



**T.C.
ONDOKUZ MAYIS ÜNİVERSİTESİ
LİSANSÜSTÜ EĞİTİM ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANA BİLİM DALI**

**ARTTIRAN, EKSİLTEN VE TOPLAM SPİN İŞLEMCİLERİNE
KARŞILIK GELEN DÖNME İŞLEMCİ MATRİSLERİNİN
OLUŞTURULMASI**

Yüksek Lisans Tezi

Didem ÇİLENGİROĞLU

Danışman
Prof. Dr. Recep TAPRAMAZ

SAMSUN
2021

**T.C.
ONDOKUZ MAYIS ÜNİVERSİTESİ
LİSANSÜSTÜ EĞİTİM ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANA BİLİM DALI**



**ARTTIRAN, EKSİLTEN VE TOPLAM SPİN İŞLEMCİLERİNE
KARŞILIK GELEN DÖNME İŞLEMCİ MATRİSLERİNİN
OLUŞTURULMASI**

Yüksek Lisans Tezi

Didem ÇİLENGİROĞLU

Danışman

Prof. Dr. Recep TAPRAMAZ

SAMSUN
2021

TEZ KABUL VE ONAYI

Didem ÇİLENGİROĞLU tarafından, Prof. Dr. Recep TAPRAMAZ danışmanlığında hazırlanan “Arttıran, Eksilten ve Toplam Spin İşlemcilerine Karşılık Gelen Dönme İşlemci Matrislerinin Oluşturulması” başlıklı bu çalışma, jürimiz tarafından 29.7.2021 tarihinde yapılan sınav sonucunda oy birliği ile başarılı bulunarak Yüksek Lisans Tezi olarak kabul edilmiştir.

	Unvanı Adı Soyadı Üniversitesi Ana Bilim/Ana Sanat Dalı	İmza	Sonuç
Başkan	Prof. Dr. Metin ORBAY Amasya Üniversitesi Eğitim Fakültesi		<input checked="" type="checkbox"/>
			Kabul
			<input type="checkbox"/>
			Ret
Üye	Prof. Dr. Recep TAPRAMAZ Ondokuz Mayıs Üniversitesi Fizik Anabilim Dalı		<input checked="" type="checkbox"/>
			Kabul
			<input type="checkbox"/>
			Ret
Üye	Prof. Dr. Metin YAVUZ Ondokuz Mayıs Üniversitesi Fizik Anabilim Dalı		<input checked="" type="checkbox"/>
			Kabul
			<input type="checkbox"/>
			Ret

Bu tez, Enstitü Yönetim Kurulunca belirlenen ve yukarıda adları yazılı jüri üyeleri tarafından uygun görülmüştür.

ONAY
... / ... / ...
Prof. Dr. Ali BOLAT
Enstitü Müdürü

BİLİMSEL ETİĞE UYGUNLUK BEYANI

Hazırladığım Dönem Projesi tezinin bütün aşamalarında bilimsel etiğe ve akademik kurallara riayet ettiğimi, çalışmada doğrudan veya dolaylı olarak kullandığım her alıntıya kaynak gösterdiğimi ve yararlandığım eserlerin Kaynaklar'da gösterilenlerden oluştuğunu, her unsurun enstitü yazım kılavuzuna uygun yazıldığını ve TÜBİTAK Araştırma ve Yayın Etiği Kurulu Yönetmeliği'nin 3. bölüm 9. maddesinde belirtilen durumlara aykırı davranılmadığını taahhüt ve beyan ederim.

İmza

29 /07 / 2021

Öğrenci Adı SOYADI
Didem ÇİLENGİROĞLU

TEZ ÇALIŞMASI ÖZGÜNLÜK RAPORU BEYANI

Tez Başlığı : Arttıran, Eksiltten ve Toplam Spin İşlemcilerine Karşılık Gelen Dönme İşlemci Matrislerinin Oluşturulması

Yukarıda başlığı belirtilen tez çalışması için şahsım tarafından 16.06.2021 tarihinde intihal tespit programından alınmış olan özgünlük raporu sonucunda;

Benzerlik oranı : % 12

Tek kaynak oranı : % 1 çıkmıştır.

