

**TEKİLLİKLİ NİCEM DİZGELERİN BEKLENEN DEĞERLERİNDE
OLASILIKÇIL EVRİM KURAMI, AĞIRLIKLAR, SÖZDE BEKLENEN DEĞERLER,
SAPTIRIM AÇILIMLARI, PADÉ TÜRÜ YAKINSATIŞ**

ÖZET

Nicem dizgelerin devinimi, çok çeşitli bilimcil araştırım ve uygulayım alanlarında etkin biçimde incelenmekte ve son birkaç on yıllık zaman diliminde bilimcil yazında, teknolojidaki gelişmelere de bağlı olarak giderek artan bir oranda yer almaktadır. Buna rağmen, var olan kuram ve yöntemler ile kesin çözümü belirlenebilen dizge sayısı çok çok azdır. Nicem bir dizgenin devinimini betimleyen temel denklem dizge Schrödinger denklemi olarak adlandırılan bir doğrucul (ing: linear) göre türevli denklemdir ve çözümcül olmadığı durumlar için, bilgisayar teknolojisindeki gelişmelere bağlı olarak etkinliği giderek artmakta olan yaklaştırım uzişleri (ing: algorithm) geliştirilmektedir. Bu sav çalışmasının odağı ise Schrödinger denklemi çözümü için bir yöntem geliştirmek değil, ancak Metin Demiralp öncülüğünde bilimsel yazına kazandırılan çok yeni ve geliştirimi devam etmekte olan uzbilimcil yöntem ve uzişlerin önemli bir uygulayım alanı olarak nicem dizgelerde sınanması ve nicem devinibilim ve doğrucul cebirin kuramlarıyla geliştirimi ve dahası Schrödinger denklemini çözmeden işleyebilecek bir devinim belirleyim uzişinin bilimsel yazına kazandırılması olmuştur.

Bu sav kapsamında yapılan çalışmalar burada verilen sıraya göre özetlenecek olursa, önce nicem devinibilimin temel kuramları anımsatılarak, uygulayımın odağında bulunan salt uzaklığa bağımlı etkileşimli iki nesnecikli nicem dizgeler için en yalın uzbilimcil biçim oluşturulmuştur. Daha sonra en özelsiz durumda bir nicem dizgenin temel işleçleri ile dizge Hamilton işleci arasındaki Poisson kümesimgelisi denklemleri üzerinden bir beklenen değer devinibilimi biçelendirilmiştir. Bu yapılırken, dizge Hamiltoniyeni en özelsiz yapıda ele alınarak, dizge temel işleçleri olan devinirlik ve konum işleçleri için Poisson kümesimgelisi denklemleri üzerinden yapılan inceleyiş, bu temel işleçleri de içeren N tane işlecin olduğu yapıya genişletilmiştir. Bu en özelsiz durum için, dizge Poisson kümesimgelisi denklem takımı, işleçleri öge olarak içeren bir \hat{s} dizge yöneyi tanıımı ve kullanımıyla tıkız olarak betimlenmiştir. Bu denklem takımı, dizge yöneyinin Kronecker üslüleri türünden toplamdiziye açılarak elde edilen yaklaştırımda sağ yanda beliren çokçokterimliliğin derecesinin ikiye düşürülmesi için uzay genişletimi uygulanmıştır. Elde edilen ikinci derecelilik altında, beklenen değer devinim denklemlerini sendelenimsizlik ereyinde "Olasılıkçıl Evrim Kuramı (OLEVKU) ile çözülebilecek yapıya kavuşmakta olduğu gösterilmiştir ve suzödekçil (ing: Hydrogen-like) dizgeler için bir uygulayış yapılmıştır.

Bir sonraki bölümde, Coulomb etkileşimli dizgeler üzerinde Sendelenim kuramı tabanlı bir inceleyişle tekilliklere odaklanılmıştır. Bu inceleyişte, bir işlecin beklenen değerinin zamanda evrimi için Maclaurin toplamdizisi açılımı yazılabileceği öngörülerek, bu toplamdizinin, Hamilton işleci zamana belirtik olarak bağlı olmayan dizgeler için aslında bir sendelenim açılımına karşılık geldiği gösterilmiştir. Suzödekçil dizgeler için yapılan uygulamayla her işleç için sendelenim açılımı

katsayılarının belirlenebilir olmadığı gösterilmiştir. Bu durum dizge Hamilton işlecindeki teklikten kaynaklanmaktadır. Böyle tekliklerin varlığında başlangıç dalga işlevinin Hamilton işleci altındaki görüntüsü, başlangıç dalga işlevinin bulunduğu uzaydan taşabilmektedir. Dolayısıyla sendelenim işlecinin doğalsayı üslülerinin başlangıç dalga işlevine etkisinin ürettiği görüntü işlevleri uzayında çalışmak uygun görülmüş ve suözdekçil dizgeler için uygulanmıştır. Burada elde edilen yapıda görüntü işlevleri ikililerinin yer aldığı tümlevlerin tümünün tanımlı olmayabileceği görülmüştür. Bu durumda tümlevlenebilirliğin bir ağırlık işleci kullanımıyla sağlanabileceği gösterilmiştir. Bu ağırlığın sendelenim giderimi tabanlı olarak nasıl belirlenebileceği üzerinde durulmuştur.

Tüm bu inceleyişlerin ve elde edilen bulguların yardımıyla örtülenmiş Coulomb gizilgüçlü dizgelerin izgecil özelliklerinin saptırım açılımı tabanlı bir inceleyiş ile belirlenimine odaklanılmıştır. Burada yapay bir saptırım değıştirgesi yerine dizgenin özünden kaynaklanan örtüleyiş değıştirgesi bir saptırım değıştirgesi olarak ele alınmış ve saptırım katsayılarının nasıl belirleneceği gösterilmiştir. Örtüleyiş değıştirgesinin eksisiz (ing: positive) değeri için saptırım toplamdzilerinin irak-sayacağı görüldüğünden, Padé çizelgeleri oluşturulmuş ve yakınsayışın sağlanabildiği gösterilmiştir.