta\rho_{rp}\delta\rho_{pr}} = 3\Lambda_{ji pr}^{(4b)}. \quad (4.31)$$

<sup>1</sup>Sade bir temsil için etiketleri kullanılmamıştır.  $\delta\rho_{ij} \equiv \delta\rho_{ij}^\lambda(0)$

<sup>2</sup>Stokastik matris elementleri  $r_{ji} = r_{ij}$  ve  $s_{ji} = -s_{ij}$  bağıntılarına uyar.

Bu üç denklemin, birbirleriyle bağıntılı (correlated) stokastik matris elemanlarının seçilmesiyle sağlanabileceğini düşünelim.  $\delta\rho_{jj}$  gibi aynı indisli bileşenlere sahip ortalamaları dikkatlice inceleyelim. Örneğin;  $\overline{\delta\rho_{ij}\delta\rho_{ji}\delta\rho_{jj}} = \Lambda_{jij}^{(3)}$  ve  $\overline{\delta\rho_{ij}\delta\rho_{ii}\delta\rho_{ji}\delta\rho_{jj}} = \Lambda_{jii}^{(4a)}$  denklemlerinde eşitliğin sol tarafı sıfırdır (4.26); ancak (4.28) denklemlerine göre eşitliğin sağ tarafı sıfırdan farklı değer alır. Buna göre stokastik matris elemanları bağıntılı seçilse bile (4.29) ve (4.30) denklemlerinin ifade ettiği örtüşme tam olarak gerçekleştirilemez. Klasik olasılık dağılımları ile kuantum mekaniksel sistemlerin benzetimini yapmaya çalışmak bu uyuşmazlığın temel sebebidir. Kuantum mekaniksel yüksek mertebeli momentlerle tam olarak uyuşan klasik olasılık dağılımları belirlenemez; ancak iyi bir yaklaşıklık önerilebilir. Bu tez çalışmasında aralarında korelasyon bulunmayan matris elemanlarının SMF dinamiği üzerindeki etkisi incelenmektedir. Stokastik matrisin her bir elemanı diğerinden istatistiksel olarak bağımsızdır; ayrıca matris elemanlarının reel ve sanal bileşenleri de istatistiksel olarak birbirlerinden bağımsızdır.

Üçüncü merkezi moment hesabına göre,  $\overline{\delta\rho_{ij}\delta\rho_{ji}\delta\rho_{ij}} = \overline{r_{ij}^3} + i\overline{s_{ij}^3} = 0$ ,

$$\overline{r_{ij}^3} = \overline{s_{ij}^3} = 0. \quad (4.32)$$

Bu sonuç standart SMF yaklaşımının orjinal formülasyonu ile uyumludur; nitekim sıfır ortalamalı Gaussyen rastgele sayıların üçüncü merkezi momenti sıfırdır.

Dördüncü merkezi moment için durum farklıdır:

$$\overline{\delta\rho_{ij}\delta\rho_{ji}\delta\rho_{ij}\delta\rho_{ji}} = \Lambda_{jiji}^{(4a)} + 3\Lambda_{jiji}^{(4b)}. \quad (4.33)$$

(4.28) denklemini kullanılarak aşağıdaki ek-koşullara ulaşılır:

$$\overline{r_{ij}^4} + \overline{s_{ij}^4} + 2\overline{r_{ij}^2 s_{ij}^2} = \begin{cases} -\frac{1}{4} & , \quad (i, j) = (p, h) \\ 0 & , \quad \text{diğer durumlar,} \end{cases} \quad (4.34)$$

Denkleminin sağ tarafı kuantum mekaniksel özelliğe sahiptir; sol tarafı ise sanki-klasik (quasi-classic) yapıdadır. (4.34) bağıntısı dikkatlice incelenirse eşitliğin sol tarafının negatif değer  $(-\frac{1}{4})$  almasının mümkün olmadığı anlaşılır. Kuantum mekaniğinin özünde yer alan

işlemcilerin sıra bağımlılık (non-commutativity) özelliği bu uyuşmazlığın başlıca kaynağıdır. Bu sebeple kuantum mekaniksel bir sistemin doğasının sanki-klasik bir dağılımla tasvir edilemeyeceği açıktır.

Klasik olasılık dağılımını kullanılarak negatif değerli dördüncü merkezi moment (kurtosis) elde edilemeyeceği yukarıdaki tartışmadan anlaşılmaktadır; ancak (4.34) denkleminin sol tarafını en küçük değerli yapacak ve aynı zamanda (4.27) koşulunu sağlayacak bir dağılım önermek mümkündür. Diğer taraftan (4.27) koşulunda yer alan varyansların toplama işlemindeki ağırlıkları hakkında herhangi bir bilgi ve sınırlama yoktur.  $0 \leq \chi \leq 1/2$  aralığında tanımlanan  $\chi = \overline{r_{ij}^2}$  parametresi ile (4.34) bağıntısı detaylıca incelenebilir:

$$F(\chi, \gamma) = 2(\gamma - 1)\chi^2 - (\gamma - 1)\chi + \frac{\gamma}{4}. \quad (4.35)$$

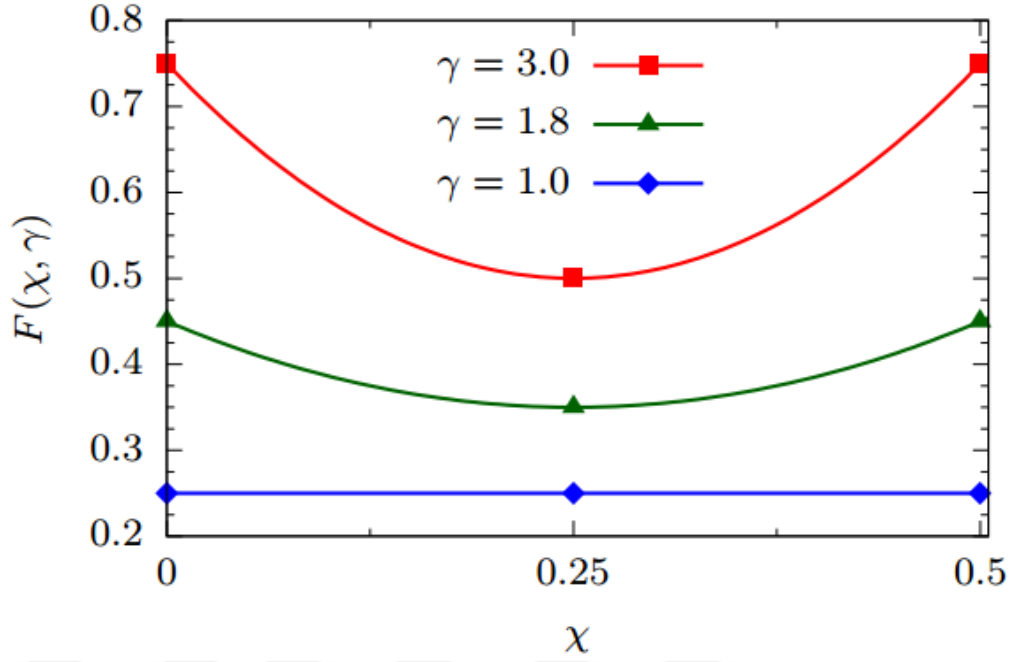
Burada

$$\gamma = \frac{\overline{r_{ij}^4}}{(\overline{r_{ij}^2})^2} \quad (4.36)$$

biçiminde tanımlanan dağılıma ait kurtosis değeri kullanılmıştır. Kurtosis varyans değerlerinden bağımsızdır ve sadece dağılıma göre değişkenlik gösteren bir dördüncü merkezi moment biçimidir. Şekil 4.2, Denklem (4.35) fonksiyonunun  $\chi$  ağırlık parametresine bağımlılığını göstermektedir. Şekildeki 3, 1.8 ve 1 kurtosis değerleri sırasıyla Gaussyen, Tekdüze (Uniform) ve iki-nokta (Two-Point) dağılımlarına aittir. En küçük kurtosis değerine sahip ( $\gamma = 1.0$ ) olasılık dağılımı, eş olasılıklı iki farklı değer alabilen ( $\sigma$  ve  $-\sigma$ ) iki-nokta dağılımıdır (Moors,1988).  $\delta(x)$ , Dirac delta fonksiyonu ve  $\sigma$ ,  $x$  değişkeninin standart sapması olmak üzere bahsi geçen olasılık fonksiyonunun analitik biçimi şöyledir:

$$P_{2p}(x) = \frac{1}{2}\delta(x + \sigma) + \frac{1}{2}\delta(x - \sigma). \quad (4.37)$$

Şekil 4.2 'e göre kurtosis değeri ( $\gamma$ ) azaldıkça  $F$  fonksiyonu daha küçük değerler almaktadır. Ağırlık parametresi  $\chi$  'nin  $F$  fonksiyonu üzerindeki etkisi Şekil 4.2 'den anlaşılmaktadır. Şekile göre eş-ağırlıklı durum,  $\chi = \overline{r_{ij}^2} = \overline{s_{ij}^2} = 1/4$ , her bir kurtosis değeri için en küçük  $F$  değerini sağlamaktadır. Böylece, reel ve sanal kısımları eşit ağırlıklandırılmış varyanslara sahip stokastik matris bileşenlerinin SMF dinamiğine daha iyi bir yaklaşıklık kazandıracak



Şekil 4.2 (4.35) denklemindeki fonksiyonun  $\chi$  parametresine göre grafiği.  $\gamma = 3$ ,  $\gamma = 1.8$ , ve  $\gamma = 1$  kurtosis değerleri sırasıyla Gaussyen, Tekdüze (Uniform) ve iki-nokta (Two-Point) dağılımlarına aittir.

beklenmektedir.

Tez kapsamında yapılan çalışmalar neticesinde küçük kurtosis değerine sahip olasılık dağılımı tarafından indüklenen SMF dinamiğinin daha büyük değerli diğerlerinden tam çözüme daha iyi yakınsadığı sonucuna varılmaktadır (Ulgen vd 2019a). Böylece incelenen dağılımlar arasında iki-nokta dağılımının en iyi; Gaussyen dağılımın ise en kötü yaklaşıklık olduğu vurgulanabilir.

## 4.2 Stokastik Zamana Bağlı Hartree-Fock Yaklaşımı

Tez kapsamında incelenen ikinci stokastik ortalama-alan ötesi yaklaşım "Stokastik Zamana Bağlı Hartree-Fock (STDHF) Yaklaşımı" adıyla anılmaktadır. Önceki bölümde ele alınan yaklaşımda (SMF) kuantal dalgalanmalar (fluctuations) başlangıç anına dahil edilen yaklaşık dalgalanma etkileri ile Ortalama-Alan Kuramı'na kazandırılmaktadır. Stokastik Zamana Bağlı Hartree-Fock Yaklaşımı (STDHF) tıpkı TDDM yaklaşımında olduğu gibi zamanla gelişim esnasında biriken korelasyon etkilerini Ortalama-Alan Kuramı'na kazandırır. STDHF yaklaşımı rastgelelik (stochasticity) bağlamında da SMF'den farklıdır. SMF yaklaşımında rastgelelik, sistemin başlangıç durumunu betimleyen topluluğu nitelendirmek için tanımlanırken; STDHF yaklaşımında rastgelelik zamanla gelişimi boyunca sistemi, olası durumlarından hangisinde bulunacağını nicelendirir. Ayrıntılarına aşağıda değinilecektir.

STDHF yaklaşımı Reinhard ve Suraud tarafından 1992 yılında önerilmiş olsa da önerinin hayata geçirilmesi pratikte yaşanan zorluklardan dolayı 2015 yılına kadar ötelenmiştir. 2015 yılında Slama, Reinhard ve Suraud tarafından bu yaklaşım tekrar değerlendirilmiş ve nihayetinde uygulaması gerçekleştirilmiştir (Slama vd. 2015). 2016 yılında Lacombe ve çalışma arkadaşları bu yaklaşımı daha karmaşık bir çok-parçacık problemine (mLMG modeli) uygulamıştır (Lacombe vd 2016). Kuramsal temelleri aşağıda verilen STDHF yaklaşımı tez çalışması dahilinde mLMG Modeli üzerinde zengin içeriğiyle tekrar sınanmıştır (Bkz. Bölüm 5).

### 4.2.1 Kuramsal temelleri

STDHF yaklaşımının orijinal formülasyonu yoğunluk işlemcileri kullanılarak geliştirilmiştir (Reinhard vd 1992, Abe vd 1996). Bu yaklaşımda korelasyon etkileri, bağlı ağırlıkları ikinci mertebe pertürbasyon teorisi kullanılarak hesaplanan ortalama-alan durumlarının bir topluluğu ile nitelendirilir (Slama vd 2015, Lacombe vd 2016). Sistem incelenirken  $\mathcal{N}$  tane Slater durumunun topluluğu dikkate alınır:  $\{|\mathbb{S}^\lambda\rangle, \lambda = 1, \dots, \mathcal{N}\}$ . SMF yaklaşımından farkı, bu yaklaşımda topluluktaki tüm Slater durumları aynı başlangıç durumundan başlar. Topluluktaki her bir Slater durumuna bir N-parçacık yoğunluk işlemcisi  $\hat{D}^\lambda = |\mathbb{S}^\lambda\rangle\langle\mathbb{S}^\lambda|$  karşılık gelmektedir.  $\hat{D}^\lambda$  dikkate alınarak STDHF dinamiğinde her



$\tau_{STDHF}$  zaman aralığında iki-parçacık korelasyonları, zamanla evrilen sistemin ortalama-alan dinamiğine kazandırılır.  $\tau_{STDHF}$  öyle seçilir ki; bu zaman aralığı ortalama-alan çerçevesinden ayrılmayacak kadar kısa; yeterince korelasyon etkilerinin birikeceği kadar uzun olmalıdır (Slama vd 2015).

Formülasyonun genelliğini koruyarak toplulukta yer alan bir korelasyonlu (correlated) durum bir seri açılımla  $|\Psi^\lambda\rangle = \sum_k c_k |\mathbb{S}_k^\lambda\rangle$  biçiminde ifade edilebilir. Burada  $\{|\mathbb{S}_k^\lambda\rangle\}$  baz vektörleri kümesidir. Bu durumda korele N-parçacık yoğunluk işlemcisi

$$\hat{\mathcal{D}}^\lambda(t) = \sum_{kl} c_k(t) |\mathbb{S}_k^\lambda(t)\rangle \langle \mathbb{S}_l^\lambda(t)| c_l^*(t) \quad (4.38)$$

biçiminde ifade edilir. Bu aşamada  $k \neq l$  köşegen dışı matris elemanlarının yani girişim terimlerinin hızlıca sönümlendiği kabul edilir (Balescu 1975). Bu durumda korele durumu betimleyen yoğunluk işlemcisi, saf durumlara karşılık gelen yoğunluk işlemcilerinin koherent olmayan (incoherent) bir toplamından oluşur:

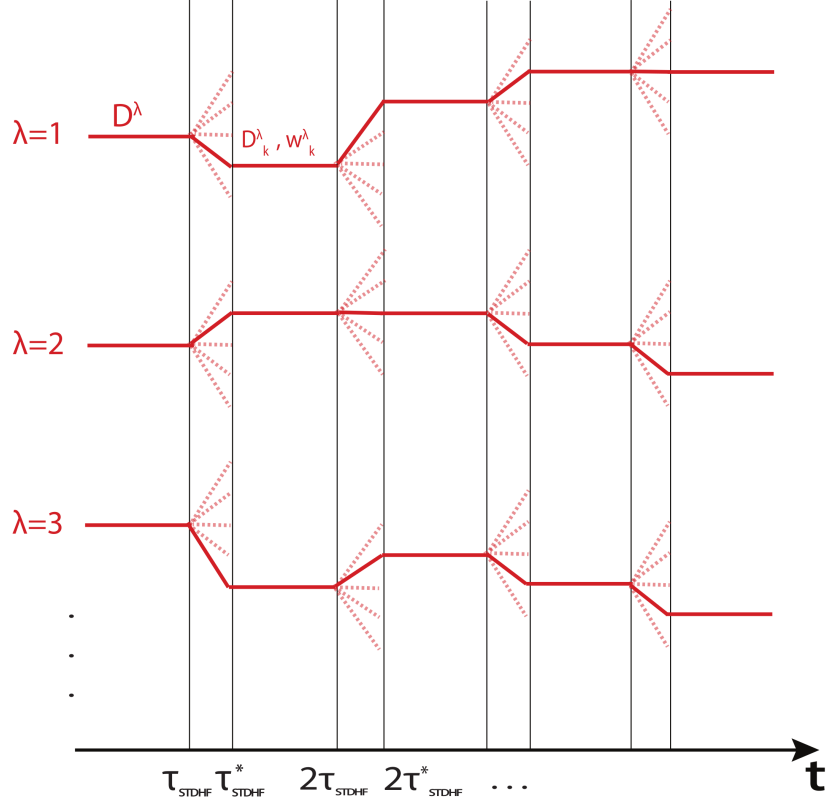
$$\hat{\mathcal{D}}^\lambda(\tau_{STDHF}) \approx \sum_k w_k^\lambda(t) \hat{D}_k^\lambda(t) \Big|_{t=\tau_{STDHF}}, \quad \hat{D}_k^\lambda(t) = |\mathbb{S}_k^\lambda(t)\rangle \langle \mathbb{S}_k^\lambda(t)|. \quad (4.39)$$

Burada  $w_k^\lambda = |c_k(\tau_{STDHF})|^2$  saf durumların toplam içindeki ağırlıklarını temsil etmektedir. Pertürbasyon teorisine göre bu ağırlıklar

$$w_k^\lambda = \frac{2\pi \tau_{STDHF}}{\hbar} |\langle \mathbb{S}_k^\lambda(t) | \hat{V}_{res} | \mathbb{S}^\lambda(t) \rangle|^2 \delta(E^\lambda(t) - E^k(t)) \Big|_{t=\tau_{STDHF}} \quad (4.40)$$

biçiminde yazılır. Burada  $\hat{V}_{res}$  ikinci bölümde değinilen kalıntı (residual) etkileşme potansiyelidir.  $\hat{V}_{res} = \hat{H} - \hat{H}_{MF}$  şeklinde de ifade edilen bu terim Ortalama-Alan Kuramı'nda yer almayan 2 parçacık 2 deşik (2 particle 2 hole - 2p2h) korelasyonlarının üreticisidir. Parantez içindeki enerji durumları,  $\lambda$  ve  $k$  ortalama-alan durumlarına ait enerjilerdir. (4.38) denkleminde ifade edilen korele durum, saf durumları niteleyen Slater durumlarının  $w_k^\lambda$ 'lar ile ağırlıklandırılmış topluluğudur. Bu topluluğun her bir elemanı  $\hat{D}_k^\lambda$ ,  $\tau_{STDHF}$  zaman adımı sonrası oluşacak yeni topluluğun dallanma noktasıdır. Topluluğun tüm elemanlarının dikkate alındığı böylesi bir senaryoda üstesinden gelinemez karmaşıklığı ortadan kaldıracak kabul edilebilir bir seçimin yapılması kaçınılmazdır. Topluluktan yalnızca bir tane Slater durumunun rastgele (stochastic) seçilmesi amaca uygun bir yaklaşımdır. Rastgele

sayı üretici kullanılarak seçilen  $w_k^\lambda$  olasılık değerine sahip  $\hat{D}_k^\lambda$  durumu,  $t = \tau_{STDHF}^*$  anında çok-parçacıklı sistemin yeni saf durumudur.  $\tau_{STDHF}^*$  rastgele seçimin yapıldığı zaman adımını temsil etmektedir. STDHF yaklaşımında toplulukların zaman içinde gelişimini betimleyen bir şema Şekil 4.3 'de gösterilmektedir<sup>1</sup>. Yeni durumuyla sistem ( $\hat{D}_k^\lambda$ ), öte



Şekil 4.3 STDHF yaklaşımının şematik gösterimi

bir  $\tau_{STDHF}$  anına kadar  $\hat{H}$  Hamiltonyeni'nin ürettiği gelişim ile evrilir. Yukarıda ayrıntılandırılan protokoller tüm dinamik boyunca takip edilir ve uygulanır. Gelişimin herhangi bir  $t$  anında korele sistemin durumu,

$$\hat{\mathcal{D}}(t) = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\lambda=1}^{\mathcal{N}} \hat{D}^\lambda(t), \quad (4.41)$$

saf durumların topluluk ortalaması ile belirlenir. Sistemin korele durumunu temsil eden bu yoğunluk işlemcisi kullanılarak gözlenebilir niceliklerin ortalama değerleri standart yöntemlerle hesaplanabilir.

<sup>1</sup>Bu şekil Lionel Lacombe' a ait doktora tezinden esinlenerek çizilmiştir.

Yukarıda detaylandırılan STDHF dinamiği, yoğunluk işlemcileri yerine Slater durumları kullanılarak da tasvir edilebilir. STDHF topluluğundaki her bir  $\hat{D}^\lambda$  Slater durumu,  $\{|\phi_i^\lambda\rangle, i = 1, \dots, \Omega\}$  tek-parçacık durumlarının anti-simetrik çarpımından oluşur. Bunlardan  $i = 1, \dots, N$  etiketli olanları tekil deşik (hole),  $i = N + 1, \dots, \Omega$  olanları ise tekil parçacık (particle) durumlarıdır. Yukarıda ve ikinci bölümde değinildiği gibi kalıntı etkileşme,  $\hat{V}_{res}$ , bir TDHF durumundan 2p2h uyarılmış durumlarının üreticidir. Ortalama-Alan Kuramı'nda etkisi gözardı edilen bu etkileşme terimi, yeteri sayıda seçilen parçacık (particle) durumları dikkate alınarak STDHF yaklaşımına katılır. STDHF yaklaşımında bir saf durumdan  $|\mathbb{S}^\lambda(0)\rangle$  başlanarak zamanla gelişen korelasyon etkileriyle beraber sistemin bir  $t$  anında korelasyonlu (correlated) durumu yukarıda da bahsedildiği gibi

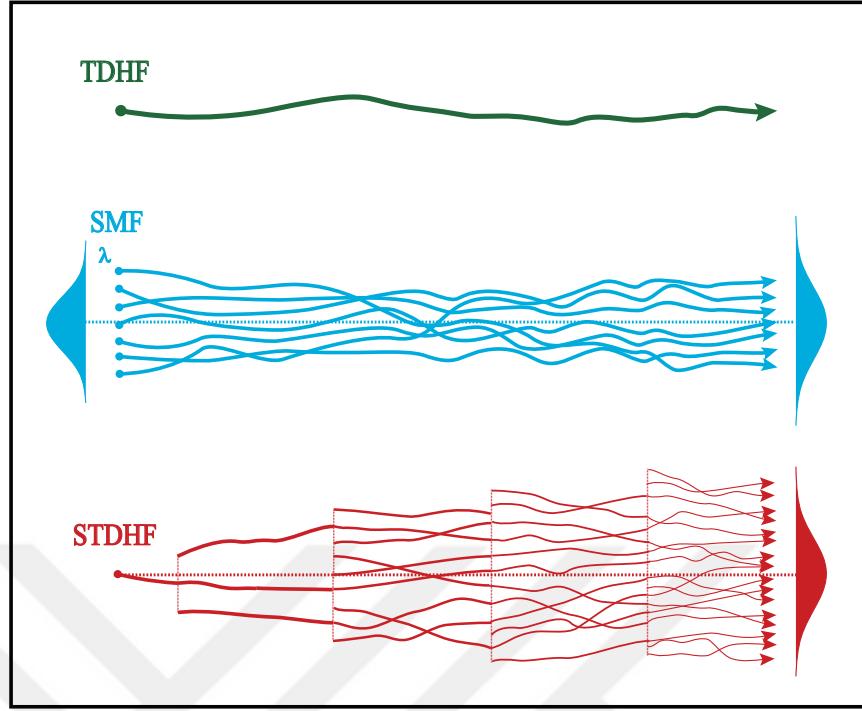
$$|\Psi^\lambda(t)\rangle = |\mathbb{S}^\lambda(t)\rangle + \sum_{pp'hh'} c_{pp'hh'}(t) |\mathbb{S}_{pp'hh'}^\lambda(t)\rangle \quad (4.42)$$

biçiminde koherent bir toplam ile ifade edilir. Burada  $|\mathbb{S}_{pp'hh'}^\lambda(t)\rangle = \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_{p'}^\dagger \hat{a}_{h'} \hat{a}_h |\mathbb{S}^\lambda(t)\rangle$  şeklinde tanımlıdır.  $\tau_{STDHF}$  kadarlık zamansal öteleme altında yukarıdaki koherent toplamın saf durumların koherent olmayan bir toplamına dönüştüğü kabul edilir. Bu durumda sistemin bir  $|\mathbb{S}^\lambda(t)\rangle$  Slater durumundan  $|\mathbb{S}_{pp'hh'}^\lambda(t)\rangle$  Slater durumuna sıçrama olasılığı pertürbasyon kuramından hesaplanır:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{pp'hh'}^\lambda &= \frac{w_{pp'hh'}^\lambda}{\tau_{STDHF}} \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbb{S}_{pp'hh'}^\lambda(t) | \hat{V}_{res} | \mathbb{S}^\lambda(t) \rangle|^2 \delta_\Gamma(\epsilon_p^\lambda(t) + \epsilon_{p'}^\lambda(t) - \epsilon_h^\lambda(t) - \epsilon_{h'}^\lambda(t)) \Big|_{t=\tau_{STDHF}} \end{aligned} \quad (4.43)$$

Burada  $\delta_\Gamma$ ,  $\Gamma$  genişliğine sahip  $\delta$  fonksiyonu;  $\epsilon_p^\lambda$  ve  $\epsilon_h^\lambda$  sırasıyla parçacık ve deşik durumlarının enerjileridir. Bir  $|\mathbb{S}^\lambda(t)\rangle$  Slater durumu için  $w^\lambda = 1 - \sum_{pp'hh'} w_{pp'hh'}^\lambda$  sistemin aynı Slater durumunda kalma olasılığıdır.