İmza

29 /07 / 2021

Danışman Adı SOYADI
Prof. Dr. Recep TAPRAMAZ

ÖZET

ARTTIRAN, EKŞİLTEN VE TOPLAM SPİN İŞLEMCİLERİNE KARŞILIK GELEN DÖNME İŞLEMCİ MATRİSLERİNİN OLUŞTURULMASI

Didem ÇİLENGİROĞLU

Ondokuz Mayıs Üniversitesi

Lisansüstü Eğitim Enstitüsü

Fizik Ana Bilim Dalı

Yüksek Lisans, Haziran/2021

Danışman: Prof. Dr. Recep TAPRAMAZ

Kuantum mekaniksel dönme işlemcileri, puls manyetik rezonans spektroskopilerinde önemli bir rol oynar ve kuantum mekaniği ve matematiğinin de konusudur. Spin 1/2'ye karşılık gelen dönme operatörleri yaygın olarak bilinir ve kimi kuantum mekaniği ders kitaplarında bulunabilir.

Spin tabanlı kuantum hesaplamada öncelikle iki durumlu spin-1/2 sistemlerle oluşan kubitleri esas alırken diğer yandan da spin-1 sistemin oluşturduğu qutrit ve daha büyük spin sistemlerinin oluşturduğu durumlar üzerinde de çalışmalar yapılmaktadır. Buna dayanarak bu tezde önce kuantum hesaplama hakkında temel bilgiler verilecek, peşinden spin tabanlı kuantum hesaplamalarda kullanılan özellikle Pauli spin matrislerinin önemi ve fonksiyonları gözden geçirilecektir. Spin-1/2'nin Pauli spin matrislerinin kuantum hesaplamasındaki kullanımları göz önüne alınarak daha önce türetilen diğer spin işlemci matrislerinin dönme işlemcileri yanında bu spin işlemcilerinin \hat{S}_+ , \hat{S}_- ve \hat{S}^2 işlemcilerine karşılık gelen dönme matris işlemcilerinin elemanları türetilecektir.

Zamana bağlı Schrödinger denklemi üstel işlemci (exponential operatör) kavramını ortaya çıkarmıştır. Üstel işlemci kapalı haliyle işlem yapamadığından temel bir yöntem olarak üstel ifade kuvvet serisine açılarak fonksiyonel hale getirilir. Bu seri açılımları 1/2 ile 5/2 spinlerin merdiven işlemcileri \hat{S}_+ , \hat{S}_- ve \hat{S}^2 işlemcileri için belirli bir açı aralığında toplanarak elde edilen sayısal değişim uygun fonksiyonlara en küçük kareler yöntemiyle uydurularak ilgili spinin dönme işlemcilerinin elemanları elde edilmiştir.

Anahtar Sözcükler: Kuantum hesaplama, spin, spin işlemcisi, artıran spin işlemcisi, eksiltlen spin işlemcisi, üstel işlemci, dönme işlemcisi.

ABSTRACT

FORMATION OF ROTATION OPERATOR MATRICES CORRESPONDING TO INCREASING, DECREASING AND TOTAL SPIN OPERATORS

Didem ÇİLENGİROĞLU

Ondokuz Mayıs University

Institute of Graduate Studies

Department of Physics

Master, June/2021

Supervisor: Prof. Dr. Recep TAPRAMAZ

Quantum mechanical rotation operators play important role in pulsed magnetic resonance spectroscopies and are the subject of quantum mechanics and mathematics. The rotation operators corresponding to spin-1/2 are well known and can be found in some quantum mechanics textbooks.

While spin-based quantum computation uses primarily qubit systems created by spin-1/2 systems, qutrit systems created by spin-1 systems and higher spin systems are also studied. In this thesis, keeping above works in mind, quantum computing principles will be summarized and then importance and operations of Pauli spin operators used in spin-based quantum computing will be overviewed. Importance of Pauli spin operators of spin-1/2 in quantum computing led us to drive rotation operators of spins \hat{S}_+ , \hat{S}_- ve \hat{S}^2 .