STDHF yaklaşımında sistemin zamanla gelişimi şöyle incelenir: başlangıç bir Slater durumu ile tarif edilir. Topluluktaki tüm elamanlar aynı  $|\mathbb{S}^\lambda(0)\rangle = |\mathbb{S}\rangle_0$  başlangıç durumu ile başlar.  $0 - \tau_{STDHF}$  anına kadar topluluktaki her Slater durumu kendine özgü TDHF gelişimini gerçekleştirir.  $\tau_{STDHF}$  anında mümkün tüm 2p2h uyarılmış durumları ve bu durumlara sıçrama olasılıkları hesaplanır. Bu olasılık değerlerine göre olası durumlardan



Şekil 4.4 TDHF, SMF ve STDHF yaklaşımlarının şematik karşılaştırması

bir tanesi rastgele seçilir. Yeni  $|\mathbb{S}^\lambda(\tau_{STDHF})\rangle$  Slater durumu ile  $2\tau_{STDHF}$  anına kadar sistem, TDHF denklemi ile ötelenir.  $2\tau_{STDHF}$  anında başka bir rastgele seçim gerçekleştirilir. Bu işlemler istenilen bir  $t$  anına kadar yinelenebilir. Böylece çok-parçacıklı bir sistemin dinamik özellikleri STDHF yaklaşımı ile incelenebilir.

Şekil 4.4, Ortalama-Alan (MF ya da TDHF), SMF ve STDHF yaklaşımlarının şematik karşılaştırmasını göstermektedir<sup>1</sup>. Ortalama-Alan yaklaşımı iyi tanımlanmış bir başlangıç durumu ile başlar ve bir durum ile sonuçlanır. SMF yaklaşımında başlangıç durumu birbirinden istatistiksel olarak bağımsız farklı başlangıç durumlarının bir topluluğuyla temsil edilir. STDHF yaklaşımında ise başlangıç durumu aynı durumdan başlayan bir topluluk ile temsil edilir ve zaman içinde topluluğun her bir elemanı kendi kuantum gelişimini gerçekleştirir.

<sup>1</sup>Bu şekil Lacroix ve Ayik tarafından 2014 yılında yayımlanan derleme makaleden (review article) esinlenerek çizilmiştir.

STDHF yaklaşımının literatürde iki uygulaması bulunmaktadır (Lacombe vd 2016b, Lacombe vd 2019). Yaklaşımın farklı problemler üzerinde sınanması ve gerçekçi sistemlere uygulanabilirliğinin tartışılması için daha çok uygulamasının gerçekleştirilmesi gerekmektedir. Geliştirilmeye müsait olan bu yaklaşım araştırmacıların takdirine sunulmuştur. Tez kapsamında bu yaklaşım bir model üzerinde sınanmıştır. Ayrıntıları altıncı bölümde yer almaktadır.



## 5. ORTALAMA-ALAN ÖTESİ YAKLAŞIMLARIN UYGULAMALARI

Bu bölümde, tez kapsamında incelenen ortalama-alan ötesi yaklaşımların iki farklı şematik model üzerinde uygulamalarına yer verilmektedir. Bölümün izlencesi şu şekildedir: ilk iki alt-bölümde numerik çözümü tam yapılabilen "Değişkin Lipkin-Meshkov-Glick" ve "Fermi-Hubbard" isimleriyle bilinen modellerde dördüncü bölümde tanıtılan farklı başlangıç durumu dağılımlarına sahip Stokastik Ortalama-Alan (SMF) Yaklaşımı'na ait çözümlerinin karşılaştırmaları yapılmaktadır. Son alt-bölümde ise birinci model kullanılarak hem deterministik hem de stokastik ortalama-alan ötesi yaklaşımların tam çözümü tahmin kabiliyetleri değerlendirilmektedir.

### 5.1 Değişkin Lipkin-Meshkov-Glick Modeli

Lipkin-Meshkov-Glick Modeli, Nükleer Fizik alanında yaygın olarak kullanılan bir modeldir (Lipkin vd 1965, Meshkov vd 1965, Glick vd 1965 ). Bu modelde parçacıklar iki farklı enerji bandına yayılmış durumdadır. Lacombe ve çalışma arkadaşları tarafından 2016 yılında yayımlanan çalışmada Lipkin-Meshkov-Glick Modeli'nin yeniden düzenlenmiş biçimi tanıtılmıştır (Lacombe vd 2016). Tez çalışmasında bu şematik model "Değişkin Lipkin-Meshkov-Glick (modified Lipkin-Meshkov-Glick) Model" (mLMG) adıyla anılmaktadır. Bu model-in Hamiltonyeni çiftlenim (pairing) özelliğine sahiptir ve modelde enerji seviyeleri rastgele dağılmıştır. Modelin Hamiltonyeni'nde,

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}, \quad (5.1)$$

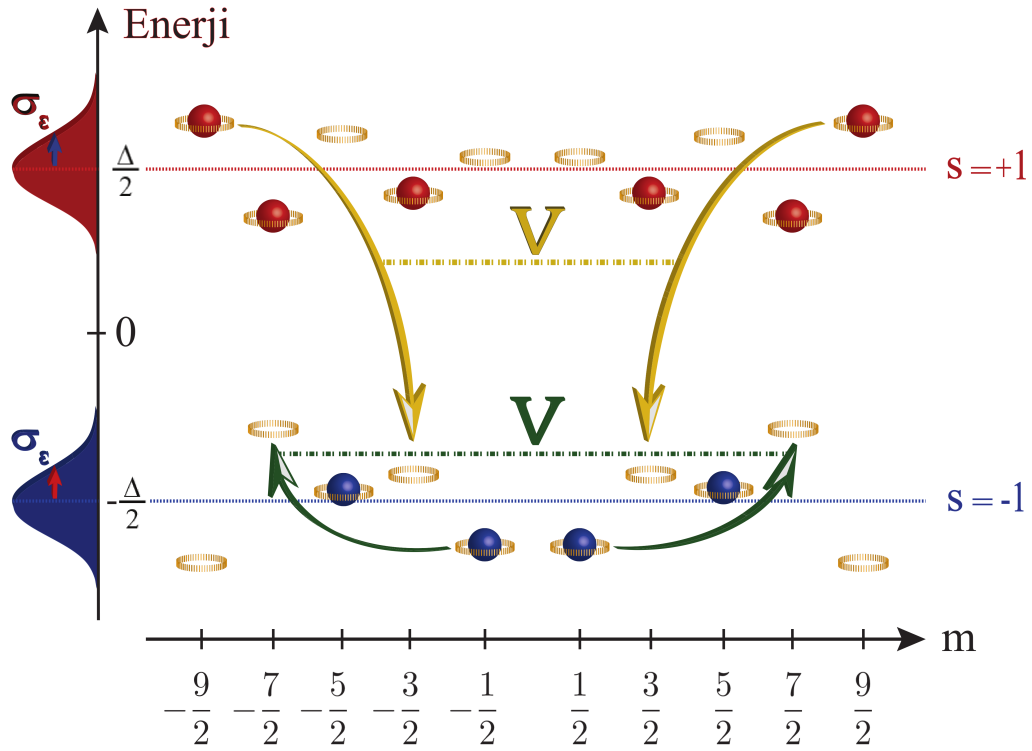
sırasıyla kinetik ve potansiyel enerji kısımları,

$$\hat{T} = \sum_{\alpha} \frac{s_{\alpha} \varepsilon_{\alpha}}{2} \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{\alpha}, \quad (5.2)$$

$$\hat{V} = v_0 \hat{S}_+ \hat{S}_-, \quad (5.3)$$

şeklinde ikinci kuantumlama gösterimine sahiptir. Burada  $\alpha = (s_{\alpha}, m_{\alpha})$ ,  $s_{\alpha} \in \{-1, +1\}$ ,  $m_{\alpha} \in \{-j, -j+1, \dots, j-1, j\}$ ,  $\hat{S}_+ = \sum_{\alpha>0} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha}$  ve  $\hat{S}_- = \hat{S}_+^{\dagger}$  tanımlamaları dikkate alınmaktadır.  $\underline{\alpha} = (s_{\alpha}, -m_{\alpha})$ , indis karışıklığını önlemek amacıyla belirlenmiştir ve  $\alpha > 0$ ,  $m_{\alpha} > 0$  anlamına gelmektedir.  $v_0$ , etkileşim şiddetini;  $\varepsilon_{\alpha}/2$ ,  $\sigma_{\varepsilon}^2$  varyans değerine sahip

rastgele belirlenmiş tek-parçacık enerjilerini temsil etmektedir.  $s_\alpha = 1$  ve  $s_\alpha = -1$  sırasıyla üst ve alt enerji seviyelerini etiketlerken  $\Delta/2$  ve  $-\Delta/2$  üst seviyedeki ve alt seviyedeki parçacıkların enerjilerinin ortalama değerlerini göstermektedir. Olası bir belirsizliğe sebep olmamak amacıyla şu nokta açıklığa kavuşturulmalıdır: rastgele dağılmış enerji seviyeleri yalnızca başlangıçta ve bir kez belirlenmektedir; dinamik boyunca da bu değerler değişmemektedir. Şekil 5.1’de mLMG Modeli’nin şematik gösterimini sergilenmektedir. Parçacıklar arası etkileşimin iki farklı örneği şekil üzerinde örnek olarak gösterilmiştir. Örneklerden birinde açıkça görülmektedir ki aynı enerji bandında geçiş mümkündür. Bu açıdan mLMG modeli, özgün (orijinal) LMG Modeli’nden daha zengin süreçler içerir.



Şekil 5.1 mLMG Modeli'nin şematik gösterimi. İki farklı geçiş örneklendirilmiştir: Yeşil oklar, aynı banda ait enerji seviyeleri arasındaki geçişi; sarı oklar, farklı bantlara ait enerji seviyeleri arasındaki geçişi temsil etmektedir.

### 5.1.1 Tam çözüm, Ortalama-Alan ve Stokastik Ortalama-Alan dinamikleri

(i) *Numerik tam çözüme ait dinamik:*

Başlangıç durumu  $|\Psi(0)\rangle$  ile temsil edilen çok-parçacıklı sistemin zamanın herhangi bir t anında durumu, sistemin Hamiltonyeni'nin belirlediği,

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\Psi(0)\rangle, \quad (5.4)$$

dönüşümü ile tespit edilir. mLMG Modeli'nin tam çözümü çeşitli sayısal yöntemler kullanılarak yapılabilir. Bu çalışmada sistemin tam (exact) çözümü için "Ötelenmiş Crank-Nicolson Yöntemi (iterated Crank-Nicolson method)" kullanılmıştır (Teukolsky, 2000).

(ii) *Ortalama-Alan (Mean-Field) Dinamiği:*

Ortalama-Alan denklemi (MF ya da TDHF denklemi) ikinci bölümde gösterildiği gibi Ehrenfest teoremi kullanılarak türetilir:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\rho_{\alpha\beta}}{dt} &= i\hbar \frac{d\langle \hat{a}_\beta^\dagger \hat{a}_\alpha \rangle}{dt} \\ &= \langle \mathbb{S} | [\hat{a}_\beta^\dagger \hat{a}_\alpha, \hat{H}] | \mathbb{S} \rangle. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Burada beklenen değer Slater determinanı üzerinden alınmaktadır. Sistemin Hamiltonyeni dikkate alınarak Ortalama-Alan hareket denklemi

$$i\hbar \frac{d\rho_{\alpha\beta}}{dt} = [\hat{h}[\rho], \hat{\rho}]_{\alpha\beta} \quad (5.6)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} (s_\alpha \varepsilon_\alpha - s_\beta \varepsilon_\beta) \rho_{\alpha\beta} \\ &\quad + v_0 \sum_{\gamma>0} (\rho_{\gamma\alpha} \rho_{\gamma\beta} - \rho_{\alpha\gamma} \rho_{\beta\gamma}) \\ &\quad - v_0 \sum_{\gamma>0} (\rho_{\gamma\alpha} \rho_{\gamma\beta} - \rho_{\alpha\gamma} \rho_{\beta\gamma}) \end{aligned} \quad (5.7)$$

biçiminde ifade edilir.

(iii) *Stokastik Ortalama-Alan (Stochastic Mean-Field) Dinamiği:*

Stokastik Ortalama-Alan Yaklaşımı'nda, uygun koşulları sağlayan ve stokastik olarak



seçilmiş farklı başlangıç durumlarının her birine has zamanla gelişimini

$$i\hbar \frac{d\rho_{\alpha\beta}^{\lambda}}{dt} = [\hat{h}[\rho^{\lambda}], \hat{\rho}^{\lambda}]_{\alpha\beta} \quad (5.8)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} (s_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} - s_{\beta} \varepsilon_{\beta}) \rho_{\alpha\beta}^{\lambda} \\ &\quad + v_0 \sum_{\gamma>0} \left( \rho_{\underline{\gamma}\alpha}^{\lambda} \rho_{\gamma\beta}^{\lambda} - \rho_{\alpha\gamma}^{\lambda} \rho_{\underline{\beta}\gamma}^{\lambda} \right) \\ &\quad - v_0 \sum_{\gamma>0} \left( \rho_{\underline{\gamma}\alpha}^{\lambda} \rho_{\underline{\beta}\gamma}^{\lambda} - \rho_{\alpha\gamma}^{\lambda} \rho_{\underline{\beta}\gamma}^{\lambda} \right) \end{aligned} \quad (5.9)$$

denklemleri belirler. Burada  $\lambda$  stokastik seçilen başlangıç durumlarının istatistiksel topluluğunda yer alan her bir elemanı (ya da olayı) etiketlemektedir.

Hesaplamalarda kullanılan iki farklı tek-parçacık baz vektörü kümesi vardır: birincisi  $\alpha, \beta$ , vb sembollerinin kullanıldığı modelin sabit (fixed) baz vektörleri; ikincisi  $i, j$ , vb harfleriyle temsil edilen ve başlangıç tek-parçacık yoğunluk işlemcisinin köşegen yazıldığı doğal (natural) baz vektörleridir. Ortalama-Alan denklemi (5.6) şematik modelin sabit bazlarında yazılmıştır. SMF yaklaşımında topluluktaki her bir olay için ( $\lambda$ ) doğal bazlarında tanımlanmış başlangıç tek-parçacık yoğunluk işlemcileri belirlenmiş; sonrasında bir üniter dönüşüm ile bu işlemciler modelin sabit bazlarında ifade edilerek sistemin gelişimi incelenmiştir.

### 5.1.2 Çok-parçacıklı sistemin başlangıç durumu

$2N$  tane tek-parçacık enerji durumundan  $N$  tanesine yerleşen fermiyon ailesine ait parçacıklardan oluşan sistemin başlangıç durumu şöyledir:

$$|\Psi(0)\rangle = e^{i\mu\hat{D}} |\mathbb{S}^{(\eta)}\rangle. \quad (5.10)$$

Burada  $\mu$ , bir reel parametre;  $|\mathbb{S}^{(\eta)}\rangle$  ise

$$|\mathbb{S}^{(\eta)}\rangle = (\hat{a}_{\alpha_1}^{\dagger})^{n_{\alpha_1}^{(\eta)}} (\hat{a}_{\alpha_2}^{\dagger})^{n_{\alpha_2}^{(\eta)}} \dots (\hat{a}_{\alpha_{2N}}^{\dagger})^{n_{\alpha_{2N}}^{(\eta)}} |\Theta\rangle \quad (5.11)$$

tanımına uyan Slater determinantlarının bir karışımı biçiminde belirlenir. Burada,  $n_\alpha^{(\eta)}$ , Şekil 5.1'deki her bir tek-parçacık durumuna ait nüfuslanma sayısıdır (occupation number) ve başlangıç durumu için 0 ya da 1 değerlerini alabilmektedir. Şematik modelde zamanla gelişimi incelenen kollektif gözlenebilir Dipol işlemcisidir. Bu işlemcinin ikinci kuantumlama gösterimindeki tanımı şöyledir:

$$\hat{D} = \sum_{m_\alpha} (\hat{a}_{+1, m_\alpha}^\dagger \hat{a}_{-1, m_\alpha} + \hat{a}_{-1, m_\alpha}^\dagger \hat{a}_{+1, m_\alpha}). \quad (5.12)$$

$\hat{D}$  bir tek-parçacık işlemcisi olduğundan Thouless Teoremi'ne göre  $|\Psi(0)\rangle$  başlangıç durumu da bir Slater durumudur (Thouless, 1960). (5.10) denkleminde ifade edilen üssel dönüşüm sistemin uyarılmış durumlarını hesaba katmak için kullanılmıştır (Lacombe vd 2016).

Çok-parçacıklı sisteme ait farklı başlangıç durumları, farklı seçilen  $\eta$  ile (5.10) bağıntısıyla belirlenebilir. Her ne kadar Şekil 5.1, 20 olası tek-parçacık enerji durumuna sahip 10 özdeş parçacıklı bir sistemin şemasını gösteriyor olsa da tez çalışmasında hesaplamalar 12 durumlu 6 özdeş parçacıklı sistem için yapılmıştır.  $N = 6$  özdeş parçacıktan oluşan sistem için  $|\Psi(0)\rangle_1$  ve  $|\Psi(0)\rangle_2$  sembolleri ile temsil edilen sırasıyla şu iki başlangıç durumu dikkate alınmıştır: ilkinde başlangıç durumu için  $\mu = 0.8$  ve tüm parçacıkların en düşük enerji seviyelerinde ( $s_\alpha = -1$ ) nüfuslandığı Slater durumu ( $|\otimes^{(\eta)}\rangle$ ) seçilmiştir. İkincisinde ise yine  $\mu = 0.8$  için parçacıkların

$$(s_\alpha, m_\alpha) = \left\{ \left( +1, \pm \frac{1}{2} \right), \left( -1, \pm \frac{1}{2} \right), \left( +1, \pm \frac{3}{2} \right) \right\} \quad (5.13)$$

etiketli durumları işgal ettiği Slater durumu seçilmiştir.

### 5.1.3 Araştırma bulguları

Hesaplamalarda enerji birimi için, enerji seviyeleri arasındaki aralık  $\Delta$ ; zaman birimi için ise  $\Delta^{-1}$  kullanılmaktadır. Modelin her bir tek-parçacık durumunun enerjisi aşağıdaki gibi

rastgele belirlenmiştir:

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{(+1,\pm 5/2)}/2 &= 0.225\Delta, & \varepsilon_{(-1,\pm 5/2)}/2 &= -0.222\Delta, \\
\varepsilon_{(+1,\pm 3/2)}/2 &= 0.697\Delta, & \varepsilon_{(-1,\pm 3/2)}/2 &= -0.593\Delta, \\
\varepsilon_{(+1,\pm 1/2)}/2 &= 0.578\Delta, & \varepsilon_{(-1,\pm 1/2)}/2 &= -0.685\Delta.
\end{aligned} \tag{5.14}$$

Üst seviyede yer alan parçacıkların ( $\varepsilon_{(+1,m_\alpha)}/2$ ) enerjilerinin ortalama değeri  $\Delta/2$  ve alt seviyede yer alan parçacıkların ( $\varepsilon_{(-1,m_\alpha)}/2$ ) enerjilerinin ortalama değeri ise  $-\Delta/2$  'dir. Her bir seviyedeki  $\varepsilon_\alpha/2$  'nin varyansı  $\sigma_\varepsilon = 0.2\Delta$ 'dır. Tüm SMF çözümleri için dikkate alınan olay (event) sayısı  $\mathcal{N} = 10^6$  kadardır.

Tek-parçacık entropisi,  $S(t)$ , sistemin serbest parçacık durumundan (Slater durumu) ne kadar ayrıldığını belirler ve termalizasyonun bir ölçüsüdür (Lacombe vd 2016). Tek-parçacık entropisi

$$S(t) = -\text{Tr} \left[ \hat{\rho}(t) \ln \hat{\rho}(t) + (1 - \hat{\rho}(t)) \ln (1 - \hat{\rho}(t)) \right], \tag{5.15}$$

biçiminde ifade edilir. Sistem Slater durumunda iken tek-parçacık entropisi  $S = 0$  değerini alır. Ortalama-Alan yaklaşımında zamanla gelişen sistemin anlık durumu bir Slater durumu olduğundan tek-parçacık entropi değeri dinamik boyunca  $S = 0$  olarak kalır.

Entropinin en yüksek değeri aldığı durumda her bir enerji seviyesi yarı-dolu durumdadır. Bu durumda entropi şu değeri alır:

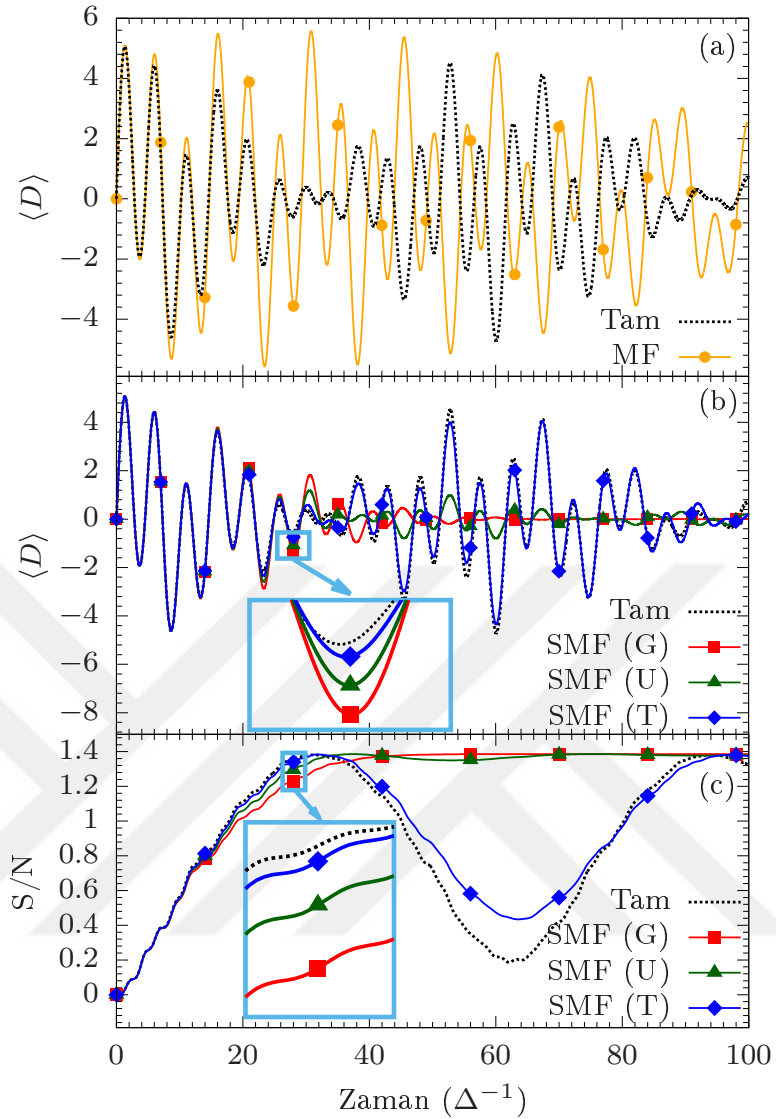
$$S = 2N \ln 2. \tag{5.16}$$

Stokastik Ortalama-Alan (SMF) Yaklaşımı'nda ise tek-parçacık entropisi

$$S = -\text{Tr} \left[ \overline{\hat{\rho}^\lambda} \ln \overline{\hat{\rho}^\lambda} + (1 - \overline{\hat{\rho}^\lambda}) \ln (1 - \overline{\hat{\rho}^\lambda}) \right] \tag{5.17}$$

istatistiksel ortalama alınarak hesaplanır.