Exponential operator concept is defined by time dependent Schrödinger equation. It is an operator of closed form and are not applicable to corresponding systems in this form. One way of application of exponential operators is converting it to linear form by power series expansion. In this thesis, rotation operators of spins 1/2 to 5/2 are determined by series expansion of exponential operators, calculating the series for consecutive angles and fitting the found values to functions representing the variations of corresponding rotation operator elements.

Keywords: Quantum computing, spin, spin operator, increasing spin operator, decreasing spin operator, exponential operator, rotating operator.

ÖNSÖZ VE TEŞEKKÜR

Kuantum mekaniğinin temel unsuru olan spin işlemcileri özellikle manyetik rezonans spektroskopisi ile spin tabanlı kuantum hesaplama teori ve tekniklerinde esas dayanaktır. Bu hususu göz önünde bulundurarak daha önce farklı spin sistemleri için (Spin-1/2 ...5/2), yapılan spin dönme işlemcilerine ilave olarak bu yüksek lisans tez çalışmasında da, manyetik rezonans spektroskopisinin vazgeçilmez elmanlarından olan spin-1/2 ile 5/2 arası artıran, eksilten ve toplam spin işlemcilerine karşılık gelen dönü operatör matrisleri oluşturulmuştur.

Yüksek lisans eğitimi ve tez çalışması süresince her safhada beni anlayış tecrübe ve bilgisi ile destekleyen saygıdeğer danışman hocam Prof. Dr. Recep TAPRAMAZ'a en içten teşekkürlerimi sunarım. Yine yüksek lisans eğitimimin tüm süreçlerinde danışma ihtiyacı hissettiğim konularda bilgi ve yardımlarını gördüğüm değerli hocam Prof. Dr. Metin YAVUZ'a ve değerli hocam Doç. Dr. Şehriman ATALAY'a da ayrı teşekkür ederim.

Tez çalışması esnasında beni her zaman destekleyen aileme de hususi olarak teşekkürü borç bilirim.

Didem ÇİLENGİROĞLU

İÇİNDEKİLER

TEZ KABUL VE ONAYI	i
BİLİMSEL ETİĞE UYGUNLUK BEYANI	ii
ABSTRACT.....	iv
ÖNSÖZ VE TEŞEKKÜR	v
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	viii
ŞEKİLLER DİZİNİ	ix
TABLolar DİZİNİ	x
1. GİRİŞ	11
1.1. Tezin Amacı	13
1.2. Literatür Araştırması.....	15
1.2.1. Kuantum Bilgi İşleme Hakkındaki Literatür Özeti	16
1.2.2. Dönme İşlemcileri Hakkındaki Literatür Özeti.....	19
2. GENEL BİLGİLER	21
2.1. Kuantum Bilgi Teorisi	21
2.1.1. Kubit (Kuantum Bit)	21
2.1.2. Spin 1/2 Sistemler	22
2.1.3. Kutritler	23
2.1.4. Çoklu Kubitler.....	23
2.2. Kuantum Mantık Geçitleri.....	25
2.2.1. Tek Kubitlik Geçitler	25
2.2.1.1. NOT (DEĞİL) Geçiti, Pauli-X İşlemcisi	26
2.2.1.2. Pauli-Y Geçiti	26
2.2.1.3. Pauli-Z Geçiti.....	26
2.2.1.4. Bir Kubit İçin Hadamard Geçiti.....	27
2.2.1.5. Arttıran ve Eksilten İşlemciler (Merdiven İşlemcileri).....	27
2.2.2. İki Kubitlik Kuantum Mantık Geçitleri.....	28
2.2.2.1. CNOT (Kontrol-NOT) Geçiti	28
2.2.2.2. SWAP Geçiti.....	30
2.2.2.3. Toffoli (CCNOT) Geçiti	31
2.2.2.4. Fredkin (CSWAP) Geçiti.....	32
2.3. Kuantum Hesaplama Sistemleri	33
2.3.1. Kuantum Elektrodinamiği (KED)	33
2.3.2. Işık Polarizasyonu	34
2.3.3. Süperiletkenlik	34
2.3.4. Kuantum Nokta Kusurları	35
2.3.5. Spintronik.....	35
2.3.6. Moleküler Mıknatıslar.....	35
2.3.7. Endohedral Fullerenler	36
2.3.8. Spin Tabanlı Kuantum Hesaplama Sistemleri.....	36
2.3.8.1. Spin Tabanlı Kuantum Hesaplama Sistemi 1: NMR Spektroskopisi.....	37
2.3.8.2. Spin Tabanlı Kuantum Hesaplama Sistemi 2: EPR Spektroskopisi	38
2.3.8.3. Spin Tabanlı Kuantum Hesaplama Sistemi 3: ENDOR Spektroskopisi	40
3. MATERYAL VE METOT	41
3.1. Spin İşlemcileri ve Spinlerin Matris Temsilleri.....	41

3.2. Üstel İşlemciler: Dönme İşlemcisi ve Yoğunluk Matrisi İşlemleri	42
3.3. Yoğunluk İşlemci Teorisi	44
4. BULGULAR.....	47
4.1. Spin İşlemci Matrislerinin Türetilmesi.....	47
4.2. Dönme İşlemcilerinin Türetilmesi ve Etkileri	51
4.3. \hat{R}_+ , \hat{R}_- ve \hat{R}^2 İşlemci Elemanlarının Uyum Fonksiyonları	54
4.3.1. Spin-1/2'ye Karşılık Gelen \hat{R}_+ , \hat{R}_- ve \hat{R}^2 Dönü İşlemcileri	55
4.3.2. Spin-1'e Karşılık Gelen \hat{R}_+ , \hat{R}_- ve \hat{R}^2 Dönü İşlemcileri	57
4.3.3. Spin-3/2'ye Karşılık Gelen \hat{R}_+ , \hat{R}_- ve \hat{R}^2 Dönü İşlemcileri	58
4.3.4. Spin-2'ye Karşılık Gelen \hat{R}_+ , \hat{R}_- ve \hat{R}^2 Dönü İşlemcileri	60
4.3.5. Spin-5/2'ye Karşılık Gelen \hat{R}_+ , \hat{R}_- ve \hat{R}^2 Dönü İşlemcileri	62
5. TARTIŞMALAR VE SONUÇLAR	64
5.1. Dönme İşlemcilerinin Elde Edilmesi Üzerine	64
5.2. Dönme İşlemcilerinin Etkileri Üzerine.....	66
6. ÖNERİLER.....	68
KAYNAKLAR	70
ÖZ GEÇMİŞ	74

SİMGELER VE KISALTMALAR

B_0	: Dış manyetik alan pulsu
B_1	: Manyetik puls genliği
β	: Elektronun Bohr magnetonu
p_k	: Sistemin k 'nci durumda bulunma olasılığı
CNOT	: Kontrollü NOT geçiti
CCNOT	: Kontrollü-kontrollü NOT geçiti (Toffoli geçiti)
ENDOR	: Elektron nükleer double rezonans
EPR	: Elektron paramanyetik rezonans
EPR	: Einstein-Podolsky-Rosen
FID	: Free induction decay
FT	: Fourier transform
h	: Planck sabiti
\hbar	: $h/2\pi$
H	: Hadamard geçiti
$\widehat{\mathcal{H}}$: Hamiltonian işlemcisi
k_B	: Boltzman sabiti
K	: Kelvin
μ	: Manyetik dipol moment
M_s	: Elektronun spini
MHz	: MegaHertz
MRI	: Manyetik rezonans görüntüleme
nA	: Nanoamper
NMR	: Nükleer manyetik rezonans
$\hat{\rho}_0$: Yoğunluk matrisinin başlangıç durumu
$\rho(t)$: Zamana bağlı yoğunluk matrisi
RF	: Radyo frekansı
\hat{R}	: Dönü işlemcisi
S	: Elektron spin açısal momentum işlemcisi
S_+	: Arttıran spin işlemcisi
S_-	: Eksilten spin işlemcisi
SİB	: Serbest indüksiyon bozulması
SWAP	: Common gateway interface
S_x	: Elektron spininin x-yönünde işlemcisi
S_y	: Elektron spininin y-yönünde işlemcisi
S_z	: Elektron spininin z-yönünde işlemcisi
t	: Puls uygulama süresi
τ	: Döndürme açısı puls genişliği
ω	: Açısal frekans
ξ	: Skaler katsayı