Şekil 5.2 zayıf bağlaşım durumunda,  $v_0 = 0.05\Delta$ , Dipol işlemcisinin ortalama değerinin



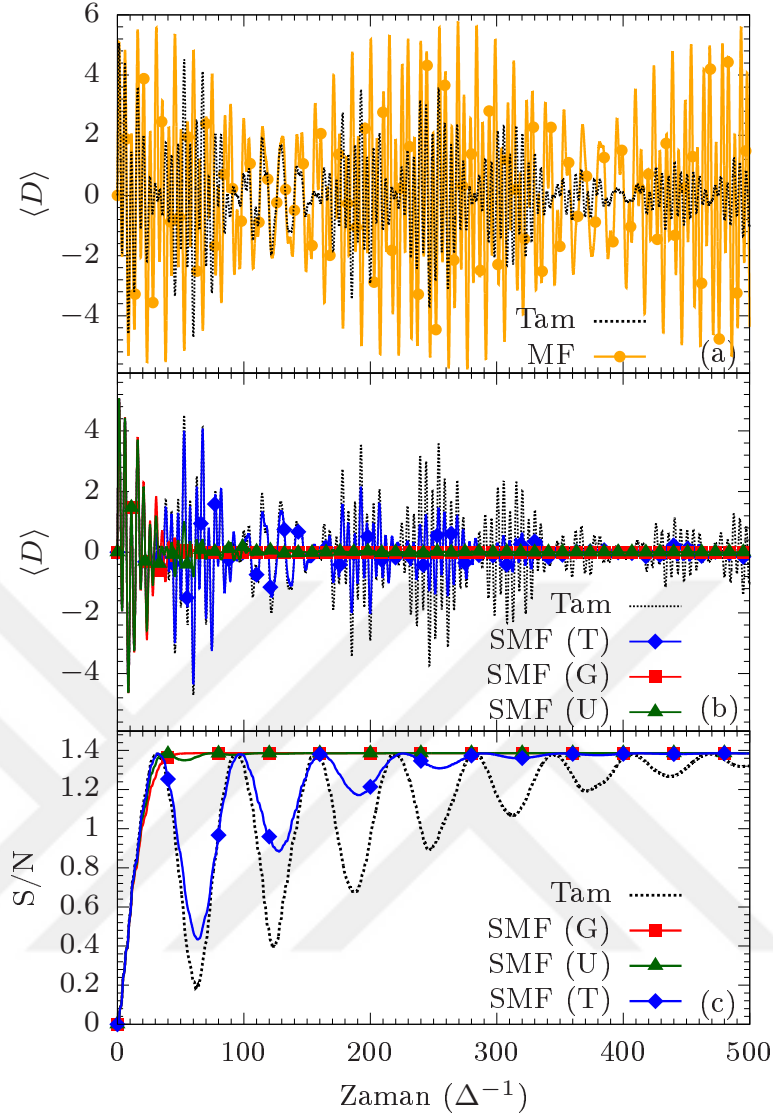
Şekil 5.2 (a) Zamanla gelişen Dipol işlemcisinin beklenen değeri üzerinden Ortalama-Alan Yaklaşımı'nın tam çözüm ile bağlı karşılaştırılması, (b) Aynı süreç için farklı dağılımların kullanıldığı SMF yaklaşımlarının tam çözüm ile karşılaştırılması, (c) Tek-parçacık entropinin zaman içinde değişimini kullanarak farklı SMF çözümlerinin tam çözümle karşılaştırılması. Etkileşme şiddeti  $v_0 = 0.05\Delta$  ve başlangıç durumu  $|\Psi(0)\rangle_1$ ' dir.

ve parçacık başına tek-parçacık entropisinin zamanla gelişimini göstermektedir. Çok-parçacıklı sistemin başlangıç durumu için  $|\Psi(0)\rangle_1$  seçilmiştir. Şekil 5.2 (a) dikkatlice incelendiğinde Ortalama-Alan dinamiğinin  $t = 6\Delta^{-1}$  civarında tam çözümden uzaklaştığı; diğer taraftan Şekil 5.2 (b) 'e göre SMF dinamiğinin  $t = 20\Delta^{-1}$  civarında tam çözümden uzaklaşmaya başladığı anlaşılmaktadır. Üç farklı SMF dinamiğinin tam çözüm ile karşılaştırmasında, Şekil 5.2 (b), İki-nokta (two-point) dağılımın kullanıldığı SMF çözümünün dinamik boyunca diğer iki SMF çözümlerinden daha iyi yaklaşıklık sunduğu anlaşılmaktadır. Benzer davranış Şekil 5.2 (c)' de tek-cisim entropisi için görülmektedir:

İki-nokta dağılımın kullanıldığı SMF (SMF (T)) tam çözümü oldukça yakından takip ederken; Gaussyen ve tek-düze (Uniform) dağılımların kullanıldığı SMF çözümleri, SMF (G) ve SMF (U),  $t = 30\Delta^{-1}$  zamanından sonra tam çözümün entropisini eksik tahmin etmektedir. Sonrasında tam çözümün entropisi azalmakta ve bir süre sonra tekrar artmaktadır. SMF (T) çözümü süreç içerisinde tam çözümün entropisini çok iyi tahmin ederken; SMF (G) ve SMF (U)  $t = 30\Delta^{-1}$  zamanından sonra artmaya devam etmekte sonrasında en büyük değerine ( $2\ln 2 = 1.38$ ) ulaşmaktadır.  $t = 40\Delta^{-1} - t = 70\Delta^{-1}$  aralığında SMF (U) çözümünün entropisi bir miktar azalmaktadır. Bu açıdan SMF (U), SMF (G) 'den az da olsa daha iyi tahmin gücüne sahiptir. Dağılıma ait kurtosis değeri, (4.36), azaldıkça ilgili SMF dinamiğinin tahmin gücü artmaktadır. En iyi yaklaşıklık, en küçük kurtosis değerine ( $\gamma = 1$ ) sahip İki-nokta dağılımı sağlamıştır. Şekil 5.2 'den açıkça görülmektedir ki iki-durumlu dağılımın kullanılması SMF yaklaşımının tahmin gücünü ve geçerli olduğu zaman aralığını önemli ölçüde arttırmıştır.

Şekil 5.3, Şekil 5.2 'nin uzun zaman dinamiğini göstermektedir. Şekil 5.3 (a) 'a göre tam çözüm zamanla genliği azalan salınım hareketi yapmaktadır; diğer taraftan, Ortalama-Alan (MF) çözümü neredeyse sabit genlikli salınımına sahiptir. Hem bu sonuç hem de dinamik boyunca entropinin sıfır kalması Ortalama-Alan Yaklaşımı'nda yitim (dissipation) ve termalizasyon etkilerinin eksik olduğu sonucunu gözler önüne sermektedir. Şekil 5.3 (b) 'e göre  $t = 50\Delta^{-1}$  civarında SMF (G) ve SMF (U) çözümlerinin salınım genlikleri neredeyse sönümlenmiştir. SMF (T) çözümünün salınım genliği tam çözümün salınım genliğini nispeten daha uzun zamanda takip etmektedir. Şekil 5.3 (c) 'den benzer davranışı entropi için söylemek mümkündür. SMF (G) ve SMF (U)  $t = 50\Delta^{-1}$  civarında en büyük değerine ulaşırken SMF (T), tam çözüm ile daha uzun zamanda uyumlu hareket etmektedir.

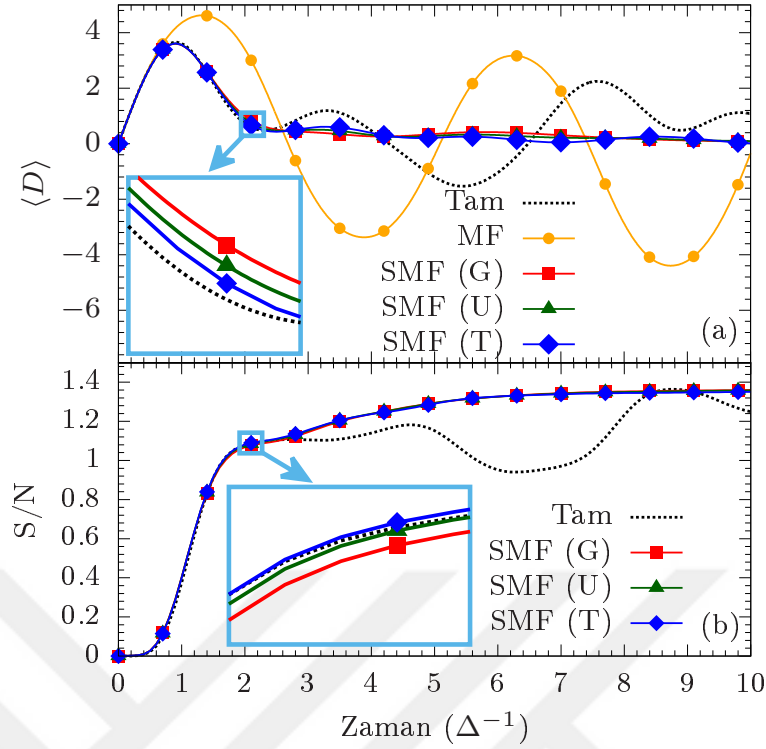
Şekil 5.4,  $v_0 = 0.5\Delta$  için kuvvetli bağlaşım durumundaki dinamiği göstermektedir. Dipol işlemcisinin ortalama değerinin zamanla gelişiminde  $t = 0.7\Delta^{-1}$  anında Ortalama-Alan Yaklaşımı'nın (MF) tam çözümden saptığı, SMF çözümlerinin ise  $t = 2\Delta^{-1}$  civarında sapmaya başladığı görülmektedir. Şekil 5.4 (a) ve Şekil 5.4 (b)'de SMF çözümleri arasındaki fark ihmal edilebilecek derecede küçüktür. Fakat  $t = 2.1\Delta^{-1}$  anına odaklanıldığında görülecektir ki SMF (T) çözümü diğer SMF çözümlerinden daha iyi tam çözüme yakınsamaktadır. Bağlaşım şiddeti,  $\Delta t_{\text{val}} \propto v_0^{-1}$ , arttıkça Ortalama-Alan ve ötesi yaklaşımların geçerliliği azalmaktadır (Lacroix 2014a, Polkovnikov 2003). Dahası, bağlaşım şiddeti



Şekil 5.3 Şekil 5.2 'deki dinamik değişkenlerin uzun zaman ölçeğindeki durumları

arttıkça farklı dağılımların kullanıldığı SMF çözümleri arasındaki fark azalmaktadır.

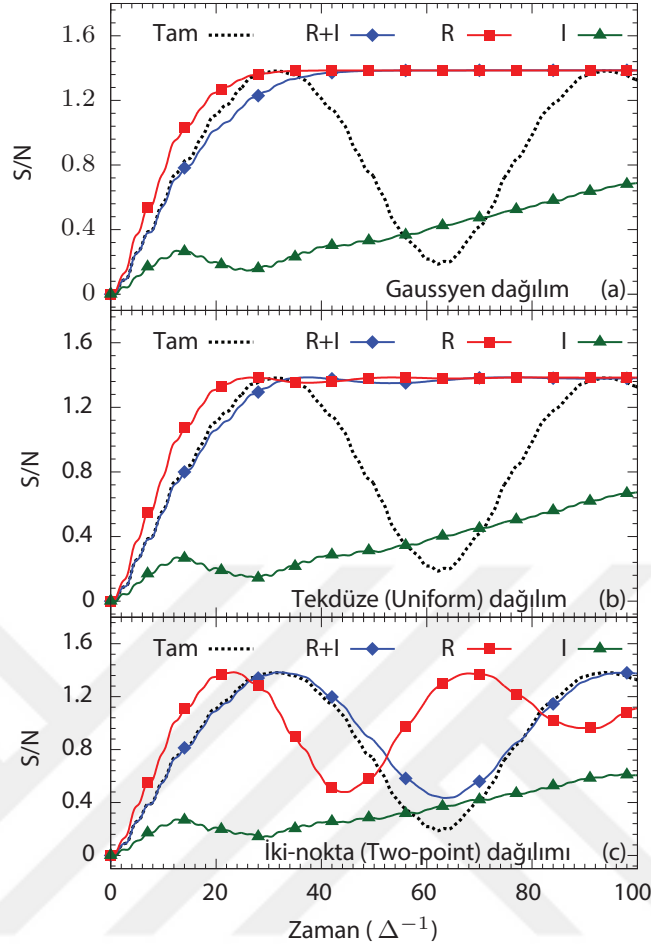
Şekil 5.5 farklı SMF çözümlerinin, stokastik matris elementlerinin reel ve sanal kısımlarının ağırlıklarını kontrol eden  $\chi$  parametresine ne ölçüde bağlı olduğunu göstermektedir. Seçilen üç farklı örneklem şöyledir: ilki "R+I" ile etiketlenen eşit ağırlıklandırılmış durum,  $\chi = \overline{r_{ij}^2} = \overline{s_{ij}^2} = 1/4$ ; ikincisi "R" ile etiketlenen tamamen reel kısımdan oluşturulmuş durum,  $\chi = \overline{r_{ij}^2} = 1/2$  ve  $\overline{s_{ij}^2} = 0$ ; ve sonuncusu "I" ile etiketlenen ve tamamen sanal kısımdan oluşturulmuş  $\overline{s_{ij}^2} = 1/2$  ve  $\chi = \overline{r_{ij}^2} = 0$  durumudur. Eşit ağırlıklandırılmış durumun SMF çözümleri içerisinde en iyi dinamiği verdiği açıkça görülmektedir. Dördüncü bölümde değinildiği gibi SMF yaklaşıklığının tam çözümü tahmin kabiliyeti (4.35) denklemi ile



Şekil 5.4 (a) Zamanla gelişen Dipol işlemcisinin beklenen değeri üzerinden Ortalama-Alan Yaklaşımı'nın tam çözüm ile bağlı karşılaştırılması, (b) Parçacık başına tek-parçacık entropisinin farklı SMF çözümleri ve tam çözüm dinamiklerinin karşılaştırılması. Etkileşme şiddeti  $v_0 = 0.5\Delta$  ve başlangıç durumu  $|\Psi(0)\rangle_1$ ' dir.

ifade edilen  $F$  fonksiyonunun değeri küçüldükçe artacaktır. Şekil 5.5 (a) ve 5.5 (b) bu önermeyi doğrulamaktadır. Ancak İki-nokta olasılık dağılımı için  $F$  Şekil 4.2'de görüldüğü gibi sabit olduğundan bu dağılımın kullanıldığı SMF çözümlerinde matris elementlerinde seçilen farklı ağırlıkların sonucu değiştirmedeği gözlenmiştir. Şekil 5.5 (c)'ye göre ağırlıklandırılması eşit seçilmiş durumun eşit olmayanlara göre daha iyi olduğu söylenebilir. Bu sonuç, stokastik matris elementlerinin reel ve sanal kısımlarının dağılımları incelenerek açıklanabilir.

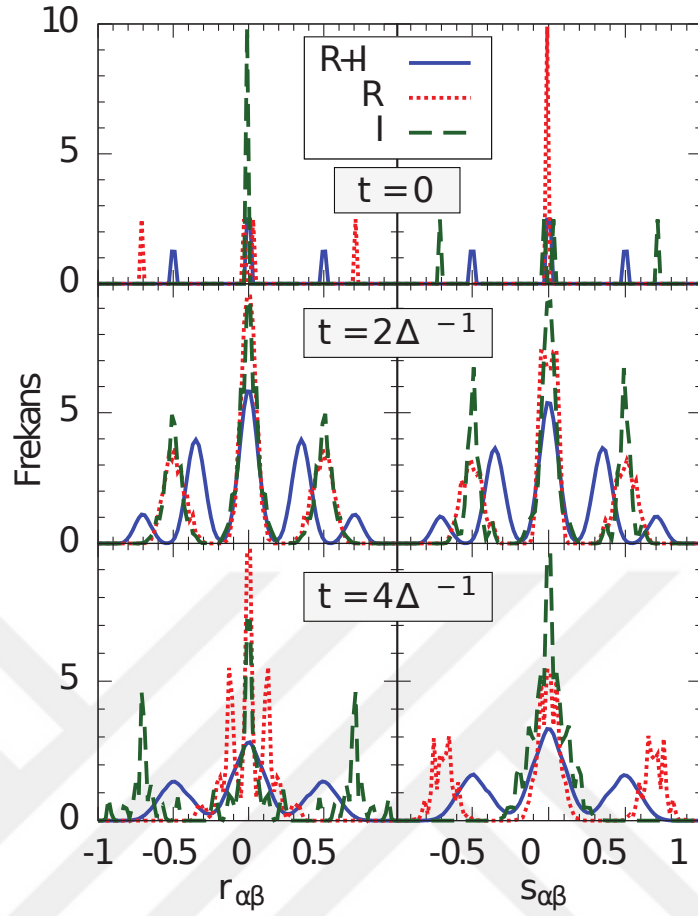
Şekil 5.6'da stokastik tek-parçacık yoğunluk işlemcisinin sırasıyla  $t = 0$ ,  $t = 2 \Delta^{-1}$  ve  $t = 4\Delta^{-1}$  anlarında reel ( $r_{\alpha\beta}$ ) ve sanal ( $s_{\alpha\beta}$ ) kısımlarının dağılımlarını göstermektedir. Bu dağılımlar rastgele seçilmiş tek-parçacık durumlarına aittir:  $\alpha = (+1, +1/2)$  ve  $\beta = (-1, +3/2)$ . İki-nokta dağılımı (two-point distribution) başlangıç için seçilmiştir. R



Şekil 5.5 Reel ( $r_{ij}$ ) ve sanal ( $s_{ij}$ ) bileşenleri farklı ağırlıklı varyanslara sahip stokastik matris elemanlarının kullanıldığı SMF çözümlerinde parçacık başına entropinin ( $S/N$ ) zamanla değişimi gösterilmektedir. SMF çözümleri Gaussyen (G), tek-düze (Uniform-U) ve iki-durum (two-point-T) dağılımları kullanılarak yapılmıştır. Eş ağırlıklı durum ( $\overline{r_{ij}^2} = \overline{s_{ij}^2} = 1/4$ ) "R+I" ile; sadece reel kısmın olduğu durum ( $\overline{r_{ij}^2} = 1/2$  ve  $\overline{s_{ij}^2} = 0$ ) "R" ile, sadece sanal kısmın olduğu durum ( $\overline{s_{ij}^2} = 1/2$  ve  $\overline{r_{ij}^2} = 0$ ) "I" ile gösterilmektedir. Etkileşme şiddeti  $\nu_0 = 0.05 \Delta$  ve başlangıç durumu  $|\Psi(0)\rangle_1$  şeklindedir.

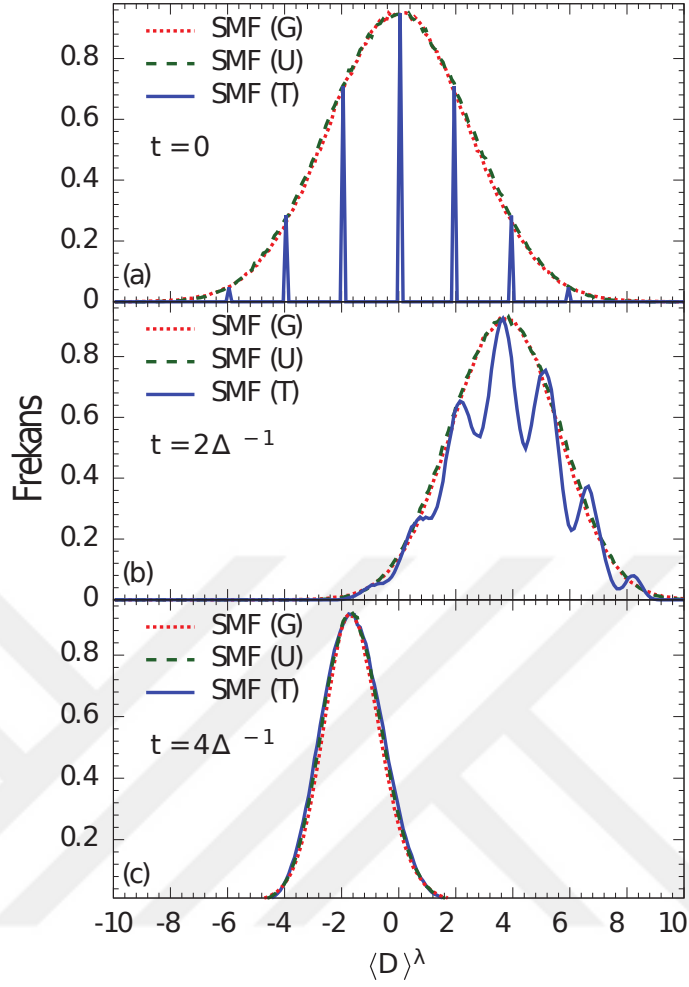
örnekleminde reel kısımların dağılımı  $t = 0$  başlangıç anında eş olasılıklı üç değere sahipken sanal kısımlar sıfır değerindedir. I örnekleminde ise tersi durum geçerlidir. Kısa zaman dilimi sonrasında  $t = 2 \Delta^{-1}$  anında, R ve I örneklemlerinde reel ve sanal kısımlar üç tepeli benzer dağılımlar oluşturur. Ancak aynı zaman dilimi sonrasında  $t = 4 \Delta^{-1}$  anında R ve I durumları için başlangıç anının zıttı dağılımlar sergilemektedir. R+I durumu için hem reel hem de sanal kısımlar tüm zamanlarda neredeyse simetrik bir dağılım sergilemektedir. Bu sonuçlar matris bileşenlerin reel ve sanal kısımları arasında dinamik korelasyonların nasıl geliştiğini göstermektedir. R+I durumunda reel ve sanal bileşenler birbirini dengeleme





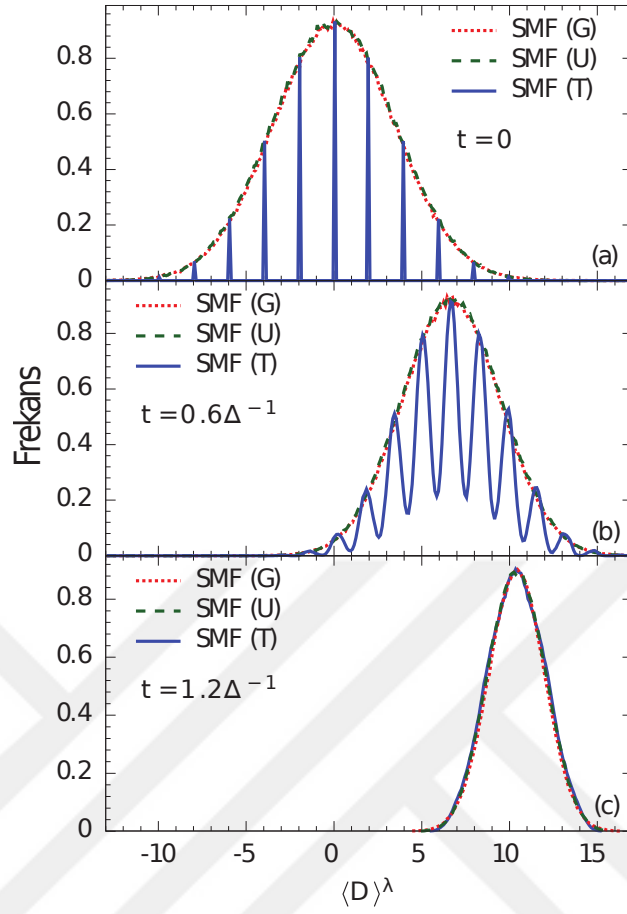
Şekil 5.6  $\rho_{\alpha\beta}^\lambda$  stokastik tek-parçacık yoğunluk matrisi elemanlarının reel ( $r_{\alpha\beta}$ ) ve sanal ( $s_{\alpha\beta}$ ) kısımlarının farklı zamanlardaki dağılımları. Dağılımlar  $\alpha = (+1, +1/2)$  ve  $\beta = (-1, +3/2)$  tek-parçacık durumlarına aittir. Matris elemanlarının başlangıç durumu dağılımı İki-nokta dağılımıdır. Etkileşme şiddeti  $v_0 = 0.05\Delta$  değerine sahiptir; ayrıca sistemin başlangıç durumu  $|\Psi(0)\rangle_1$  'dir.

eğiliminde iken eşit ağırlıklandırılmamış durumlarda sıfır etrafında keskin değerli tek tepeli ve sıfır etrafında üç tepeli dağılımlar ortaya çıkmaktadır. Şekil 5.5'e göre  $t = 2\Delta^{-1}$  zamanında kullanılan tüm dağılımlarda R ve I durumları için entropi, tam ve R+I durumlarına ait çözümlerden farklılaşmaya başlamaktadır. Bu zaman anında MF çözümü de tam çözüm ile uyumlu sonuçlar vermektedir (Şekil 5.2 (a)). Matris bileşenlerinin reel ve sanal kısımları arasındaki korelasyonların Ortalama-Alan denklemleri ile geliştiği söylenebilir. Bu sonuçlara dayanarak başlangıç dağılımı için reel ve sanal kısımları farklı ağırlıklandırılmış matris elemanlarının seçiminin SMF yaklaşımını geliştirdiği söylenemez. Bu durumda eşit ağırlıklandırılmış R+I durumunun iyi bir seçim olduğu düşünülebilir.



Şekil 5.7 Dipol işlemcisinin olaylar (events) üzerinden beklenen değerinin farklı SMF çözümlerinde üç farklı anda gözlenme sıklığının (frekans) dağılımları. Etkileşme şiddeti  $v_0 = 0.05\Delta$  değerine sahiptir; ayrıca sistemin başlangıç durumu  $|\Psi(0)\rangle_1$  'dir.

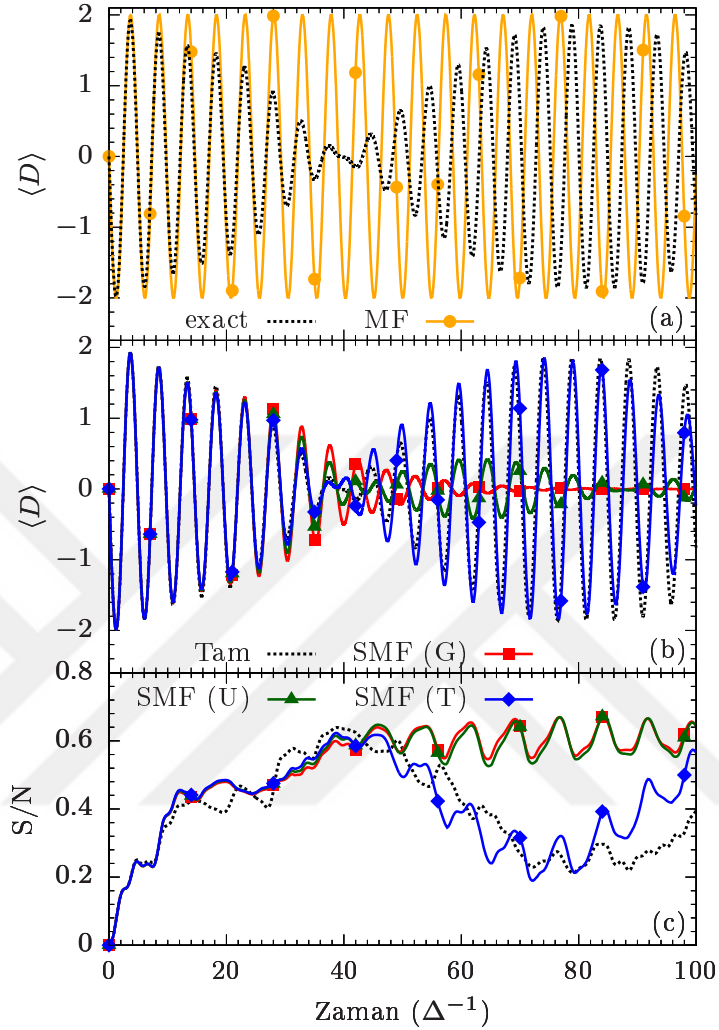
Şekil 5.7, Dipol işlemcisinin, üç farklı olasılık dağılımının kullanıldığı SMF çözümlerinde, her bir "olay (event)" için hesaplanan beklenen değerinin üç farklı anda gözlenme sıklığının (frekans) dağılımını göstermektedir. Başlangıç dağılımı Gaussiyen ve Tekdüze olan SMF çözümlerinde  $\langle D \rangle^\lambda$  'ların dağılımı sürekli ve Gaussiyen yapıdadır. İki-durumlu dağılım için ise frekans dağılımı kesiklidir. İki-durumlu dağılımın kendisinin kesikli olması bu sonuç ile doğrudan ilişkilidir. Ancak kısa bir süre sonra  $4\Delta^{-1}$  SMF (T)'e ait frekans dağılımı, tek-parçacık yoğunluk işlemcisinin stokastik matris elementleri arasında (5.6) denkleminin geliştirdiği korelasyonlar sonucunda hızlıca Gaussiyen biçim almaktadır.



Şekil 5.8 Şekil 5.7 'de incelenen frekans dağılımı, 24 tek parçacık durumu ve  $N = 12$  parçacıktan oluşan sistem için incelenmiştir.  $\langle D \rangle^\lambda$  değerlerinin dağılımı  $t = 0$  (a),  $t = 0.6\Delta^{-1}$  (b),  $t = 1.2\Delta^{-1}$  (c) anlarında karşılaştırılmıştır.

Şekil 5.8'deki inceleme  $N = 12$  parçacıklı ve 24 tane tek-parçacık durumundan oluşan sistem için yapılmış ve sonuçları gösterilmiştir. İncelemeye göre frekans dağılımında kesikli tepelerin sayısı parçacık sayısı arttıkça artmaktadır. Ayrıca frekans dağılımı,  $N = 6$  parçacıklı durumdan daha hızlı biçimde Gaussyen olmaktadır. Bu davranış merkezi limit teoremi (central limit theorem) ile uyumludur. Merkezi limit teoremine göre çok sayıda bağımsız rastgele değişkenlerin dağılımı Gaussyen biçimli olma eğilimindedir. Şekil 5.7 ve 5.8, başlangıçta kesikli frekans dağılımına sahip  $\langle D \rangle^\lambda$  değerlerinin ne kadar hızlı Gaussyen dağılıma evrildiğini; ayrıca tek-parçacık yoğunluk işlemcisinin matris elemanları arasındaki korelasyonların ne kadar hızlı geliştiğini göstermektedir. Şekil 5.7 ve 5.8 'deki  $\langle D \rangle^\lambda$  değerlerine ait frekans dağılımının zamanla gelişimi geniş zaman ölçeğinde incelenecek olursa, dağılımın Gaussyen biçiminin korunduğu; ancak İki-durum, Gaussyen

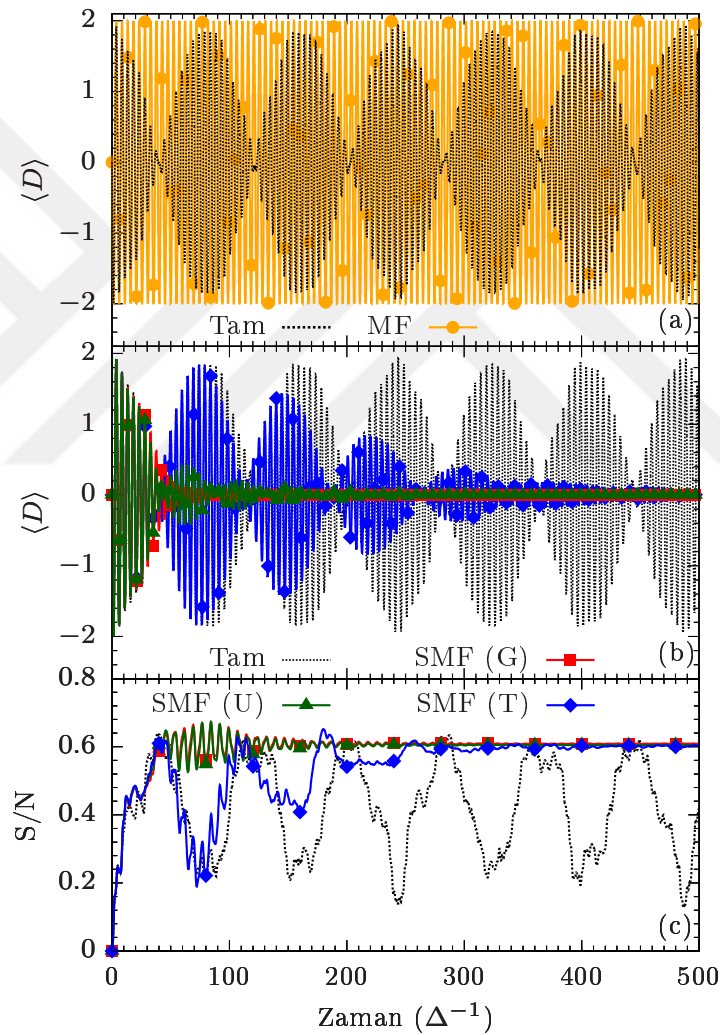
ve Tekdüze durumlar için frekans dağılımlarının merkez (centroids) ve genişlik (widths) değerlerinin zamanla birbirinden ayrıştığı anlaşılmaktadır.



Şekil 5.9 Şekil 5.2 'de incelenen dinamik süreçlerin tamamı  $|\Psi(0)\rangle_2$  başlangıç durumlu sistem için incelenmektedir.

Çok-parçacıklı sistemin seçilen farklı bir başlangıç durumu için de SMF çözümleri benzer davranış sergilemektedir. 5.1.2 alt-bölümünde ayrıntılandırılan  $|\Psi(0)\rangle_2$  başlangıç durumuna ait sonuçlar Şekil 5.9 ve 5.10 'de gösterilmektedir. Bu şekillerde incelenen fenomenler Şekil 5.2 ve 5.3 'de incelenenlerle aynıdır.  $|\Psi(0)\rangle_2$  başlangıç durumuna sahip sistemde  $\langle \hat{D} \rangle$  Dipol işlemcisinin beklenen değeri için MF dinamiği sabit genlikli salınımı vermektedir. Oysa sistemin tam (exact) çözümü genliği neredeyse sabit oranlı değişen salınımları işaret etmektedir (Şekil 5.9 (a) ve 5.10 (a)). İki-nokta olasılık dağılımının

kullanıldığı SMF (T) çözümü diğer SMF çözümlerine göre daha iyi yaklaşıklık sunmaktadır ve bu sonuç seçilen başlangıç durumundan bağımsızdır (Şekil 5.9 (b) ve 5.10 (b)). Şekil 5.9 (c) ve 5.10 (c) parçacık başına entropinin kısa ve uzun zaman ölçeğinde zamanla değişimini göstermektedir. Sistemin sahip olduğu başlangıç durumu simetrisinden dolayı dinamik boyunca entropi en büyük değerine ( $2 \ln 2$ ) ulaşamamaktadır. Gaussyen ve Tekdüze dağılımlı SMF çözümlerinde entropi kısa sürede sönümlenirken İki-nokta dağılımın kullanıldığı SMF (T) çözümü süreç içerisinde entropideki dalgalanmaları daha yakından ve iyi takip edebilmektedir.



Şekil 5.10 Şekil 5.3 'de incelenen dinamik süreçlerin tamamı  $|\Psi(0)\rangle_2$  başlangıç durumlu sistem için incelenmektedir.

## 5.2 Fermi-Hubbard Modeli

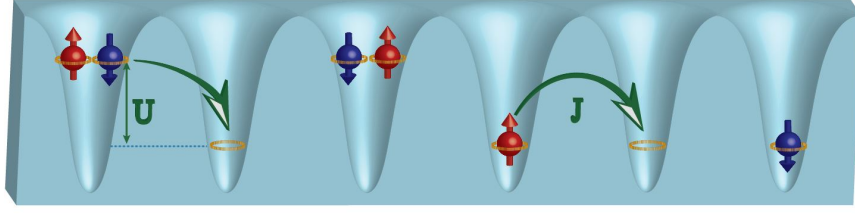
İkinci uygulama için Katıhal Fiziği'nde yaygın olarak kullanılan Fermi-Hubbard Modeli seçilmiştir. Fermi-Hubbard Modeli, katıların elektronik ve manyetik özelliklerinin belirlenmesi, metal-yalıtkan geçişlerinin incelenmesi gibi katıların bazı özelliklerinin incelenmesinde kullanılan bir modeldir (Essler vd 2005). Bu modelde sabit bir örgüde yer alan elektronlar birbirleriyle etkileşim halindedir. Böylesi bir sistemin Hamiltonyeni

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left( \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \hat{V}_{ei}(x_i) \right) + \sum_{i<j} \hat{V}_{ee}(|x_i - x_j|) \quad (5.18)$$

şeklinde gösterilir. Burada  $\hat{V}_{ei}(x_i) = -e^2/x_i$ , periyodik dizilmiş pozitif yüklü iyonlarla elektronların elektron-örgü etkileşimini; iki-parçacık potansiyeli  $\hat{V}_{ee}$  ise elektron-elektron arasındaki Coloumb etkileşmesini temsil etmektedir. Fermi-Hubbard Modeli iki temel varsayım üzerine tanımlanmıştır: (i) Elektronlar buldukları örgü noktasındaki iyonlara sıkıca bağlıdır (tight binding). İyonlar, elektronların komşu iyonlar dışında başkalarına tünelleme yapmasına izin vermeyecek kadar uzakta olduğu kabul edilir. Bu varsayım "tight binding approximation" olarak bilinmektedir. (ii) Sadece aynı iyondaki elektronlar birbirleriyle etkileşebilmektedir. İkinci kuantumlama gösteriminde modelin Hamiltonyeni şöyledir:

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \hat{a}_{i,\sigma}^\dagger \hat{a}_{j,\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow}. \quad (5.19)$$

Hamiltonyene göre  $\hat{a}_{i,\sigma}^\dagger$ ,  $i$  mevkisinde  $\sigma$  spin izdüşümüne sahip bir elektron yaratır.  $\hat{n}_{i,\sigma} = \hat{a}_{i,\sigma}^\dagger \hat{a}_{i,\sigma}$  sayı işlemcisini;  $\langle i, j \rangle$  sembolü  $i$  ve  $j$ 'nin birbirlerine en yakın iki farklı mevki olduğunu gösterir.  $J$  terimi tünelleme şiddetini;  $U$  ise etkileşme şiddetini temsil etmektedir. Şekil 5.11, 6 örgü noktasına yerleşen 6 elektrondan (3 tanesi spin yukarı 3 tanesi spin aşağı durumunda) oluşan Fermi-Hubbard Modeli'nin şematik gösterimidir.



Şekil 5.11 Fermi-Hubbard Modeli'nin şematik gösterimi

### 5.2.1 Tam çözüm, Ortalama-Alan ve Stokastik Ortalama-Alan dinamikleri

Fermi-Hubbard Modeli'nin bir boyutta sayısal çözümü tam yapılabilmektedir. Sayısal tam çözüme sistemin Hamiltonyenini köşegenleştirerek ya da kuantum Monte-Carlo yöntemi gibi yöntemlerle ulaşmak mümkündür (Essler vd 2005). Örgü noktasının artması ile köşegenleştirilmesi gereken matrisin boyutu büyük sayılara ulaşmaktadır ki bu durumda sistemin tam çözümünü yapmak oldukça zordur. Yine de bir boyutta yarı-dolu 10 tane örgü noktasından oluşan sistemin sayısal tam çözümü köşegenleştirme yöntemi ile yapılabilmektedir (Kingsley ve Robinson 2013).  $N$  tane örgü noktasından oluşan bir sistemde yarı-dolu durum için

$$C_N^{2N} = \frac{(2N)!}{N!N!} \quad (5.20)$$

şekillenim (configuration) vardır. Bu çalışmada  $N = 8$  parçacıktan oluşan sistem incelenmiştir. Böyle bir sistemin 12870 tane farklı şekillenimi vardır. 12870 x 12870 boyutuna sahip Hamiltonyen bir seyrek matristir (sparse matrix); bu yüzden sıradan bir bilgisayarın kapasitesini aşmayacak biçimde bu matris köşegenleştirilebilir. Seyrek matrisleri köşegenleştiren yinelemeli (iterative) Lanczos yöntemi gibi etkin algoritmalar geliştirilmiştir. Bu çalışmada Lin (1990), Kingsley ve Robinson (2013), Lin ve Gubernatis (1993), Jafari (2008), Siro ve Hartu (2012) tarafından yapılan çalışmalarda önerilen teknikler kullanılmıştır. Simetri ve korunumlu nicelikler dikkate alınarak Hamiltonyenin boyutu küçültülebilir.  $\hat{N}_\sigma = \sum_i \hat{n}_{i,\sigma}$  olmak üzere toplam spin işlemcisinin, bir z eksenini üzerindeki

izdüşümü,

$$\hat{S}_z = \frac{1}{2}(\hat{N}_\uparrow - \hat{N}_\downarrow), \quad (5.21)$$

Hamiltonyen ile sıra değiştirir. Özel olarak, başlangıç durumu  $\hat{S}_z|\Psi_0\rangle = 0$  bağıntısını sağlıyorsa zamanla gelişim boyunca bu özellik korunacaktır. Bu durumda, şekillenim sayısı

$$(C_{N/2}^N)^2 = \left[ \frac{(2N)!}{N!N!} \right]^2 \quad (5.22)$$

değerine iner.  $N = 8$  için toplam 4900 şekillenim vardır. Sistemin tam çözümü 4900 x 4900 boyutlu Hamiltonyen matrisi köşegenleştirildikten sonra belirlenebilir.

### 5.2.2 Çok-parçacıklı sistemin başlangıç durumu

Sistemin başlangıç durumunda tüm parçacıklar örgünün sol tarafında nüfuslanmıştır. Sol taraftaki ardışık 4 tane örgü mevkisine 4 tane spin yukarı ve 4 tane spin aşağı durumlu fermiyonlar yerleşmiştir. Arda kalan 4 örgü mevkisi boştur. Başlangıç durumu spin simetrisine sahip olduğu için ve Hamiltonyen bu simetriyi koruduğu için tam çözüme ait tek-parçacık yoğunluk işlemcisi spin simetrisini dinamik boyunca korur:

$$\rho_{i,\sigma';j,\sigma} = \rho_{i,\sigma;j,\sigma} \delta_{\sigma',\sigma} \quad (5.23)$$

Tek-parçacık yoğunluk işlemcisi için  $\rho_{i,j,\sigma} \equiv \rho_{i,\sigma;j,\sigma'}$  kısa yazımı kullanılarak Fermi-Hubbard Modeli'ne ait Ortalama-Alan denklemi

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \rho_{i,j,\sigma} = & - J \left( \rho_{i+1,j,\sigma} - \rho_{i,j-1,\sigma} + \rho_{i-1,j,\sigma} - \rho_{i,j-1,\sigma} \right) \\ & + U \left( \rho_{i,i,\sigma} - \rho_{j,j,\sigma} \right) \rho_{i,j,\sigma} . \end{aligned} \quad (5.24)$$

biçiminde ifade edilir.



SMF yaklaşımına ait dinamik denklemler (5.24) 'de  $\rho \rightarrow \rho^\lambda$  değişikliği yapılarak doğrudan elde edilir. Önceki uygulamada dikkate alınan üç farklı dağılımın yanı sıra kurtosis değeri ( $\gamma = 1.4$ ) olan "Bimodal" dağılım SMF Yaklaşımı'nın bu uygulamasına dahil edilmiştir. SMF(B) gösterimi bu dağılım için kullanılacaktır.

### 5.2.3 Araştırma bulguları

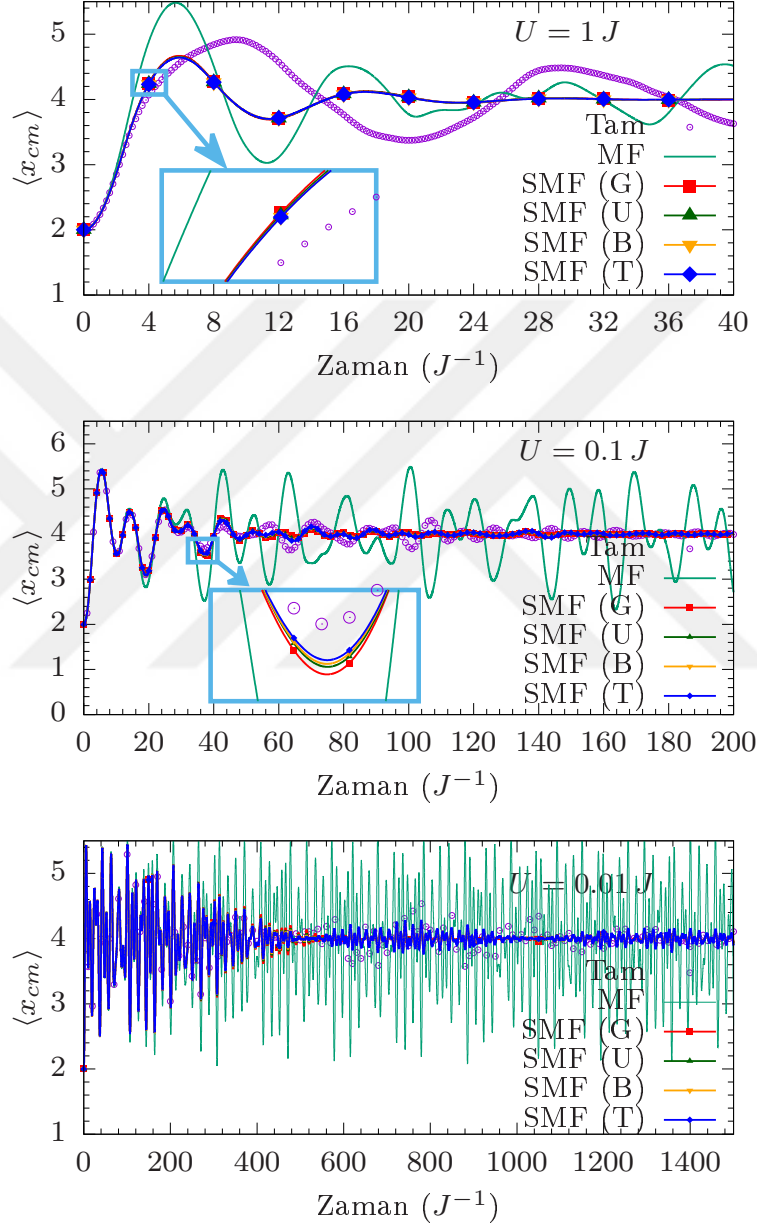
Fermi-Hubbard Modeli'nde bir kolektif gözlenebilir olan kütle merkezi konumunun zamanla değişimi incelenecektir:

$$\langle \hat{x}_{cm} \rangle = \sum_{i=1}^N \frac{x_i n_i(t)}{N} = \sum_{i=1}^N \left( i - \frac{1}{2} \right) \frac{n_i(t)}{N}. \quad (5.25)$$

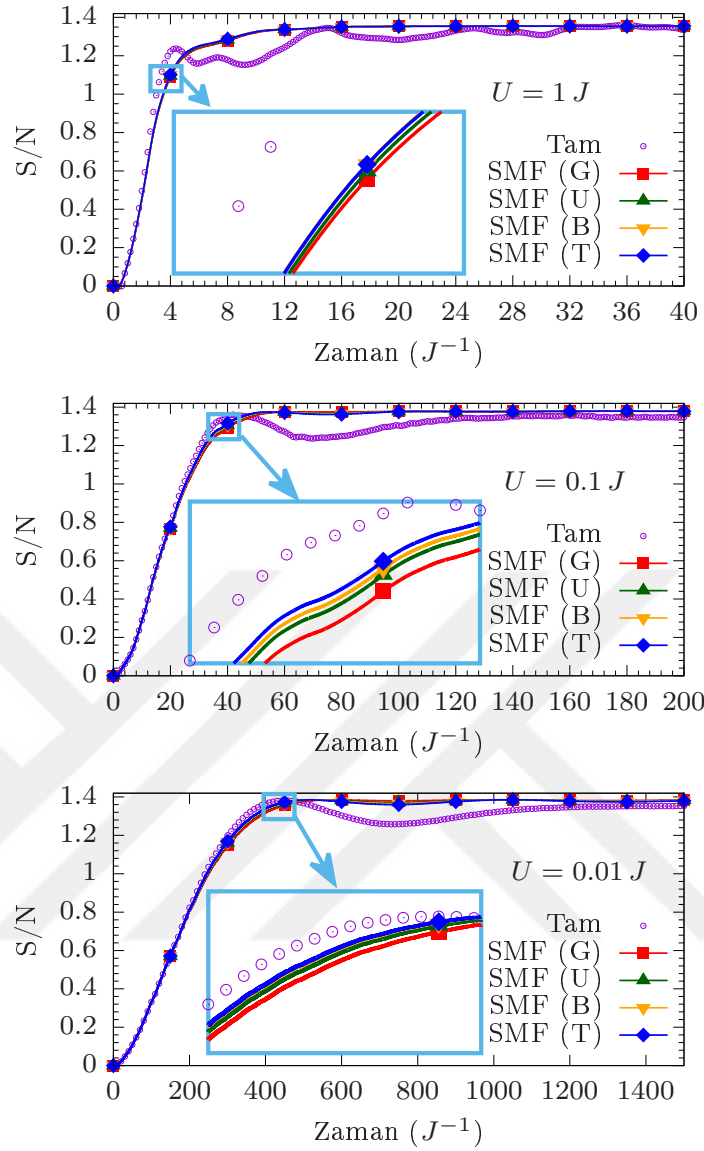
Modelde her bir örgü noktasının konumu için  $x_i = \left( i - \frac{1}{2} \right)$  gösterimi kullanılmaktadır ( $i = 1, 2, \dots, N$ ). Burada  $x_i$ 'ler boyutsuz kabul edilmiştir.