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1. Kuantum mekaniksel bir özellik olan spinin ‘basitleştirilmiş’ modeli	22
Şekil 2.2. Bloch küresinin temsili	22
Şekil 2.3. CNOT geçitinin bir devredeki gösterimi (\oplus işlemi mod 2’ye göre toplama işlemidir.).....	30
Şekil 2.4. SWAP mantık geçitinin üç CNOT geçitiyle oluşumu ve spin değiş tokuşu devre gösterimi	31
Şekil 2.5. Toffoli (CCNOT) geçiti ve eşdeğer devresi.....	31
Şekil 2.6. Fredkin (CSWAP) geçitinin devre gösterimi.....	32
Şekil 2.8. Işık polarizasyonu	34
Şekil 2.7. Feynman diyagramı elementleri	33
Şekil 2.9. Bir endohedral fullerenin yapısı.	36
Şekil 2.10. Manyetik alan içinde z doğrultusunda kutuplanmış bir spine uygulanan B_0 şiddetindeki ve τ genişlikteki manyetik alan pulsunun etkisi. (I) Kutuplanmışspin kararlı durumda iken puls uygulanıyor, (II) spin θ açısı kadar yatarak dönmeye devap eder, (III) puls kalktıktan sonra aldığı enerjiyi vererek kararlı duruma döner.....	37
Şekil 4.1. Spin-1/2’nin S_y işlemcisinin (1,1) ve (1,2) elemanlarına karşılık gelen dönü işlemcisinin elemanlarının açığa göre değişimleri.....	54
Şekil 4.2. Spin-1/2 için arttıran ve eksiltten işlemcilerinin sıfırdan farklı elemanlarına karşılık gelen dönme işlemci matrislerinin açısal değişimleri.....	56
Şekil 4.3. Spin-1/2 için $\hat{R}^{(2)}(\theta)$ dönü işlemcisinin köşegen elemanlarının açığa bağlı değişimleri.	57
Şekil 4.4. Spin-1 için arttıran, eksiltten ve toplam spin işlemcilerine karşılık gelen dönme işlemci matris elemanlarının değişimleri.....	58
Şekil 4.5. Spin-1 için $\hat{R}^{(2)}(\theta)$ işlemcisinin elemanlarının değişimleri.....	59
Şekil 4.6. Spin-3/2 için \hat{R}_+ , \hat{R}_- işlemcisinin elemanlarının değişimleri.....	60
Şekil 4.7. Spin-3/2 için $\hat{R}^{(2)}(\theta)$ işlemcisinin elemanlarının değişimleri.....	60
Şekil 4.8. Spin-2 için \hat{R}_+ , \hat{R}_- işlemcisinin elemanlarının değişimleri.....	61
Şekil 4.9. Spin-2 için $\hat{R}^{(2)}(\theta)$ işlemcisinin elemanlarının değişimleri.....	62
Şekil 4.10. Spin-5/2 için $\hat{R}^{(2)}(\theta)$ işlemcisinin elemanlarının değişimleri.....	63

TABLolar DİZİNİ

Tablo 2.1. CNOT geçitinin doğruluk tablosu	29
Tablo 2.2. SWAP işlemcisinin doğruluk tablosu.....	30
Tablo 2.3. Toffoli (CCNOT) geçitinin doğruluk tablosu.....	31
Tablo 2.4. Fredkin (CSWAP) geçitinin üç kubit için doğruluk tablosu.....	32
Tablo 4.1. Spin işlemcisinin S_y , (1,1) elemanına karşılık gelen dönü matrisinin r_{11} ve r_{12} elemanlarının her bir açıda yapılan toplama işleminin değerleri.....	53
Tablo 4.2. \hat{S}_+ işlemcisinin sıfırdan farklı olan (1,2) elemanı ile \hat{S}_- işlemcisinin (2,1) elemanı için kosinüs ve sinüs serilerinin toplamları 0° ile 360° arasında 20° adımlarla toplanırsa bulunan değerleri	56

1. GİRİŞ

Son 50 yıldır bilgisayar teknolojisinde bir küçülme, hızlı bir minyatürleşme yaşanmaktadır. Şu anki ivmelenme devam ederse, Moore Kanununa¹ göre yakın gelecekte, bir bilgisayarın temel bellek bileşenleri tek tek atomlar mertebesinde olacaktır. Bu ölçeklerde kuantum fiziğinin yasaları geçerli olmaktadır. Yeni ortaya çıkmakta olan bir alan olan “kuantum hesaplama”, bilgisayar biliminin ve bilgi teorisinin temellerini kuantum fiziği ile uyumlu bir şekilde yeniden keşfetmektedir. Kuantum hesaplama, şu an hesaplamanın kuantum fiziğine dayanan yeni ve doğru bir modelidir.

Günümüzde bilgisayar teknolojisi, insan beyni dışında, bizlere hesaplama yeteneği kazandırmıştır. Bilgisayarlar, bir insandan çok daha hızlı bir şekilde hesaplama yapabildikleri gibi, bir insanın aynı anda aklında tutabileceğinden daha fazla bilgiyi depolayabilmekte ve bunlara hızlı bir şekilde erişilebilmesine olanak sağlamaktadırlar. İlkel bilgisayarlar mekanik bir mimariye sahipti. Bunlar daha sonra röleler, vakum tüpleri, transistörler ve nihayet entegre devrelerle değiştirildiler. Her geçen gün entegre devrelerdeki eleman sayısı artmakta, gelişen litografi teknikleri sayesinde bu devrelerdeki transistör boyları küçülmektedir.

Kuantum hesaplama teknolojileri çok daha fazla bilginin aynı anda işlenmesine olanak tanıyacak, bilgi işleme teknolojisini temelinden değiştirecektir. Kuantum bilgisayarları belirli işlemleri geleneksel bilgisayarlara göre üstel olarak daha yüksek bir hızla yapabilecektir.

Kuantum bilgisayarlar, klasik akrabalarından farklı olarak, mikroskobik dünyaya hükmeden kuantum yasalarına dayalı olarak çalışacaklardır. Son yıllarda yapılan kuramsal araştırmalar, çalışma mekanizmasındaki bu değişikliğin sonucunda kuantum bilgisayarların bir takım zor problemleri daha kolay çözebileceğini göstermektedir. Kuantum bilgisayarların piyasaya çıktığı an, bugün kullanılan klasik bilgisayarların çöpe atılmaya başlanacağı anlamına gelmemektedir. Kuantum bilgisayarlarının insan hayatına girmesi bilgi işleme bilminde bir devrim oluşturacak ve bu da pek çok bilimsel konudaki gelişmeleri kuvvetlendirecek ve hızlandıracaktır.

¹ Moore Kanunu: Bilgisayar teknolojisinde her yıl işlem kapasitesinin ikiye katlanarak gelişeceğini öngörmektedir.