Şekil 5.12, fermiyonların kütle merkezi konumunun zamanla değişimini göstermektedir.  $U = 1J$  kuvvetli bağlaşım durumunda farklı başlangıç durumu dağılımına sahip SMF çözümleri, Ortalama-Alan (MF) çözümü ve tam çözüm ile karşılaştırılmaktadır. Ortalama-Alan (MF) çözümü tüm SMF çözümlerinden daha erken zamanda tam çözümden uzaklaşmaktadır. Bu modelin kuvvetli bağlaşım durumunda SMF çözümleri arasında fark yoktur.  $U = 0.1J$  bağlaşım şiddetli durumda Ortalama-Alan çözümü  $t = 40J^{-1}$  civarında tam çözümden uzaklaşmaya başlar. SMF çözümleri daha uzun süre tam çözüme takip etmektedir. Aralarında fark az da olsa SMF(T) çözümünün diğer SMF çözümlerinden daha iyi olduğu görülmektedir.  $U = 0.01$  zayıf bağlaşım durumunda SMF çözümleri  $t = 500J^{-1}$  anında tam çözümden uzaklaşmaya başlamaktadır. Zamanın öte değerlerinde Ortalama-Alan Yaklaşımı'nın kötü sonuç verdiği açıktır. Uzun zaman ölçekli dinamik süreçte Ortalama-Alan Yaklaşımı'nın öngördüğü salınım genliği ile tam çözüme ait olan arasında büyük farklar oluşmaktadır. Ancak SMF çözümlerinin tamamının öngördüğü salınım genlikler tam çözüm ile güzel bir uyum içerisindedir. Bunlar içinde SMF(T) diğer SMF çözümlerine göre genliğe ilişkin daha iyi sonuçlar vermektedir. Bu açıdan bakıldığında SMF(T) diğerlerine kıyasla yitim (dissipation) etkilerini en iyi tahmin eden SMF yaklaşımıdır.

Benzer davranış parçacık başına tek-parçacık entropi değerinin zamanla değişiminde görülmektedir. Dinamik boyunca Ortalama-Alan Yaklaşımı'na ait entropi değeri sıfırdır. Tüm bağlaşım şiddetleri için SMF(T), fark az olsa dahi diğerlerinden daha iyi çözüm sunmaktadır.



Şekil 5.12 Farklı bağlaşım durumları için kütle merkezinin zamanla değişim grafikleri



Şekil 5.13 Farklı bağlaşım durumları için parçacık başına tek-parçacık entropisinin zamanla değişimi gösterilmektedir. Alt-şekiller sırasıyla  $U = 1J$ ,  $U = 0.1J$  ve  $U = 0.01J$  bağlaşım şiddetlerinde kurgulanan sistemin davranışlarını betimlemektedir.

SMF Yaklaşımı'nın geçerlilik süresi bağlaşım şiddeti ile ters orantılıdır (Polkovnikov 2003). Dört farklı dağılıma sahip SMF sonuçları arasındaki fark, Değişkin Lipkin-Meshkov-Glick Modeli'ndeki kadar belirgin değildir. Fiziksel durumların yanı sıra bağlaşım şiddetine bağlı olarak, farklı dağılımların sonuçlar üzerindeki etkilerinin küçük ya da büyük olabileceği yorumu yapılabilir. Klasik dağılımların, dinamiğe kazandıramadığı etkilerin var olabileceği ve yitip kalan bu etkilerin incelenen fiziksel probleme özgü olabileceği düşünülebilir. Eksik kalan bu etkiler bazı kuantum sistemlerde önemsiz, bazılarında ise önemli olabilir.

### 5.3 Ortalama-Alan Ötesi Yaklaşımların Karşılaştırılması

Ortalama-alan ötesi yaklaşımların tam çözümü tahmin etme kabiliyetlerinin karşılaştırılması önemli bir çalışmadır. Bu amaçla, bu bölümde tez kapsamında incelenen Ortalama-Alan (MF yada TDHF), TDDM, SMF ve STDHF yaklaşımların tam çözüme yakınsama becerileri mLMG modeli üzerinde sınanacaktır. Problemin başlangıç koşulları ve modelin parametreleri ilk uygulamada kullanılanlar ile aynıdır. Ortalama-Alan (MF) ve TDDM yaklaşımlarına ait hareket denklemleri EK 4 kısmında yer almaktadır. Karşılaştırmada dikkate alınacak SMF yaklaşımı iki-nokta dağılımı ile belirlenen SMF(T)'dir.

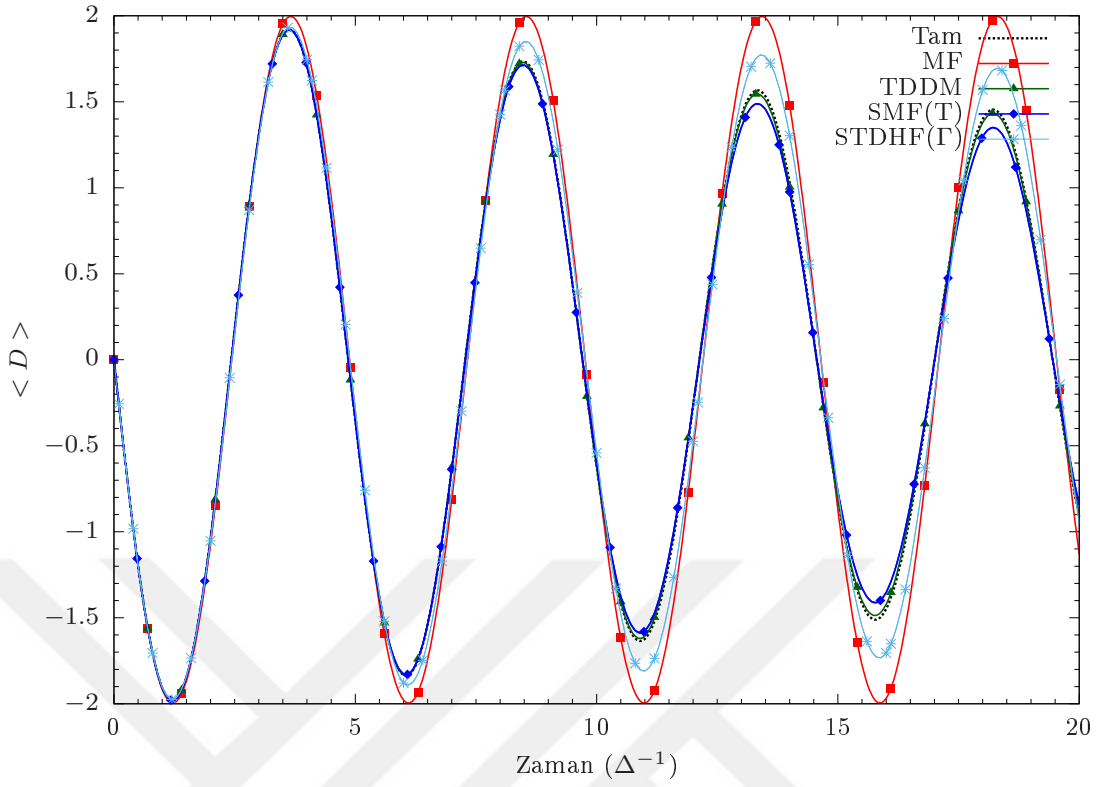
STDHF yaklaşımının uygulamasına ilişkin iki niceliğe ( $\tau_{STDHF}$  ve  $\Gamma$ ) açıklık getirilmelidir. Slama ve çalışma arkadaşlarının yaptıkları çalışmada (Slama vd 2015),  $\tau_{STDHF}$  zaman adımına ilişkin sıralanan kabuller dikkate alınarak uygulamada  $\tau_{STDHF} = 0.1 \Delta^{-1}$  değeri alınmıştır. Uygulamada Dirac-Delta fonksiyonu yerine bu fonksiyonu taklit eden bir  $\delta_\Gamma$  uygulamada kullanılmıştır.  $\Gamma$  sembolü Delta fonksiyonunun genişliğini temsil eden bir serbest parametredir. Uygulamada kullanılan ifadesi şöyledir:

$$\delta_\Gamma(x) = \lim_{\Gamma \rightarrow 0} \frac{2\Gamma \sin^2(w/2\Gamma)}{\pi w^2}. \quad (5.26)$$

Burada  $w$ , indisleri yazılmamış olsa da bir Slater durumundan başka bir Slater durumuna sıçrama olasılığıdır. Genişliğin sıfıra yeterince yakın; ancak çok küçük olmaması gerekir.  $0.01\Delta - 1\Delta$  arasındaki değerlerde yapılan denemelerle en uygun parametrenin  $\Gamma = 0.7\Delta$  olacağı düşünülmüştür. Ayrıca STDHF yaklaşımında kullanılan Slater durumları topluluğu için  $\mathcal{N} = 10^5$  tane olay (ya da örneklem) kullanılmıştır.

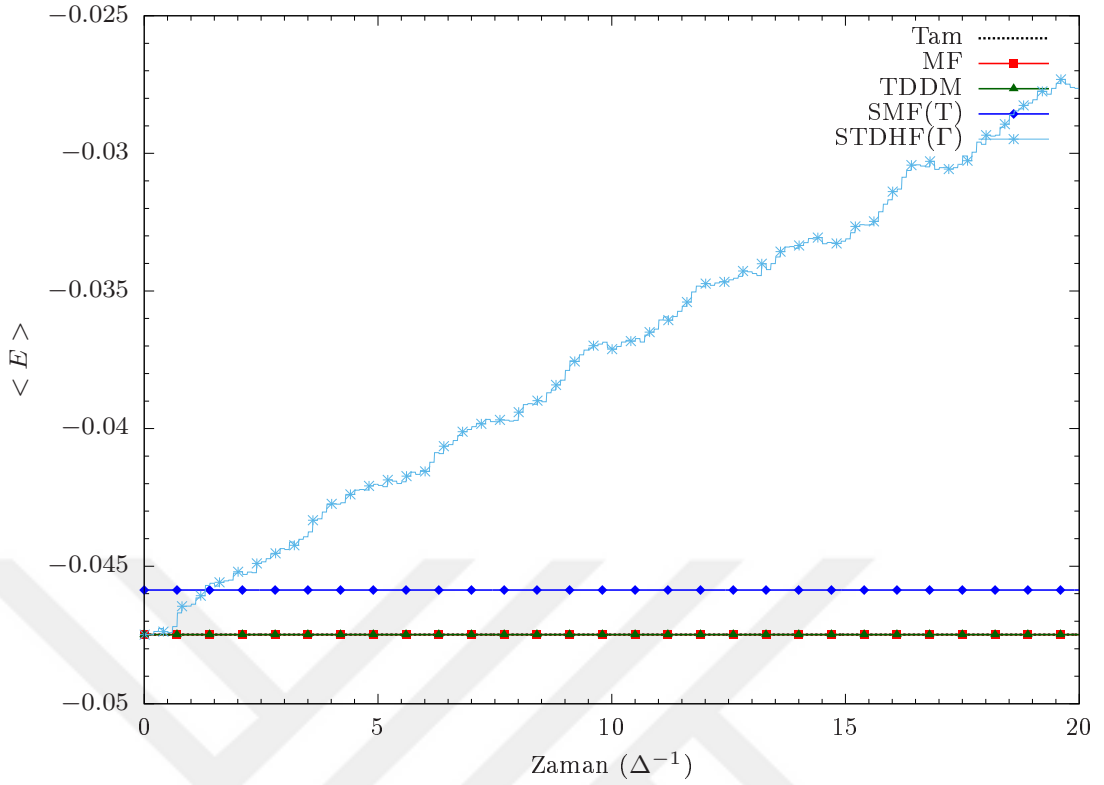
#### 5.3.1 Karşılaştırma bulguları

Ortalama-alan ötesi yaklaşımlar ilk olarak Dipol işlemcisinin ortalama değerinin zamanla gelişimine bakılarak karşılaştırılmaktadır.  $0 - 20 \Delta^{-1}$  zaman aralığında incelenen süreçte TDDM yaklaşımı, ortalama-alan ötesi yaklaşımlar içinde en iyi dinamiği tarif etmektedir (Şekil 5.14). Stokastik yöntemler içinde SMF yaklaşımı STDHF'den daha doğru tam çözüme yaklaşmıştır. Ortalama-Alan (MF) dinamiği ise zamanla sabit genlikli salınımı işaret etmektedir.



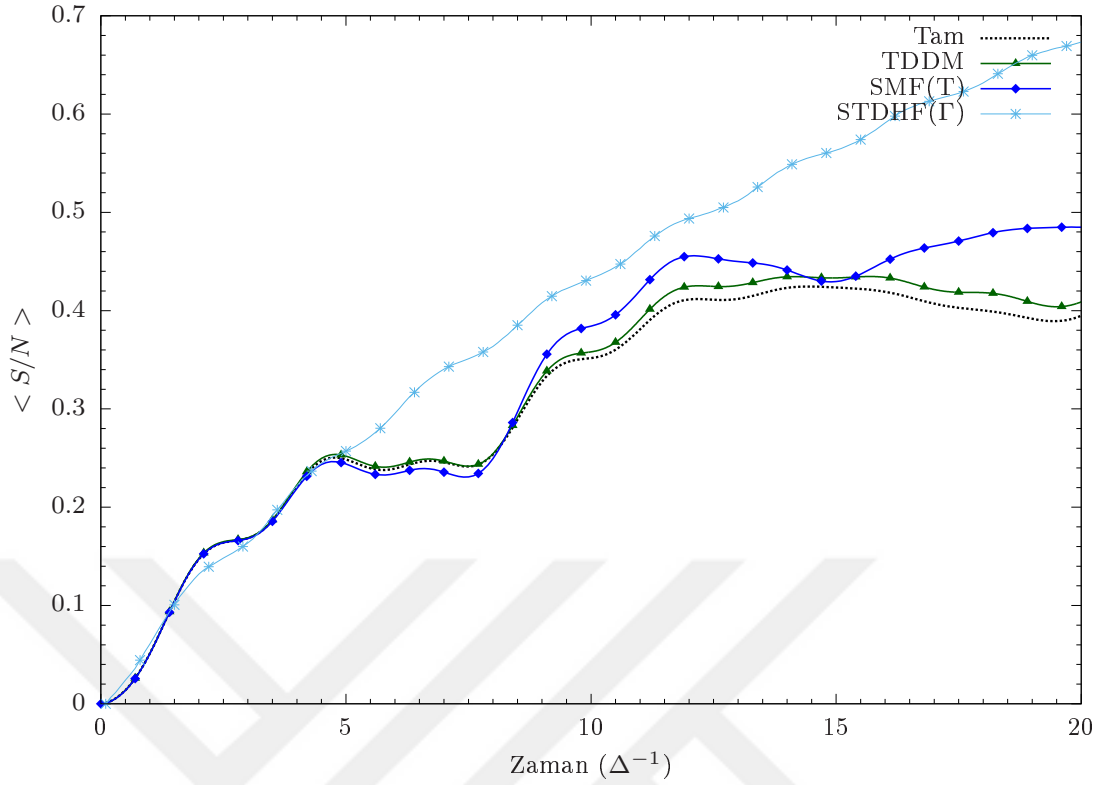
Şekil 5.14 Farklı yaklaşımlara göre dipol işlemcisinin beklenen değerinin zamanla değişim grafiği

İkinci karşılaştırma için toplam enerji seçilmiştir. Şekil 5.15 'e göre STDHF dışında diğer yaklaşımlarda enerji korunmaktadır. SMF yaklaşımında gözlenen küçük enerji farkı, kullanılan olay sayısının ( $\mathcal{N} = 10^5$ ) kare köküyle ters orantılıdır.



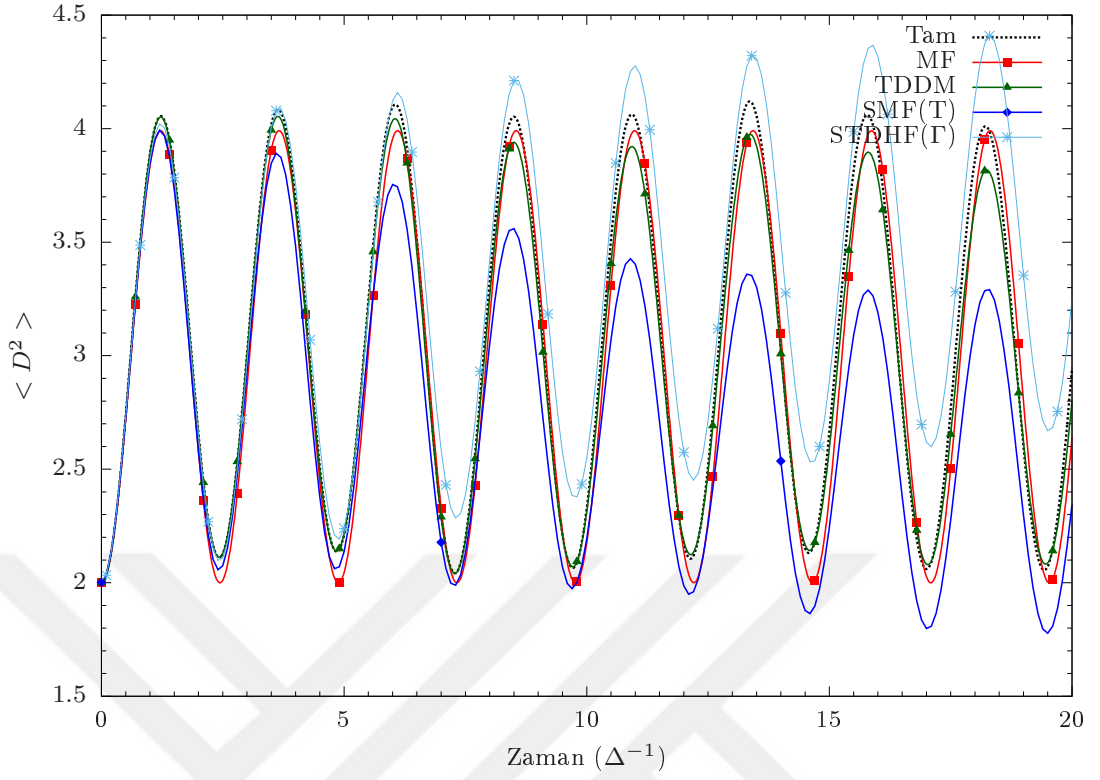
Şekil 5.15 Farklı yaklaşımlara göre toplam enerjinin beklenen değerinin zamanla değişim grafiği

Şekil 5.16 parçacık başına tek-parçacık entropisinin zamanla değişimini göstermektedir. Ortalama-Alan Yaklaşımı'nda dinamik boyunca entropi sıfır değerinde olduğundan şekilde yer almamaktadır. Bu sonuçlara ek olarak tüm yaklaşımlarda parçacık sayısı dinamik boyunca korunmaktadır. Tek-parçacık gözlenebilirlerinin dinamik özellikleri incelenerek yapılan karşılaştırmalarda edinilen tutarlı sonuçlar göstermektedir ki TDDM, incelenen ortalama-alan ötesi yaklaşımlar içerisinde en iyi sonuçları veren yaklaşımdır. Serbest parametreye bağlı olarak sonuçları değişebilen STDHF yaklaşımı ise süreci en kötü tahmin eden yaklaşımdır.

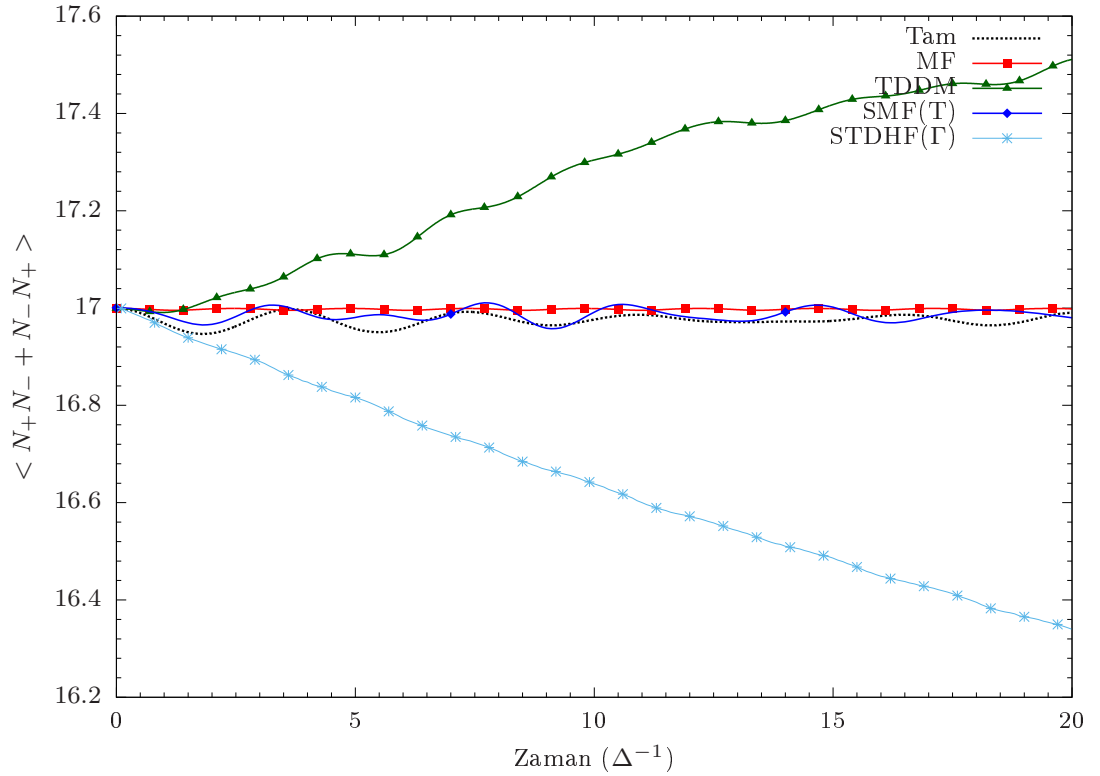


Şekil 5.16 Farklı yaklaşımlara göre parçacık başına tek-parçacık entropisinin zamanla değişim grafiği

İki-parçacık gözlenebilirlerinin dikkate alınmasıyla bu karşılaştırma zenginleştirilebilir. Ancak yukarıdaki karşılaştırmalardan elde edilen tutarlı sonuçlar, iki-parçacık gözlenebilirleri için elde edilenlerden beklenmemelidir. İki farklı iki-parçacık gözlenebilirin zamanla beklenen değerlerinin değişim grafikleri aşağıda verilmektedir. Şekil 5.17 'te dipol işlemcisinin karesinin beklenen değeri; Şekil 5.18'te ise  $\hat{N}_+\hat{N}_- + \hat{N}_-\hat{N}_+$  işlemcisinin beklenen değerinin zamanla değişimi incelenmektedir. Burada  $\hat{N}_+$  ve  $\hat{N}_-$  sırasıyla, mLMG modelinde tanımlanan üst ve alt enerji bantlarını işgal eden toplam parçacık sayısını temsil etmektedir. Bu şekillerden elde edilen sonuçlar yukarıdaki karşılaştırmalar ile çelişmektedir. Örneğin Şekil 5.17'e göre Ortalama-Alan (MF) en iyi yaklaşımdır. Bu sonucun rastlantısal olduğunu düşünmek yanlış olmaz. Ortalama-Alan ve tez boyunca incelenen öte yaklaşımlar (TDDM, SMF, STDHF), tek-parçacık gözlenebilirleri için iyi bir çerçeve sunarken; iki-parçacık gözlenebilirleri için aynı şeyi söylemek mümkün değildir.



Şekil 5.17 Farklı yaklaşıma göre dipol işlemcisinin karesinin ( $\hat{D}^2$ ) beklenen değerinin zamanla değişim grafiği



Şekil 5.18 Farklı yaklaşıma göre " $\hat{N}_+\hat{N}_- + \hat{N}_-\hat{N}_+$ " işlemcisinin beklenen değerinin zamanla değişim grafiği



## 6. SONUÇ VE DEĞERLENDİRMELER

Çok-parçacıklı sistemlerin kuantal tasviri fiziğin zor problemlerinden biridir. Sistemi nitelemek için dikkate alınması gereken serbestlik derecelerinin çokluğu bu zorluğun başlıca nedenidir. Çok sayıda serbestlik derecesi ile betimlenen sisteme ait bilgiyi işleme ve depolama işi oldukça zahmetli ve pahalıdır. Günümüzün bilgisayarları ile incelenebilecek çok-parçacık problemi sayısı bu nedenle sınırlıdır. Böylesi bir durum yaklaşık yöntemlere başvurmayı kaçınılmaz kılmaktadır. İncelenen sistemde aranan özellikleri betimleyen serbestlik dereceleri arasında bir önem hiyerarşisi belirlenebilir. Yalnızca özel olarak seçilmiş serbestlik dereceleri ile karmaşık sistem daha basit bir çerçevede yaklaşık olarak incelenebilir. Hiyerarşinin birinci basamağını tek-parçacık serbestlik dereceleri oluşturur. Ortalama-Alan Yaklaşımı sistemin tek-parçacık özellikleri için kabul edilebilir ancak eksik bir tasvir sunar. Eksik olan etkileri Ortalama-Alan Yaklaşımı'nın basit çerçevesinden ayrılmadan telafi etmek için çeşitli ortalama-alan ötesi yöntemler önerilebilir. SMF ve STDHF bu yöntemlerden iki tanesidir.

SMF yaklaşımında amaç başlangıç durumu dalgalanma etkilerini dinamiğe kazandırmaktır. Bu amaçla SMF yaklaşımında başlangıç durumu stokastik olarak belirlenmiş farklı başlangıç durumlarının klasik bir topluluğu ile betimlenir. Topluluğun her bir elemanı kendi öz-uyumlu gelişim denklemi ile zaman içinde ötelenir. Herhangi bir anda sisteme ait bilgi, topluluk ortalamasıyla belirlenir. Topluluğun başlangıç durumu ortalama ve ikinci merkezi moment değerleri, sistemin başlangıç durumu kuantal ortalama ve ikinci merkezi moment değerleriyle örtüşecek biçimde rastgele seçilir. Rastgele seçim, sistemin tek-parçacık özelliklerini niteleyen yoğunluk işlemcisinin köşegen dışı elemanlarına atanan sayılarla gerçekleştirilir. Orijinal formülasyonunda bahsi geçen rastgele atamanın Gaussyen dağılımlı sayılardan seçilmesi önerilmiştir. Tez çalışması kapsamında yapılan incelemelerle SMF fikri geliştirilmiştir. Hesaplanan üç ve dördüncü merkezi moment değerleri, kurtosisi minimum olan dağılımla belirlenen klasik topluluğun sistemin kuantal tasvirini geliştirebileceği sonucuna ışık tutmuştur.

STDHF yaklaşımında amaç zamanla gelişim boyunca ortaya çıkan iki-parçacık korelasyon etkilerini, Ortalama-Alan Yaklaşımı'nın yalın çerçevesinden ayrılmadan dinamiğe katmaktır. Bu etkilere çarpışma etkileri (collisional effects) de denmektedir. STDHF Yaklaşımı'nda da tıpkı SMF'de olduğu gibi istatistiksel topluluk kullanılır. SMF'den farklı olarak, topluluğun tüm elemanları aynı başlangıç durumundan başlatılır. STDHF Yaklaşımı'nda stokastik olarak belirlenenler matris elemanları değil kuantal yörüngelerdir. STDHF Yaklaşımı "kuantum sıçrama (quantum jump)" olgusuna dayanır. Bu yaklaşımda sistem belirlenen zaman aralıklarında mümkün durumlardan birine sıçrama yapar. Hangi duruma sıçramanın gerçekleşeceği rastgele seçilir. Bu seçim için Fermi'nin Altın Kuralı kullanılır. Başka bir deyişle sistemin hangi duruma ne kadar olasılıkla sıçrayacağı hesaplanır. Rastgele bir sayı belirlenerek mümkün durumlardan bir tanesi seçilir. Yeni durum sıçramanın gerçekleşeceği öte zaman anına kadar kendi öz-uyumlu gelişim denklemi ile zaman içinde ötelenir. Herhangi bir andaki sistem bilgisi topluluk ortalamasından edinilir.

Tez çalışması kapsamında incelenen ortalama-alan ötesi stokastik yaklaşımlar iki farklı model kullanılarak sınanmıştır. Birinci uygulamada SMF yaklaşımının farklı versiyonları, "Değişkin Lipkin-Meshkov-Glick Modeli" üzerinde karşılaştırılmıştır. Çok-parçacıklı sistemin zaman içinde gelişen iki dinamik değişkeni, Dipol işlemcisi ve Entropi, farklı yaklaşımların karşılaştırma belirteci olarak seçilmiştir. Başlangıç koşulları stokastik seçilen SMF yaklaşımlarında, rastgele seçilen matris elemanları için farklı olasılık dağılımları belirlenmiştir: Gaussyen, Tek-düze (Uniform) ve İki-nokta (two-point) dağılımları. Bunlar içinde kurtosis değeri en küçük olan dağılım İki-nokta dağılımıdır. En küçük kurtosis değerine sahip dağılımın başlangıç şartlarında kullanılmasının SMF dinamiğini geliştireceği hipotezi öne sürülmüştür. Uygun programlama dilinde bilgisayar kodu geliştirerek modelin dinamik denklemleri simüle edilmiş ve sonuçları beşinci bölümde gösterilmiştir. Sonuçlar yukarıda beyan edilen hipotezi doğrulamaktadır: İki-nokta (two-point) olasılık dağılımının kullanıldığı SMF (T), diğerlerine kıyasla tam çözümü daha iyi ve uzun zamanda takip etmektedir. Ayrıca model çerçevesinde incelenen tüm SMF çözümlerinin Ortalama-Alan (TDHF) Yaklaşımı'ndan daha iyi sonuçlar verdiği anlaşılmaktadır.

Farklı dağılımlara sahip SMF yaklaşımlarının seçilen modele ne ölçüde bağımlı olduğunu sınamak amacıyla ikinci bir model belirlenmiştir: Fermi-Hubbard Modeli. Bu modelde

gerçekleştirilen simülasyonlar SMF yaklaşımına ilişkin öne sürülen hipotezi yine doğrulamaktadır. Ancak edinilen sonuçlarda yaklaşımların belirlediği çözümler arasındaki fark, birinci uygulamadaki kadar belirgin değildir. Rastgele seçilen farklı başlangıç koşullarının Ortalama-Alan Yaklaşımı'na kazandırdığı başlangıç kuantum dalgalanmalarına ilişkin etkilerin, incelenen sistemin içsel özelliklerine ya da parçacıklar arası etkileşim şiddetine bağlı olarak dinamiği önemli/önemsiz ölçüde geliştirdiği sonucu çıkarılabilir. Bu sonuca göre minimum kurtosis değerine sahip olasılık dağılımının kullanıldığı SMF yaklaşımı diğer SMF yaklaşımlarından daha iyi sonuçlar vermektedir. Yaklaşımın gelişimi ne ölçüde iyileştirdiğini incelenen problemin kendisi belirlemektedir.

SMF ve STDHF yaklaşımlarının hangi ölçüde ortalama-alan ötesi etkilerini dinamiğe kazandırdığını belirlemek için TDDM Yaklaşımı referans alınmıştır. TDDM iki-parçacık korelasyon etkilerini hesaba katan deterministik bir yaklaşımdır. Başka bir deyişle sistemin zaman içindeki durumu yaklaşıma has bir diferansiyel denklem ile belirlenir. Üçüncü uygulamada, tez kapsamında incelenen tüm ortalama-alan ötesi yaklaşımların birbirlerine olan üstünlükleri "Değişkin Lipkin-Meshkov-Glick Modeli" üzerinde gerçekleştirilen simülasyonlar ile değerlendirilmiştir. Bulgular TDDM'nin en iyi, STDHF'in ise en kötü yaklaşım olduğunu işaret etmektedir. TDDM Yaklaşımı, korelasyonların zaman içinde ötelendiği bir çerçevede tanımlıdır; bu sebeple bağımsız parçacık çerçevesinde tanımlı SMF ve STDHF yaklaşımlarından daha iyi sonuçlar vermesi beklenmektedir. Stokastik yöntemler içinde SMF'in, STDHF'den daha başarılı tahminlerde bulunduğu anlaşılmaktadır. Ek olarak STDHF'in bir serbest parametreye ( $\Gamma$ ) bağlı olması bu yaklaşımın gerçekçi sistemlere uygulanabilirliğini sorgulatmaktadır.

Tez kapsamında incelenen yaklaşımlara ilişkin bağıl değerlendirmeler ileride önerilebilecek yeni yöntemler için yol gösterici niteliğindedir. Açık problemleri ve geliştirilmeye müsait yöntemleriyle, çok-parçacıklı sistemleri inceleyen disiplinler, yeni araştırmacılarını beklemektedir.

## KAYNAKLAR

- Abe, Y., Ayik, S., Reinhard, P.-G., Suraud, E. 1996. On stochastic approaches of nuclear dynamics. *Physics Reports*, 275, 49.
- Akbari, A., Hashemi, M. J., Rubio, A., Nieminen, R. M., and van Leeuwen R. 2012. Challenges in truncating the hierarchy of time-dependent reduced density matrices equations. *Phys. Rev. B* 85, 235121.
- Assie, M., Lacroix, D. 2009. Probing Neutron Correlations through Nuclear Breakup. *Phys. Rev. Lett.* 102, 202501.
- Ayik, S. 2008. A stochastic mean-field approach for nuclear dynamics. *Phys. Lett. B* 658, 174.
- Ayik, S., Washiyama, K., and Lacroix, D. 2009. Fluctuation and dissipation dynamics in fusion reactions from a stochastic mean-field approach. *Phys. Rev. C* 79, 054606 (2009).
- Ayik, S., Yilmaz, O., Yilmaz, B., Umar, A. S., Gokalp, A., Turan, G., and Lacroix, D. 2015. Quantal description of nucleon exchange in a stochastic mean-field approach. *Phys. Rev. C* 91, 054601.
- Ayik, S., Yilmaz, O., Yilmaz, B., Umar, A. S. 2016. Quantal nucleon diffusion: Central collisions of symmetric nuclei. *Phys. Rev. C* 94, 044624.
- Ayik, S., Yilmaz, B., Yilmaz, O., Umar, A. S., and Turan, G. 2017. Multinucleon transfer in central collisions of  $^{238}\text{U} + ^{238}\text{U}$  *Phys. Rev. C* 96, 024611.
- Ayik, S., Yilmaz, B., Yilmaz O., and Umar, A. S. 2018. Quantal diffusion description of multinucleon transfers in heavy-ion collisions. *Phys. Rev. C* 97, 054618 .
- Ayik, S., Yilmaz, B., Yilmaz O., and Umar, A. S. 2019. Quantal diffusion approach for multinucleon transfers in Xe + Pb collisions, *Phys. Rev. C* 100, 014609.
- Balescu, R. 1975. *Equilibrium and Non Equilibrium Statistical Mechanics*. Wiley, New York.
- Balian, R., Véneroni, M., 1981. Time-Dependent Variational Principle for Predicting the Expectation Value of an Observable. *Phys. Rev. Lett.* 47, 1353.
- Ballentine, L.E. 1970. *The Statistical Interpretation of Quantum Mechanics*. *Review of Modern Physics*, 42 (4).

- Ballentine, L.E., Yang, Y., Zibin J.P. 1994. Inadequacy of Ehrenfest's theorem to characterize the classical regime. *Physical Review A*, 50 (4).
- Bednorz, A., and Belzig, W. 2011. Fourth moments reveal the negativity of the Wigner function. *Phys. Rev. A* 83, 052113.
- Blaizot, J.-P. ve Ripka, G. 1986. *Quantum Theory of Finite Systems*. The MIT Press, 662, London, England.
- Bonche P, Koonin S, Negele JW. 1976. One-dimensional nuclear dynamics in the time-dependent Hartree-Fock approximation. *Phys Rev C*. 13:1226.
- Bonitz, M., 2016. *Quantum Kinetic Theory*. Springer, 412, London, England.
- Bogoliubov, N. N. 1946. Kinetic Equations, *J. Phys. (URSS)* 10, 256.
- Born, H. and Green, H.S. 1946. A general kinetic theory of liquids I. The molecular distribution functions. *Proc. R. Soc. A* 188, 10.
- Cassing, W., and Pfitzner, A. 1992. Self-consistent truncation of the BBGKY hierarchy on the two-body level. *Z. Phys. A* 342, 161.
- Cusson R.Y., Smith R.K., Maruhn J.A. 1976. Time-dependent Hartree-Fock calculation of the reaction  $^{16}\text{O} + ^{16}\text{O}$  in three dimensions. *Phys Rev Lett.*, 36:1166.
- Davies K.T.R., Maruhn-Rezwani V., Koonin S.E., Negele J.W. 1978. Test of the time dependent mean-field theory in Kr-induced strongly damped collisions. *Phys. Rev. Lett.*, 41:632.
- Davies K.T.R., Sandhya Devi K.R., Strayer M.R. 1979. Time-dependent Hartree-Fock calculations of  $^{86}\text{Kr} + ^{139}\text{La}$  at  $E_{lab} = 505, 610$  and  $710$  MeV. *Phys Rev C*, 20:1372.
- De Blasio, F. V., Cassing, W., Tohyama, M., Bortignon, P. F., and Broglia, R. A. 1992. Nonperturbative study of the damping of giant resonances in hot nuclei. *Phys. Rev. Lett.* 68, 1663.
- Dirac, P. A. M. 1930. Note on exchange phenomena in the thomas atom. *Proc. Camb. Philos. Soc.* 26:376.
- Dreizler, R. M. and Gross, E. K. U. 1990. *Density Functional Theory*. Springer, Berlin.
- Essler, F. H. L. Frahm, H., Göhmann, F., Klümper, A. and Korepin, E. 2005. *The One-Dimensional Hubbard Model*. Cambridge University Press.

- Flocard H., Koonin S.E., Weiss M.S. 1978. Three-dimensional time-dependent Hartree-Fock calculations: application to  $^{16}\text{O} + ^{16}\text{O}$  collisions. *Phys Rev C*, 17:1682.
- Glick, A. J., Lipkin, H. J., and Meshkov, N. 1965. Validity of many-body approximation methods for a solvable model: (III). Diagram summations. *Nuclear Physics*, vol. 62, no. 2, pp. 211–224.
- Godbey, K., Umar, A.S., and Simenel, C. 2019. Deformed shell effects in  $^{48}\text{Ca} + ^{249}\text{Bk}$  quasi-fission fragments. *Phys. Rev. C* 100, 024610.
- Hohenberg, P. and Kohn, W. 1964. Inhomogeneous Electron Gas. *Phys. Rev.* 136, B864.
- Jafari, S. A. 2008. Introduction to Hubbard model and exact diagonalization. *IJPR* 8, 113.
- Kingsley, O. N. and Robinson, O. 2013. Exact Diagonalization of the Hubbard Model: Ten-electrons on Ten-sites. *Res. J. Appl. Sci. Eng. Technol.*, 6(21), 4098.
- Kirkwood, J.G. 1946. The statistical mechanical theory of transport processes I. General theory. *J. Chem. Phys.* 14, 180.
- Kohn, W., and Sham, L.J. 1965. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. *Phys. Rev.* 140, A1133.
- Koonin S.E., Davies K.T.R., Maruhn-Rezwani V., Feldmeier H., Krieger S. J., Negele J. W. 1977. Time-dependent Hartree-Fock calculations for  $^{16}\text{O} + ^{16}\text{O}$  and  $^{40}\text{Ca} + ^{40}\text{Ca}$  reactions. *Phys Rev C*, 15:1359.
- Krieger S.J., Davies K.T.R. 1978. Time-dependent Hartree-Fock calculations of fusion cross sections for the reactions  $^{16}\text{O} + ^{16}\text{O}$  and  $^{40}\text{Ca} + ^{40}\text{Ca}$ . *Phys Rev C*, 18:2567.
- Lackner, F., Brezinova, I., Sato, T., Ishikawa, K. L., and Burgdorfer, J. 2015. Propagating two-particle reduced density matrices without wave functions. *Phys. Rev. A* 91, 023412.
- Lackner, F., Brezinova, I., Sato, T., Ishikawa, K. L., and Burgdorfer, J. 2017. High-harmonic spectra from time-dependent two-particle reduced-density-matrix theory. *Phys. Rev. A* 95, 033414.
- Lacombe, L., Suraud, E., Reinhard, P.-G., and Dinh, P.M. 2016. Stochastic TDHF in an exactly solvable model. *Annals of Physics*, 373, 216–229.
- Lacombe, L., Reinhard, P.-G., and Dinh, P.M., Suraud, E. 2016b. A collisional extension of time-dependent Hartree-Fock. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 49 245101.

- Lacombe, L., Suraud, E., Reinhard, P.-G., and Dinh, P.M. 2019. An average stochastic approach to two-body dissipation in finite fermion systems. *Annals of Physics* 406, 233–256.
- Lacroix, D., Ayik, S., Chomaz, P. 2004. Nuclear collective vibrations in extended mean-field theory. *Progress in Particle and Nuclear Physics* 52, 497–563.
- Lacroix, D. 2011. Review of Mean-Field, EJC2011 Conference.
- Lacroix, D. and Ayik, S. 2014. Stochastic quantum dynamics beyond mean field, *Eur. Phys. J. A* 50: (94).
- Lacroix, D., Hermanns, S., Hinz, C. M. and Bonitz, M. 2014b. Ultrafast dynamics of finite Hubbard clusters: A stochastic mean-field approach. *Phys. Rev. B* 90, 125112.
- Lacroix, D., Tanimura, Y., Ayik, S., ve Yilmaz, B. 2016. A simplified BBGKY hierarchy for correlated fermions from a stochastic mean-field approach. *Eur. Phys. J. A*, 52: 94.
- Lichtner, P. C., Griffin, J., 1976. Evolution of a Quantum System: Lifetime of a Determinant. *Phys. Rev. Lett.* 37, 1521.
- Lin, H. Q. 1990. Exact diagonalization of quantum-spin models. *Phys. Rev. B* 42, 6561.
- Lin, H. Q. and Gubernatis J. E. 1993. Exact diagonalization methods for quantum systems. *Computers in Physics*, 7, 400.
- Lipkin, H. J., Meshkov, N., and Glick, A. J. 1965. Validity of many-body approximation methods for a solvable model: (I). Exact solutions and perturbation theory. *Nuclear Physics*, vol. 62, no. 2, pp. 188–198.
- Luo, H.-G., Cassing, W., Wang, S.-J. 1999. Damping of collective nuclear motion and thermodynamic properties of nuclei beyond mean field. *Nucl. Phys. A*, 652,164.
- Marques, M. A. L., Maitra, N. T., Nogueira, F. M. S., Gross, E. K. U. and Rubio, A. eds. 2012. Fundamentals of time-dependent density functional theory. No. 837 in *Lecture notes in physics*, Springer, Heidelberg.
- Maruhn, J. A., Reinhard, P.-G., Suraud, E. 2010. *Simple Models of Many-Fermion Systems*, Springer.
- Mazziotti, D. 2000. Complete reconstruction of reduced density matrices. *Chemical Physics Letters* 326 212–218.

- Meshkov, N., Glick, A. J., and Lipkin, H. J. 1965. Validity of many-body approximation methods for a solvable model: (II). Linearization procedures. *Nuclear Physics*, vol. 62, no. 2, pp. 199–210.
- Negele J. W. 1982. The mean-field theory of nuclear structure and dynamics. *Rev. Mod. Phys.*, 54:913.
- Polkovnikov, A. 2003. Quantum corrections to the dynamics of interacting bosons: Beyond the truncated Wigner approximation. *Phys. Rev. A* 68, 053604.
- Reinhard, P.-G., and Suraud, E. 1992. Stochastic TDHF and the Boltzman-Langevin equation. *Annals of Physics (NY)*, 216 98.
- Runge, E. and Gross, E. K. U. 1984. Density-Functional Theory for Time-Dependent Systems. *Physical Review Letters*, vol. 52, pp. 997–1000.
- Schmitt, K.-J., Reinhard, P.-G., and Toepffer, C. 1990. Truncation of time-dependent many-body theories. *Z. Phys. A* 336, 123.
- Sekizawa, K. 2019. TDHF Theory and Its Extensions for the Multinucleon Transfer Reaction: A Mini Review. *Frontiers in Physics*, 7:20.
- Shavitt, I., and Bartlett, R. J., 2009. *Many-Body Methods in Chemistry and Physics*, 548, Cambridge University Press, New York.
- Shun-jin, W., and Cassing, W. 1985. Explicit treatment of N-body correlations within a density matrix formalism. *Ann. Phys.* 159, 328.
- Simenel, C., Avez, B., Lacroix, D. 2009. Microscopic approaches for nuclear Many-Body dynamics: applications to nuclear reactions. <https://arxiv.org/abs/0806.2714>
- Simenel, C., Lacroix, D., Avez, B., 2010. *Quantum Many-body Dynamics: Applications to Nuclear Reactions*.
- Simenel, C. 2012. Nuclear Quantum Many-Body Dynamics. *Eur. Phys J. A.* 48: 152.
- Siro, T. and Harju, A. 2012. Exact diagonalization of the Hubbard model on graphics processing units. *Comp. Phys. Comm.* 183, 1884.
- Slama, N., Reinhard, P.-G., and Suraud, E. 2015. On the inclusion of collisional correlations in quantum dynamics. *Annals of Physics*, 355, 182–203.
- Teukolsky, S.A. 2000. Stability of the iterated Crank-Nicholson method in numerical relativity. *Phys. Rev. D* 61, 087501.



- Thouless, D. J., 1961. Stability Conditions and Nuclea Rotations in the Hartree-Fock Theory. Nucl. Phys. 21, 225
- Tohyama, M, 1988. New truncation scheme for a time-dependent density-matrix approach applied to the ground state of  $^{16}\text{O}$ . Phys. Rev. C 91, 017301.
- Tohyama, M, 1988. Damping of quadrupole motion in time-dependent density-matrix theory. Phys. Rev. C 38, 553.
- Tohyama, M, Umar, A.S., 2001. Dipole resonances in oxygen isotopes in time-dependent density-matrix theory. Phys. Lett. B 516, 415.
- Tohyama, M, Umar, A.S., 2002a. Quadrupole resonances in unstable oxygen isotopes in time-dependent density-matrix formalism. Phys. Lett. B 549, 72.
- Tohyama, M, Umar, A.S., 2002b. Fusion window problem in time-dependent Hartree-Fock theory revisited. Phys. Rev. C 65, 037601.
- Tohyama, M., and Schuck, P. 2010. Density-matrix formalism with three-body ground-state correlations. Eur. Phys. J. A 45, 257.
- Tohyama, M, and Schuck, P. 2014. Truncation scheme of time-dependent density-matrix approach. Eur. Phys. J. A 50: 77.
- Tohyama, M, and Schuck, P. 2017. Truncation scheme of time-dependent density-matrix approach II. Eur. Phys. J. A 53: 186.
- Tohyama, M, and Schuck, P. 2019. Truncation scheme of time-dependent density-matrix approach III. Eur. Phys. J. A 55: 74.
- Ulgen, I., Yilmaz, B., Lacroix, D. 2019a. Impact of the initial fluctuations on the dissipative dynamics of interacting Fermi systems: a model case study. Phys. Rev. C 100, 054603.
- Ulgen, I., Yilmaz, B. 2019b. Dissipative dynamics within stochastic mean-field approach. Bitlis Eren University Journal of Science and Technology 9(2)104–108.
- Umar, A. S. ve Oberacker V. E. 2006. Three-dimensional unrestricted time-dependent Hartree- Fock fusion calculations using the full Skyrme interaction. Phys. Rev. C 73, 054607.
- Umar, A. S., Oberacker, V. E., and Simenel, C. 2016. Fusion and quasifission dynamics in the reactions  $^{48}\text{Ca} + ^{249}\text{Bk}$  and  $^{50}\text{Ti} + ^{249}\text{Bk}$  using a time-dependent Hartree-Fock approach. Phys. Rev. C 94, 024605.

Washiyama, K., Ayik, S., and Lacroix, D. 2009. Mass dispersion in transfer reactions with a stochastic mean-field theory. *Phys. Rev. C* 80, 031602(R).

Yasuda, K, and Nakatsuji, H. 1997. Direct determination of the quantum-mechanical density matrix using the density equation. II. *Phys. Rev. A* 56, 2648.

Yilmaz, B., Ayik, S., Lacroix, D., and Washiyama, K. 2011. Nucleon exchange mechanism in heavy-ion collisions at near-barrier energies. *Phys. Rev. C* 83, 064615.

Yilmaz, B., Ayik, S., Yilmaz O., and Umar, A. S. 2018. Multinucleon transfer in  $^{58}\text{Ni} + ^{60}\text{Ni}$  and  $^{60}\text{Ni} + ^{60}\text{Ni}$  in a stochastic mean-field approach, *Phys. Rev. C* 98, 034604.



## **EKLER**

**EK 1 ZAMANA BAĞLI ORTALAMA-ALAN DENKLEMİNİN TÜRETİLMESİ**

**EK 2 ORTALAMA-ALAN YAKLAŞIMINDA KORELASYON VE DALGALAN-  
MALAR**

**EK 3 TEK-PARÇACIK İŞLEMCİLERİNİN KUANTUM MOMENTLERİ**

**EK 4 mLMG MODELİNİN HAREKET DENKLEMLERİ**



## EK 1 ZAMANA BAĞLI ORTALAMA-ALAN DENKLEMİNİN TÜRETİLMESİ

Hamiltonyeni

$$\hat{H} = \sum_{ij} t_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \tilde{v}_{ijkl} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k \quad (\text{E1.1})$$

ile temsil edilen N-parçacıklı bir sistemin tek-cisim yoğunluk işlemcisinin bileşenlerinin zamanın herhangi bir anındaki değeri :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \rho_{\beta\alpha} &= \langle \mathbb{S} | [\hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta, \hat{H}] | \mathbb{S} \rangle, \\ &= \sum_{ij} t_{ij} \langle \mathbb{S} | [\hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta, \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j] | \mathbb{S} \rangle \\ &\quad + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \tilde{v}_{ijkl} \langle \mathbb{S} | [\hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta, \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k] | \mathbb{S} \rangle, \end{aligned} \quad (\text{E1.2})$$

bağıntısının sağladığı dinamiklerle belirlenir. E1.2 bağıntısındaki matris bileşenlerini sırasıyla şöyledir:

$$\begin{aligned} \langle \mathbb{S} | [\hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta, \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j] | \mathbb{S} \rangle &= \langle \mathbb{S} | (\hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta) | \mathbb{S} \rangle, \\ &= \langle \mathbb{S} | \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j | \mathbb{S} \rangle - \langle \mathbb{S} | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta | \mathbb{S} \rangle, \\ &= \delta_{\beta i} \langle \mathbb{S} | \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_j | \mathbb{S} \rangle + \langle \mathbb{S} | \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_\beta | \mathbb{S} \rangle \\ &\quad - \delta_{j\alpha} \langle \mathbb{S} | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_\beta | \mathbb{S} \rangle - \langle \mathbb{S} | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta \hat{a}_j | \mathbb{S} \rangle \\ &= \delta_{\beta i} \rho_{j\alpha} - \delta_{j\alpha} \rho_{\beta i}. \end{aligned} \quad (\text{E1.3})$$

Burada  $\rho_{ij} \equiv \langle i | \hat{\rho} | j \rangle = \langle \mathbb{S} | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j | \mathbb{S} \rangle$  tanımı ve Wick teoremi kullanılmıştır.

$$\begin{aligned} \langle \mathbb{S} | \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta, \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k | \mathbb{S} \rangle &= \langle \mathbb{S} | \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k | \mathbb{S} \rangle - \langle \mathbb{S} | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta | \mathbb{S} \rangle, \\ &= \delta_{\beta i} \langle \mathbb{S} | \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k | \mathbb{S} \rangle - \delta_{\beta j} \langle \mathbb{S} | \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k | \mathbb{S} \rangle + \langle \mathbb{S} | \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_\beta \hat{a}_l \hat{a}_k | \mathbb{S} \rangle \\ &\quad - \delta_{k\alpha} \langle \mathbb{S} | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_\beta | \mathbb{S} \rangle + \delta_{l\alpha} \langle \mathbb{S} | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_\beta | \mathbb{S} \rangle - \langle \mathbb{S} | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k \hat{a}_\beta | \mathbb{S} \rangle, \\ &= \delta_{\beta i} (\rho_{k\alpha} \rho_{lj} - \rho_{kj} \rho_{l\alpha}) + \delta_{\beta j} (\rho_{ki} \rho_{l\alpha} - \rho_{k\alpha} \rho_{li}) \\ &\quad + \delta_{k\alpha} (\rho_{\beta j} \rho_{li} - \rho_{\beta i} \rho_{lj}) + \delta_{l\alpha} (\rho_{\beta i} \rho_{kj} - \rho_{\beta j} \rho_{ki}). \end{aligned} \quad (\text{E1.4})$$

Hesaplanan matris elemanlarını E1.2 denkleminde kullanılarak zamana bağlı ortalama-alan denklemleri türetilir:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d}{dt} \rho_{\beta\alpha} &= \sum_{ij} t_{ij} (\delta_{\beta i} \rho_{j\alpha} - \delta_{j\alpha} \rho_{\beta i}) \\
&+ \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \tilde{v}_{ijkl} \left( \delta_{\beta i} (\rho_{k\alpha} \rho_{lj} - \rho_{kj} \rho_{l\alpha}) + \delta_{\beta j} (\rho_{ki} \rho_{l\alpha} - \rho_{k\alpha} \rho_{li}) \right. \\
&+ \left. \delta_{k\alpha} (\rho_{\beta j} \rho_{li} - \rho_{\beta i} \rho_{lj}) + \delta_{l\alpha} (\rho_{\beta i} \rho_{kj} - \rho_{\beta j} \rho_{ki}) \right), \\
&= \sum_i t_{\beta i} \rho_{i\alpha} - \sum_i \rho_{\beta i} t_{i\alpha} \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{jkl} \tilde{v}_{\beta jkl} \rho_{lj} \rho_{k\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{jkl} \tilde{v}_{\beta jlk} \rho_{kj} \rho_{l\alpha} \\
&- \frac{1}{2} \sum_{ijk} \rho_{\beta j} \tilde{v}_{j\alpha k} \rho_{ki} - \frac{1}{2} \sum_{ijk} \rho_{\beta i} \tilde{v}_{i\alpha k} \rho_{kj}, \\
&= (\hat{t}\hat{\rho} - \hat{\rho}\hat{t})_{\beta\alpha} \\
&+ \frac{1}{2} \sum_k \left( \text{Tr}_2(\tilde{v}_{12}\hat{\rho}_2) \right)_{\beta k} \rho_{k\alpha} + \frac{1}{2} \sum_l \left( \text{Tr}_2(\tilde{v}_{12}\hat{\rho}_2) \right)_{\beta l} \rho_{l\alpha} \\
&- \frac{1}{2} \sum_j \rho_{\beta j} \left( \text{Tr}_2(\tilde{v}_{12}\hat{\rho}_2) \right)_{j\alpha} - \frac{1}{2} \sum_i \rho_{\beta i} \left( \text{Tr}_2(\tilde{v}_{12}\hat{\rho}_2) \right)_{i\alpha}, \\
&= [\hat{t}, \hat{\rho}]_{\beta\alpha} + [\text{Tr}_2(\tilde{v}_{12}\hat{\rho}_2), \hat{\rho}]_{\beta\alpha}, \\
&= [\hat{t} + \text{Tr}_2(\tilde{v}_{12}\hat{\rho}_2), \hat{\rho}]_{\beta\alpha} = [\hat{t} + U_{MF}[\rho], \hat{\rho}]_{\beta\alpha}, \\
&= [\hat{h}[\rho], \hat{\rho}]_{\beta\alpha}. \tag{E1.5}
\end{aligned}$$

Burada  $\tilde{v}_{ijkl} = -\tilde{v}_{ijlk} = -\tilde{v}_{jikl}$  bağıntılarından yararlanılmıştır.

## EK 2 ORTALAMA-ALAN YAKLAŞIMINDA KORELASYON VE DALGALANMALAR

$\hat{\mathcal{O}}_1$  ve  $\hat{\mathcal{O}}_2$  herhangi iki gözlenebilir olmak üzere; bir  $|\Psi\rangle$  durumunda bu gözlenebilirler arasındaki korelasyon (correlation),

$$\sigma_{\hat{\mathcal{O}}_1 \hat{\mathcal{O}}_2} = \sqrt{\frac{1}{2} \left( \langle \hat{\mathcal{O}}_1 \hat{\mathcal{O}}_2 \rangle_{\Psi} + \langle \hat{\mathcal{O}}_2 \hat{\mathcal{O}}_1 \rangle_{\Psi} \right) - \langle \hat{\mathcal{O}}_1 \rangle_{\Psi} \langle \hat{\mathcal{O}}_2 \rangle_{\Psi}}, \quad (\text{E2.6})$$

şeklinde tanımlanır. Ayrıca bir  $\hat{\mathcal{O}}$  gözlenebilirinin ortalama değerinin bir  $|\Psi\rangle$  durumunda dalgalanması (fluctuation),

$$\sigma_{\hat{\mathcal{O}}} = \sqrt{\langle \hat{\mathcal{O}}^2 \rangle_{\Psi} - \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{\Psi}^2}, \quad (\text{E2.7})$$

biçiminde yazılır. Özel olarak  $\hat{\mathcal{O}}$  işlemcisini tek-cisim işlemcisi seçelim. Bu durumda iki gözlenebilirin çarpımı,

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{O}}_1 \hat{\mathcal{O}}_2 &= \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | \hat{\mathcal{O}}_1 | \beta \rangle \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{\beta} \sum_{\mu\nu} \langle \mu | \hat{\mathcal{O}}_2 | \nu \rangle \hat{a}_{\mu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu}, \\ &= \sum_{\alpha\beta\mu\nu} \langle \alpha | \hat{\mathcal{O}}_1 | \beta \rangle \langle \mu | \hat{\mathcal{O}}_2 | \nu \rangle \left( \delta_{\beta\mu} \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{\nu} - \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{\mu}^{\dagger} \hat{a}_{\beta} \hat{a}_{\nu} \right), \end{aligned} \quad (\text{E2.8})$$

sonucunu verir. Burada son terim iki-parçacık özelliğine sahip bir işlemciye aittir ve ortalama-alan teorisinde iki-parçacık işlemcileri bir tanımlama yoktur. Bu nedenle tek-parçacık gözlenebilirlerinin korelasyon ve dalgalanmalarını ortalama-alan teorisi içermez.

### EK 3 TEK-PARÇACIK İŞLEMCİLERİNİN KUANTUM MOMENTLERİ

Çok-parçacıklı bir sistemin başlangıç durumunun bir Slater determinantı ile temsil edildiğini varsayalım. Bu durumda sisteme ait tek-parçacık özelliklerine ait tüm bilgi tek-parçacık yoğunluk matrisinde,  $\hat{\rho}$ , kaydedilir. Yoğunluk işlemcisinin köşegen olduğu,  $\langle i|\rho|j\rangle = n_i\delta_{ij}$ , baz vektörleri (doğal bazlar) kullanılarak bir tek-parçacık işlemcisi olan  $\hat{A}$ ,  $\hat{A} = \sum_{ij} A_{ij}\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_j$  biçiminde yazılabilir. Burada  $n_i$ ,  $i$  durumuna ait nüfuslanma sayısını temsil etmektedir ve fermiyonlar için yalnızca 0 ya da 1 değerlerini alabilmektedir.  $\hat{A}$  gözlenebilirinin ortalama değeri şöyledir:

$$\begin{aligned}\langle \hat{A} \rangle &= \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{A}) \\ &= \sum_i n_i A_{ii}.\end{aligned}\quad (\text{E3.9})$$

İkinci moment ise

$$\begin{aligned}\langle \hat{A}^2 \rangle &= \text{Tr}_1(\hat{\rho}_1\hat{A}_1^2) + \text{Tr}_{12}(\hat{R}_{12}\hat{A}_1\hat{A}_2) \\ &= \sum_{ij} n_i(1-n_j)A_{ij}A_{ji} + \sum_{ij} n_i n_j A_{ii}A_{jj}\end{aligned}\quad (\text{E3.10})$$

şeklinde hesaplanır. Burada  $\hat{R}_{12} = \hat{\rho}_1\hat{\rho}_2(1 - \hat{P}_{12})$  biçiminde çarpım durumunda yazılmıştır. Böylece ikinci merkezi moment aşağıdaki gibi ifade edilir:

$$\begin{aligned}\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle &= \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 \\ &= \sum_{ij} n_i(1-n_j)A_{ji}A_{ij} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ij} [n_i(1-n_j) + n_j(1-n_i)] A_{ji}A_{ij}.\end{aligned}\quad (\text{E3.11})$$

$\hat{A}$  kolektif tek-parçacık gözlenebilirinin üçüncü momenti şöyledir:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{A}^3 \rangle &= \text{Tr}_1(\hat{\rho}_1 \hat{A}_1^3) + 2\text{Tr}_{12}(\hat{R}_{12} \hat{A}_1^2 \hat{A}_2) + \text{Tr}_{12}(\hat{R}_{12} \hat{A}_1 \hat{A}_2^2) \\
&\quad + \text{Tr}_{123}(\hat{R}_{123} \hat{A}_1 \hat{A}_2 \hat{A}_3) \\
&= \sum_{ijk} n_i A_{ij} A_{jk} A_{ki} \\
&\quad + 2 \sum_{ijk} n_i n_j (A_{ik} A_{ki} A_{jj} - A_{jk} A_{ki} A_{ij}) \\
&\quad + \sum_{ijk} n_i n_j (A_{ii} A_{jk} A_{kj} - A_{ji} A_{ik} A_{kj}) \\
&\quad + \sum_{ijk} n_i n_j n_k (A_{ii} A_{jj} A_{kk} - A_{ii} A_{jk} A_{kj} \\
&\quad\quad - A_{ij} A_{ji} A_{kk} - A_{ik} A_{jj} A_{ki} \\
&\quad\quad + A_{ij} A_{jk} A_{ki} + A_{ji} A_{kj} A_{ik}) \\
&= \sum_{ijk} n_i A_{ij} A_{jk} A_{ki} \\
&\quad + 3 \sum_{ijk} n_i n_j (A_{ik} A_{ki} A_{jj} - A_{jk} A_{ki} A_{ij}) \\
&\quad + \sum_{ijk} n_i n_j n_k (A_{ii} A_{jj} A_{kk} - 3A_{ii} A_{jk} A_{kj} \\
&\quad\quad + 2A_{ij} A_{jk} A_{ki}), \tag{E3.12}
\end{aligned}$$

Burada  $\hat{R}_{123} = \hat{\rho}_1 \hat{\rho}_2 \hat{\rho}_3 (1 - \hat{P}_{12})(1 - \hat{P}_{13} - \hat{P}_{23})$  biçimde ayrıştırılmıştır. Böylece üçüncü merkezi moment aşağıdaki gibi ifade edilir:

$$\begin{aligned}
\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^3 \rangle &= \langle \hat{A}^3 \rangle - 3\langle \hat{A}^2 \rangle \langle \hat{A} \rangle + 2\langle \hat{A} \rangle^3 \\
&= \sum_{ijk} n_i (1 - 3n_j + 2n_j n_k) A_{ij} A_{jk} A_{ki} \\
&= \sum_{ijk} n_i (1 - 3n_j) (1 - n_j n_k) A_{ij} A_{jk} A_{ki} \\
&= \sum_{ijk} \Lambda_{ijk} A_{ij} A_{jk} A_{ki}. \tag{E3.13}
\end{aligned}$$



Burada Slater durumu için geçerli olan  $n_i^2 = n_i$  bağıntısı kullanılmıştır.  $\Lambda_{ijk}$ ,  $n_i(1 - 3n_j)(1 - n_jn_k)$  teriminin simetrikleştirilmiş halidir:

$$\Lambda_{ijk}^{(3)} = \frac{1}{3} [n_i(1 - 3n_j)(1 - n_jn_k) + n_k(1 - 3n_i)(1 - n_in_j) + n_j(1 - 3n_k)(1 - n_kn_i)]. \quad (\text{E3.14})$$

$\hat{A}$  gözlenebilirinin dördüncü momenti şöyledir:

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}^4 \rangle &= \text{Tr}_1(\hat{\rho}_1 \hat{A}_1^4) + \text{Tr}_{12} \left[ \hat{R}_{12} \left( 4\hat{A}_1^3 \hat{A}_2 + 3\hat{A}_1^2 \hat{A}_2^2 \right) \right] \\ &+ 6\text{Tr}_{123}(\hat{R}_{123} \hat{A}_1^2 \hat{A}_2 \hat{A}_3) \\ &+ \text{Tr}_{1234}(\hat{R}_{1234} \hat{A}_1 \hat{A}_2 \hat{A}_3 \hat{A}_4) \\ &= \sum_{ijkl} n_i A_{ij} A_{jk} A_{kl} A_{li} \\ &+ 4 \sum_{ijkl} n_i n_j (A_{ik} A_{kl} A_{li} A_{jj} - A_{jk} A_{kl} A_{li} A_{ij}) \\ &+ 3 \sum_{ijkl} n_i n_j (A_{ik} A_{ki} A_{jl} A_{lj} - A_{jk} A_{ki} A_{il} A_{lj}) \\ &+ 6 \sum_{ijkl} n_i n_j n_k (A_{il} A_{li} A_{jj} A_{kk} - A_{il} A_{li} A_{jk} A_{kj} \\ &\quad - A_{kl} A_{li} A_{jj} A_{ik} - A_{jl} A_{li} A_{ij} A_{kk} + 2A_{ij} A_{jk} A_{kl} A_{li}) \\ &+ \sum_{ijkl} n_i n_j n_k n_l (A_{ii} A_{jj} A_{kk} A_{ll} - 6A_{ij} A_{ji} A_{kk} A_{ll} \\ &\quad + 8A_{ij} A_{jk} A_{ki} A_{ll} + 3A_{ij} A_{ji} A_{kl} A_{lk} - 6A_{ij} A_{jk} A_{kl} A_{li}), \end{aligned} \quad (\text{E3.15})$$

Burada  $\hat{R}_{1234} = \hat{\rho}_1 \hat{\rho}_2 \hat{\rho}_3 \hat{\rho}_4 (1 - \hat{P}_{12})(1 - \hat{P}_{13} - \hat{P}_{23})(1 - \hat{P}_{14} - \hat{P}_{24} - \hat{P}_{34})$ 'dır.  $\hat{A}$  işlemcisinin dördüncü merkezi momenti şöyle ifade edilir:

$$\begin{aligned}
\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^4 \rangle &= \langle \hat{A}^4 \rangle - 4 \langle \hat{A}^3 \rangle \langle \hat{A} \rangle + 6 \langle \hat{A}^2 \rangle \langle \hat{A} \rangle^2 - 3 \langle \hat{A} \rangle^4 \\
&= \sum_{ijkl} n_i (1 - 4n_j - 3n_k + 12n_j n_k - 6n_j n_k n_l) \times A_{ij} A_{jk} A_{kl} A_{li} \\
&\quad + 3 \sum_{ijkl} n_i n_k (1 - 2n_l + n_l n_j) \times A_{ij} A_{ji} A_{kl} A_{lk} \\
&= \sum_{ijkl} n_i (1 - 4n_j) (1 - 3n_k) (1 - n_j n_k n_l) \times A_{ij} A_{jk} A_{kl} A_{li} \\
&\quad + 3 \sum_{ijkl} n_i n_k (1 - 2n_l) (1 - n_l n_j) \times A_{ij} A_{ji} A_{kl} A_{lk} \tag{E3.16}
\end{aligned}$$

$$= \sum_{ijkl} \Lambda_{ijkl}^{(4a)} A_{ij} A_{jk} A_{kl} A_{li} + 3 \sum_{ijkl} \Lambda_{ijkl}^{(4b)} A_{ij} A_{ji} A_{kl} A_{lk}, \tag{E3.17}$$

İfadede yer alan simetrikleştirilmiş terimler şöyle yazılır:

$$\begin{aligned}
\Lambda_{ijkl}^{(4a)} &= \frac{1}{4} [n_i (1 - 4n_j) (1 - 3n_k) (1 - n_j n_k n_l) \\
&\quad + n_l (1 - 4n_i) (1 - 3n_j) (1 - n_i n_j n_k) \\
&\quad + n_k (1 - 4n_l) (1 - 3n_i) (1 - n_l n_i n_j) \\
&\quad + n_j (1 - 4n_k) (1 - 3n_l) (1 - n_k n_l n_i)], \tag{E3.18}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Lambda_{ijkl}^{(4b)} &= \frac{1}{8} \{ n_i n_k [(1 - 2n_l) (1 - n_l n_j) + (1 - 2n_j) (1 - n_j n_l)] \\
&\quad + n_j n_k [(1 - 2n_l) (1 - n_l n_i) + (1 - 2n_i) (1 - n_i n_l)] \\
&\quad + n_i n_l [(1 - 2n_k) (1 - n_k n_j) + (1 - 2n_j) (1 - n_j n_k)] \\
&\quad + n_j n_l [(1 - 2n_k) (1 - n_k n_i) + (1 - 2n_i) (1 - n_i n_k)] \}. \tag{E3.19}
\end{aligned}$$

Simetrikleştirilmiş  $\Lambda_{ijkl}^{(4a)}$  ve  $\Lambda_{ijkl}^{(4b)}$  terimleri (E3.16) denklemi dikkate alınarak aşağıdaki şekillerde ifade edilebilir:

$$\begin{aligned}
A_{ij} A_{jk} A_{kl} A_{li} &= A_{li} A_{ij} A_{jk} A_{kl} \\
&= A_{kl} A_{li} A_{ij} A_{jk} \\
&= A_{jk} A_{kl} A_{li} A_{ij}, \tag{E3.20}
\end{aligned}$$

ve

$$\begin{aligned}A_{ij}A_{ji}A_{kl}A_{lk} &= A_{kl}A_{lk}A_{ij}A_{ji} \\ &= A_{ji}A_{ij}A_{kl}A_{lk} \\ &= A_{kl}A_{lk}A_{ji}A_{ij} \\ &= A_{ij}A_{ji}A_{lk}A_{kl} \\ &= A_{lk}A_{kl}A_{ij}A_{ji} \\ &= A_{ji}A_{ij}A_{lk}A_{kl} \\ &= A_{lk}A_{kl}A_{ji}A_{ij}.\end{aligned}\tag{E3.21}$$



## EK 4 mLMG MODELİNİN HAREKET DENKLEMLERİ

Beşinci bölümde tanıtılan Değişkin Lipkin-Meshkov-Glick Modeli'nin (mLMG) Hamiltonyeni şöyledir:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}, \quad (\text{E4.22})$$

$$\hat{T} = \sum_{\alpha} \frac{s_{\alpha} \varepsilon_{\alpha}}{2} \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{\alpha}, \quad (\text{E4.23})$$

$$\hat{V} = v_0 \hat{S}_+ \hat{S}_-. \quad (\text{E4.24})$$

Burada  $\alpha = (s_{\alpha}, m_{\alpha})$ ,  $s_{\alpha} \in \{-1, +1\}$ ,  $m_{\alpha} \in \{-j, -j+1, \dots, j-1, j\}$  tek-parçacık enerji durumlarını etiketlemektedir.  $\hat{S}_+ = \sum_{\alpha > 0} \hat{a}_{\alpha}^{\dagger} \hat{a}_{\alpha}^{\dagger}$  ve  $\hat{S}_- = \hat{S}_+^{\dagger}$ .  $\bar{\alpha} = (s_{\alpha}, -m_{\alpha})$  olup  $\alpha > 0$ ,  $m_{\alpha} > 0$  anlamına gelmektedir. Modelde tanımlanmış çok-parçacıklı sistemin hareket denklemleri, sistemin Hamiltonyenine eşdeğer ve daha genel bir gösterim kullanılarak türetilecektir <sup>1</sup>.

- Eşdeğer genel Hamiltonyene geçiş

Ortalama-Alan denklemlerinin yanı sıra öte yaklaşımların da hareket denklemleri türetileceği için iki-parçacık etkileşim terimi daha genel bir gösterimde yazmak yararlı olacaktır. İkinci kuantumlama gösteriminde genel bir Hamiltonyen aşağıdaki iki eşdeğer yapıda ifade edilebilir:

$$H = \sum_{ij} T_{ij} a_i^{\dagger} a_j + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} V_{ijkl} a_i^{\dagger} a_j^{\dagger} a_l a_k \quad (\text{E4.25})$$

$$H = \sum_{ij} T_{ij} a_i^{\dagger} a_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \tilde{V}_{ijkl} a_i^{\dagger} a_j^{\dagger} a_l a_k \quad (\text{E4.26})$$

Toplanan nicelikler için herhangi bir kısıtlamanın olmadığına dikkat edilmelidir. Burada  $T_{ij} = \delta_{ij} s_i \varepsilon_i / 2$  biçiminde tanımlıdır.

Fermiyonik sistemlerde yaratma ve yoketme işlemcileri sıra bağımlıdır ve herhangi iki yaratma/yoketme işlemcisi anti-sıradеğiştirme bağıntısının belirlediği kurallara uyarlar.

<sup>1</sup>Denklemlerde daha yalın bir gösterim kullanmak yararlı olacaktır. Bu sebeple işlemcileri belirtmek için kullanılan " $\wedge$ " (şapka) sembolü denklemler türetilirken kullanılmayacaktır.

Bu kurallar dahilinde

$$\begin{aligned}\sum_{\alpha>0,\beta>0} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}^{\dagger} a_{\beta} &= - \sum_{\alpha>0,\beta>0} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}^{\dagger} a_{\beta} \\ &= - \sum_{\alpha<0,\beta>0} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}^{\dagger} a_{\beta}\end{aligned}\quad (E4.27)$$

yazabilmek olağandır. Benzer işler diğer indisler üzerinde de denenebilir. Bu durumda

$$\begin{aligned}\sum_{\alpha>0,\beta>0} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}^{\dagger} a_{\beta} &= - \sum_{\alpha<0,\beta>0} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}^{\dagger} a_{\beta} \\ &= - \sum_{\alpha>0,\beta<0} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}^{\dagger} a_{\beta} \\ &= + \sum_{\alpha<0,\beta<0} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}^{\dagger} a_{\beta}\end{aligned}$$

şeklinde farklı yazımlar elde edilebilir. Yukarıdaki toplam dört farklı eşdeğer terim bir arada yazılarak orijinal etkileşme potansiyeli teriminde yer alan kısıtlama kaldırılabilir. Böylece yeni hali genel formda tanımlanmış haliyle eşleştirilebilir:

$$V = \sum_{\alpha\beta} \frac{d_{\alpha\beta} v_0}{4} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta}^{\dagger} a_{\beta}, \quad (E4.28)$$

$$= \sum_{ijkl} \frac{1}{2} V_{ijkl} a_i^{\dagger} a_j^{\dagger} a_l a_k. \quad (E4.29)$$

Bu gösterimde toplamlarda bir kısıtlama yoktur. Burada

$$d_{\alpha\beta} = \begin{cases} +1 & , \text{ eğer } \alpha\beta > 0 \\ -1 & , \text{ eğer } \alpha\beta < 0 \end{cases}. \quad (E4.30)$$

özelliğine sahip bir matristir. (E4.28) ve (E4.29) denklemlerinin eşdeğerliğinden

$$V_{ijkl} = \delta_{ji} \delta_{lk} \frac{v_0}{2} d_{ik}. \quad (E4.31)$$

sonucuna varılır. Bu anlaşmaya sadık kalarak hareket denklemleri türetilecektir.

- Ortalama-Alan (MF ya da TDHF) denklemi

Ehrenfest Teoremi kullanılarak Ortalama-Alan denklemi türetilebilir:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\rho_{ij}}{dt} &= i\hbar \frac{d\langle a_j^\dagger a_i \rangle}{dt} = \langle [a_j^\dagger a_i, H] \rangle \\ &= [h, \rho]_{ij}. \end{aligned} \quad (\text{E4.32})$$

Burada  $h[\rho] = T + \text{Tr}_2(\tilde{V}_{12}\rho_2)$ , bileşenleri

$$h_{ij} = T_{ij} + \sum_{km} \langle ik|V(|jm\rangle - |mj\rangle) \rho_{mk}$$

olan Ortalama-Alan Hamiltonyenidir. İlk terim kinetik enerjiiyi,

$$T_{ij} = \delta_{ij} \frac{s_i \epsilon_i}{2}, \quad (\text{E4.33})$$

ikinci terim ise ortalama-alan potansiyel enerjisini temsil etmektedir.  $i > 0, j > 0$  özel durumunu potansiyel terimi üzerinden inceleyelim <sup>1</sup>

$$\begin{aligned} \sum_{km} \langle ik|V(|jm\rangle - |mj\rangle) \rho_{mk} &= \langle \bar{i}\bar{i}|V|\bar{j}\bar{j}\rangle \rho_{\bar{j}\bar{i}} - \langle \bar{i}\bar{i}|V|\bar{j}\bar{j}\rangle \rho_{\bar{j}\bar{i}} \\ &= v_0 \rho_{\bar{j}\bar{i}}. \end{aligned}$$

Bir başka örnek  $i > 0, j < 0$  durumudur: <sup>2</sup>

$$\begin{aligned} \sum_{km} \langle ik|V(|jm\rangle - |mj\rangle) \rho_{mk} &= \langle \bar{i}\bar{i}|V|\bar{j}\bar{j}\rangle \rho_{\bar{j}\bar{i}} - \langle \bar{i}\bar{i}|V|\bar{j}\bar{j}\rangle \rho_{\bar{j}\bar{i}} \\ &= -v_0 \rho_{\bar{j}\bar{i}}. \end{aligned}$$

Böylece bileşenleri

$$h_{ij} = \delta_{ij} \frac{s_i \epsilon_i}{2} + v_0 \rho_{\bar{j}\bar{i}} d_{ij}, \quad (\text{E4.34})$$

<sup>1</sup>Aynı bağıntı  $i < 0, j < 0$  durumu için geçerlidir.

<sup>2</sup>Aynı bağıntı  $i < 0, j > 0$  durumu için geçerlidir.

bağıntısını sağşayan Ortalama-Alan Hamiltonyeni'nin ürettiği gelişim

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d\rho_{ij}}{dt} &= \sum_k (h_{ik}\rho_{kj} - \rho_{ik}h_{kj}) \\
&= \frac{1}{2} (s_i \epsilon_i - s_j \epsilon_j) \rho_{ij} \\
&\quad + v_0 \sum_k \left( \rho_{\bar{k}i} \rho_{kj} d_{ik} - \rho_{ik} \rho_{\bar{j}k} d_{kj} \right) \\
&= \frac{1}{2} (s_i \epsilon_i - s_j \epsilon_j) \rho_{ij} \\
&\quad + v_0 \sum_{k>0} \left( \rho_{\bar{k}i} \rho_{kj} d_{ik} - \rho_{ik} \rho_{\bar{j}k} d_{kj} \right) \\
&\quad + v_0 \sum_{k>0} \left( \rho_{ki} \rho_{\bar{k}j} d_{\bar{i}k} - \rho_{i\bar{k}} \rho_{\bar{j}k} d_{\bar{k}j} \right)
\end{aligned} \tag{E4.35}$$

şeklinde ifade edilir. Bu ifade  $i > 0$  ve  $j > 0$  seçilerek kullanılarak mümkün tüm durumlar irdelenebilir:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d\rho_{ij}}{dt} &= \frac{1}{2} (s_i \epsilon_i - s_j \epsilon_j) \rho_{ij} \\
&\quad + v_0 \sum_{k>0} \left( \rho_{\bar{k}i} \rho_{kj} - \rho_{ik} \rho_{\bar{j}k} \right) \\
&\quad - v_0 \sum_{k>0} \left( \rho_{ki} \rho_{\bar{k}j} - \rho_{i\bar{k}} \rho_{\bar{j}k} \right),
\end{aligned} \tag{E4.36}$$

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d\rho_{\bar{i}\bar{j}}}{dt} &= \frac{1}{2} (s_i \epsilon_i - s_j \epsilon_j) \rho_{\bar{i}\bar{j}} \\
&\quad - v_0 \sum_{k>0} \left( \rho_{\bar{k}i} \rho_{k\bar{j}} - \rho_{\bar{i}k} \rho_{\bar{j}k} \right) \\
&\quad + v_0 \sum_{k>0} \left( \rho_{ki} \rho_{\bar{k}\bar{j}} - \rho_{\bar{i}k} \rho_{jk} \right),
\end{aligned} \tag{E4.37}$$

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d\rho_{i\bar{j}}}{dt} &= \frac{1}{2} (s_i \epsilon_i - s_j \epsilon_j) \rho_{i\bar{j}} \\
&\quad + v_0 \sum_{k>0} \left( \rho_{\bar{k}i} \rho_{k\bar{j}} + \rho_{ik} \rho_{\bar{j}k} \right) \\
&\quad - v_0 \sum_{k>0} \left( \rho_{ki} \rho_{\bar{k}\bar{j}} + \rho_{\bar{i}k} \rho_{jk} \right),
\end{aligned} \tag{E4.38}$$

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d\rho_{\bar{i}j}}{dt} &= \frac{1}{2} (s_i \epsilon_i - s_j \epsilon_j) \rho_{\bar{i}j} \\
&\quad - v_0 \sum_{k>0} \left( \rho_{\bar{k}i} \rho_{kj} + \rho_{\bar{i}k} \rho_{\bar{j}k} \right) \\
&\quad + v_0 \sum_{k>0} \left( \rho_{ki} \rho_{\bar{k}j} + \rho_{\bar{i}k} \rho_{\bar{j}k} \right).
\end{aligned} \tag{E4.39}$$

• TDDM denklemleri

TDDM denklemleri şöyledir:

$$i\hbar \frac{d\rho}{dt} = [h[\rho], \rho] + \frac{1}{2} \text{Tr}_2 [\tilde{V}_{12}, C_{12}] \tag{E4.40}$$

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{dC_{12}}{dt} &= [h[\rho]_1 + h[\rho]_2, C_{12}] \\
&\quad + \mathcal{B}_{12} + \mathcal{P}_{12} + \mathcal{H}_{12}.
\end{aligned} \tag{E4.41}$$

Burada  $\mathcal{B}_{12}$ ,  $\mathcal{P}_{12}$  ve  $\mathcal{H}_{12}$  terimlerinin açık ifadeleri aşağıdaki gibidir:

$$\begin{aligned}
\mathcal{B}_{12} &= (1 - \rho_1)(1 - \rho_2) \tilde{V}_{12} \rho_1 \rho_2 \\
&\quad - \rho_1 \rho_2 \tilde{V}_{12} (1 - \rho_1)(1 - \rho_2) \\
&= (1 - \rho_1 - \rho_2) \tilde{V}_{12} \rho_1 \rho_2 \\
&\quad - \rho_1 \rho_2 \tilde{V}_{12} (1 - \rho_1 - \rho_2),
\end{aligned} \tag{E4.42}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_{12} &= \frac{1}{2} (1 - \rho_1 - \rho_2) \tilde{V}_{12} C_{12} \\
&\quad - \frac{1}{2} C_{12} \tilde{V}_{12} (1 - \rho_1 - \rho_2),
\end{aligned} \tag{E4.43}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{12} &= \text{Tr}_3 \left[ C_{32} \tilde{V}_{13}, \rho_1 (1 - P_{12}) \right] \\
&\quad + \text{Tr}_3 \left[ C_{31} \tilde{V}_{32}, \rho_2 (1 - P_{12}) \right].
\end{aligned} \tag{E4.44}$$



(E4.40) denkleminin birinci terimi Ortalama-Alan denklemidir; ikinci teriminin matris elemanları şöyledir:

$$\begin{aligned}
\langle i | \frac{1}{2} \text{Tr}_2 [\tilde{V}_{12}, C_{12}] | j \rangle &= \frac{1}{2} \sum_{kmn} \langle ik | \tilde{V}_{12} | mn \rangle \langle mn | C_{12} | jk \rangle \\
&\quad - \frac{1}{2} \sum_{kmn} \langle ik | C_{12} | mn \rangle \langle mn | \tilde{V}_{12} | jk \rangle \\
&= \frac{v_0}{2} \sum_m (C_{m\bar{m}j\bar{i}} d_{im} - C_{i\bar{j}m\bar{m}} d_{jm}).
\end{aligned}$$

$i > 0$  ve  $j > 0$  seçerek mümkün tüm durumları değerlendirebiliriz:

$$\langle i | \frac{1}{2} \text{Tr}_2 [\tilde{V}_{12}, C_{12}] | j \rangle = v_0 \sum_{m>0} (C_{m\bar{m}j\bar{i}} - C_{i\bar{j}m\bar{m}}),$$

$$\langle \bar{i} | \frac{1}{2} \text{Tr}_2 [\tilde{V}_{12}, C_{12}] | \bar{j} \rangle = v_0 \sum_{m>0} (C_{m\bar{m}i\bar{j}} - C_{j\bar{i}m\bar{m}}),$$

$$\langle i | \frac{1}{2} \text{Tr}_2 [\tilde{V}_{12}, C_{12}] | \bar{j} \rangle = -v_0 \sum_{m>0} (C_{m\bar{m}i\bar{j}} - C_{i\bar{j}m\bar{m}}),$$

$$\langle \bar{i} | \frac{1}{2} \text{Tr}_2 [\tilde{V}_{12}, C_{12}] | j \rangle = v_0 \sum_{m>0} (C_{m\bar{m}i\bar{j}} - C_{i\bar{j}m\bar{m}}).$$

Böylece iki-parçacık korelasyonların tek-cisim yoğunluk işlemcisinin zamanla gelişimine nasıl katkı sağladığı anlaşılabilir.

Benzer işlemler korelasyon işlemcisinin zamanla gelişim denkleminde (E4.41) uygulanırsa denklemdaki her terimin matris elemanları aşağıdaki gibi elde edilir:

$$\begin{aligned}
\langle ij|[h_1+h_2, C_{12}]|kl\rangle &= \sum_m (h_{im}C_{mjkl} + h_{jm}C_{imkl} - C_{ijml}h_{mk} - C_{ijkm}h_{ml}) \\
&= \frac{1}{2} (s_i \epsilon_i + s_j \epsilon_j - s_k \epsilon_k - s_l \epsilon_l) C_{ijkl} \\
&\quad + v_0 \sum_m \left( d_{im} \rho_{\bar{m}i} C_{mjkl} + d_{jm} \rho_{\bar{m}j} C_{imkl} \right. \\
&\quad \left. - C_{ijml} d_{mk} \rho_{\bar{k}\bar{m}} - C_{ijkm} d_{ml} \rho_{\bar{l}\bar{m}} \right) \\
&= \frac{1}{2} (s_i \epsilon_i + s_j \epsilon_j - s_k \epsilon_k - s_l \epsilon_l) C_{ijkl} \\
&\quad + v_0 \sum_{m>0} \left( d_{im} \rho_{\bar{m}i} C_{mjkl} + d_{jm} \rho_{\bar{m}j} C_{imkl} \right. \\
&\quad \left. - C_{ijml} d_{mk} \rho_{\bar{k}\bar{m}} - C_{ijkm} d_{ml} \rho_{\bar{l}\bar{m}} \right) \\
&\quad + v_0 \sum_{m>0} \left( d_{i\bar{m}} \rho_{m\bar{i}} C_{\bar{m}jkl} + d_{j\bar{m}} \rho_{m\bar{j}} C_{i\bar{m}kl} \right. \\
&\quad \left. - C_{i\bar{j}m\bar{l}} d_{\bar{m}k} \rho_{\bar{k}\bar{m}} - C_{i\bar{j}k\bar{m}} d_{\bar{m}l} \rho_{\bar{l}\bar{m}} \right). \tag{E4.45}
\end{aligned}$$

$i > 0, j > 0, k > 0, l > 0$  kabul edilerek bu denklem tüm durumlar için incelenmelidir. Modelin simulasyonunun gerçekleştirilmesi için gereken bilgisayar kodunun eksiksiz düzenlenmesi gerekmektedir. Bu nedenle bu incelemeler önemlidir. İki farklı örnek şöyledir:

$$\begin{aligned}
\langle ij|[h_1+h_2, C_{12}]|kl\rangle &= \frac{1}{2} (s_i \epsilon_i + s_j \epsilon_j - s_k \epsilon_k - s_l \epsilon_l) C_{ijkl} \\
&\quad + v_0 \sum_{m>0} \left( \rho_{\bar{m}i} C_{mjkl} + \rho_{\bar{m}j} C_{imkl} \right. \\
&\quad \left. - C_{ijml} \rho_{\bar{k}\bar{m}} - C_{ijkm} \rho_{\bar{l}\bar{m}} \right) \\
&\quad - v_0 \sum_{m>0} \left( \rho_{m\bar{i}} C_{\bar{m}jkl} + \rho_{m\bar{j}} C_{i\bar{m}kl} \right. \\
&\quad \left. - C_{i\bar{j}m\bar{l}} \rho_{\bar{k}\bar{m}} - C_{i\bar{j}k\bar{m}} \rho_{\bar{l}\bar{m}} \right). \tag{E4.46}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle i\bar{j} | [h_1 + h_2, C_{12}] | k\bar{l} \rangle &= \frac{1}{2} (s_i \varepsilon_i + s_j \varepsilon_j - s_k \varepsilon_k - s_l \varepsilon_l) C_{i\bar{j}k\bar{l}} \\
&+ v_0 \sum_{m>0} \left( \rho_{m\bar{i}} C_{m\bar{j}k\bar{l}} - \rho_{m\bar{j}} C_{imk\bar{l}} \right. \\
&\quad \left. - C_{i\bar{j}m\bar{l}} \rho_{k\bar{m}} + C_{i\bar{j}km} \rho_{l\bar{m}} \right) \\
&- v_0 \sum_{m>0} \left( \rho_{m\bar{i}} C_{m\bar{j}k\bar{l}} - \rho_{m\bar{j}} C_{imk\bar{l}} \right. \\
&\quad \left. - C_{i\bar{j}m\bar{l}} \rho_{k\bar{m}} + C_{i\bar{j}k\bar{m}} \rho_{lm} \right). \tag{E4.47}
\end{aligned}$$

(E4.41) denkleminde yer alan diğer terimlerin matris elemanları aşağıda gösterilmektedir.

Yukarıda örneklendirilen inceleme bu terimler için de yapılmalıdır <sup>1</sup>.

$$\begin{aligned}
\langle ij | \mathcal{B}_{12} | kl \rangle &= \frac{v_0}{2} (\delta_{ij} - \rho_{j\bar{i}}) \sum_m (\rho_{mk} \rho_{m\bar{l}} - \rho_{ml} \rho_{m\bar{k}}) d_{im} \\
&- \frac{v_0}{2} (\delta_{kl} - \rho_{k\bar{l}}) \sum_m (\rho_{im} \rho_{j\bar{m}} - \rho_{jm} \rho_{i\bar{m}}) d_{km} \\
&- \frac{v_0}{2} \rho_{i\bar{j}} \sum_m (\rho_{mk} \rho_{m\bar{l}} - \rho_{ml} \rho_{m\bar{k}}) d_{j\bar{m}} \\
&+ \frac{v_0}{2} \rho_{l\bar{k}} \sum_m (\rho_{im} \rho_{j\bar{m}} - \rho_{jm} \rho_{i\bar{m}}) d_{l\bar{m}}. \tag{E4.48}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle ij | \mathcal{P}_{12} | kl \rangle &= \frac{v_0}{2} (\delta_{ij} - \rho_{j\bar{i}}) \sum_m C_{m\bar{m}kl} d_{im} - \frac{v_0}{2} \rho_{i\bar{j}} \sum_m C_{m\bar{m}kl} d_{j\bar{m}} \\
&- \frac{v_0}{2} (\delta_{kl} - \rho_{k\bar{l}}) \sum_m C_{ijm\bar{m}} d_{km} + \frac{v_0}{2} \rho_{l\bar{k}} \sum_m C_{ijm\bar{m}} d_{l\bar{m}}. \tag{E4.49}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle ij | \mathcal{H}_{12} | kl \rangle &= v_0 \sum_m d_{im} (\rho_{mk} C_{m\bar{j}i\bar{l}} - \rho_{ml} C_{m\bar{j}i\bar{k}}) + v_0 \sum_m d_{m\bar{j}} (\rho_{m\bar{l}} C_{mi\bar{j}k} - \rho_{m\bar{k}} C_{mi\bar{j}l}) \\
&- v_0 \sum_m d_{mk} (\rho_{im} C_{k\bar{j}m\bar{l}} - \rho_{jm} C_{k\bar{i}m\bar{l}}) - v_0 \sum_m d_{m\bar{l}} (\rho_{j\bar{m}} C_{l\bar{i}mk} - \rho_{i\bar{m}} C_{l\bar{j}mk}). \tag{E4.50}
\end{aligned}$$

<sup>1</sup>Detaylı inceleme okuyucuya bırakılmıştır.

## ÖZGEÇMİŞ

**Adı Soyadı** : İbrahim ÜLGEN  
**Doğum Yeri** : Nevşehir  
**Doğum Tarihi** : 24 Aralık 1987  
**Medeni Hâli** : Bekâr  
**Yabancı Dili** : İngilizce

### Eğitim Durumu

**Lise** : 2000 Evler Lisesi (Yabancı Dil Ağırlıklı) (2005), Nevşehir  
**Lisans** : Ondokuz Mayıs Üniversitesi Eğitim Fakültesi Ortaöğretim Fen ve Matematik Alanları Eğitimi Fizik Öğretmenliği Anabilim Dalı (Tezsiz Yüksek Lisans) (2010), Samsun  
**Yüksek Lisans** : Ankara Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı (2011 - 2014 ), Ankara  
**Doktora** : Ankara Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı (2014 - 2020 ), Ankara

### Çalıştığı Kurumlar

Siirt Üniversitesi (Şubat 2011- Eylül 2011)  
Ankara Üniversitesi (Eylül 2011- ...)

### Yayınlar

Ulgen, I., Yilmaz, B., Lacroix, D. 2019. Impact of the initial fluctuations on the dissipative dynamics of interacting Fermi systems: a model case study. Phys. Rev. C 100, 054603.

### Hakemli Dergiler

Ulgen, I., Yilmaz, B. 2019. Dissipative dynamics within stochastic mean-field approach. Bitlis Eren University Journal of Science and Technology 9(2)104–108.

### Uluslararası Kongre Sunum

Dissipative dynamics within stochastic mean-field approach. XII. International Conference on Nuclear Structure Properties, Bitlis Eren University, Bitlis/TURKEY.