Günümüzde kuantum hesaplama, iki durumlu kuantum sistemlerin ortaya çıkardığı kuantum bit (kısaca ‘kubit’) olarak adlandırılan bilgi birimini ve bu birimin kombinasyonlarının kullanır, ancak üç veya daha fazla durumlu sistemler üzerine kurulmak istene kuantum hesaplama çalışmaları ve tartışmaları da yapılmaktadır. Eğer spin tabanlı kuantum hesaplama yapılacaksa, bir bilgisayar belleğinin ve işlemcisinin birim hücresi olarak görev yapacak olan atomların çekirdek ya da elektron spinini $1/2$ ise, bu spinin kuantum durumları olan $-1/2$ ve $+1/2$ kubit sistemin “0” ve “1” durumlarını oluşturur ve bir kubitlik birim olarak alınsa da spinler kuantumlu bir yapıya sahip olduklarından klasik bilgisayarlardan farklı olarak ikili şifreleme mantığında çalışmazlar. Kubitlerin bu özelliği, klasik fizik kanunlarından farklı olan kuantum mekaniği kanunlarına olan bağlılığından kaynaklanır. Bir kubit, klasik bit gibi yalnızca “0” ve “1” durumlarında bulunmaz, bu klasik pozisyonların üst üste gelmelerine (süperpozisyon) karşılık gelen durumlarda da bulunabilir. Başka deyişle bir kubit aynı anda hem “0”, hem de “1” veya bu ikisinin arasındaki sonsuz sayıdaki değerler de olabilir (Spiller, 2003). Spin $1/2$ için durum fonksiyonu küresel koordinat sisteminde kompleks fonksiyon olarak Kesim 2’de (Genel Bilgiler Kesimi) verilmiştir.

Bu gelişmelerin sonucu olarak Einstein, Podolsky ve Rosen tarafından 1935 yılında yayınlanan tarihi makalede ortaya atılan ve bilim adamlarının isimlerinin baş harfleriyle anılan EPR paradoksunun uygulaması gündeme gelmiştir (Einstein ve diğ., 1935). Bu çalışma ile ortaya atılan “konumsuzluk” olarak tercüme edilen veya “uzaktan gizli etkileşme” olarak tanımlanan “non–lokalite”, tamamen kuantum mekanik kavramlarla açıklanabilen veya bir paradoks olarak görünen olayları gündeme taşımış ve 1964 yılında John Bell tarafından ortaya atılan ve kuantum non–lokalite kavramının istatistikteki testi olan Bell Eşitsizliği tartışmasını başlatmıştır (Bell, 1964). Aynı zamanda “dolanıklık (entanglement)” ve “kuantum ışınlama (quantum teleportation)” tartışmalarıyla uygulamalar da gündeme dahil olmuştur. Bunlara aşırı yoğun kodlama, kuantum hata düzeltme kodlaması, kuantum kriptografi, kuantum ışınlama uygulamalarının gerçekleştirilmesi tartışmaları ve çalışmaları eşlik etmiştir (Ramanathan ve diğ., 2004). Bu çalışmalardan özellikle kuantum ışınlama üzerinde Bouwmeester ve çalışma arkadaşları tarafından 1997 yılında fotonlar kullanılarak, 1998 yılında Nielsen ve çalışma arkadaşları tarafından NMR spektroskopisi kullanılarak ve 2004 yılında Riebe ve çalışma arkadaşları tarafından iyon tuzaklama kullanılarak yapılan çalışmalar yayınlanmıştır (Bouwmeester ve diğ.,

1997; Nielsen ve diğ., 1998; Barrett ve diğ., 2004). Bu çalışmalara göre pulslu NMR tekniği, kuantum hesaplamada ve temel kuantum mantık geçitlerinin fiziksel olarak gerçekleştirilmesinde milat sayılmaktadır. Bu konudaki gelişmeler Literatür Araştırması kesiminde daha geniş biçimde ele alınacaktır.

1.1. Tezin Amacı

Kuantum bilgi işleme çeşitli fiziksel teknikler kullanılarak gerçekleştirilebilmektedir. Spin tabanlı kuantum bilgi işlemede manyetik rezonans spektroskopileri (Pulslu NMR, ENDOR, EPR) puls dizileri ile spektrum manipülasyonu kolay olduğundan bu tekniklerden en fazla kullanılan olarak bilinmektedir. Özellikle pulslu NMR ve ENDOR tekniği oldukça gelişmiş bir teknik olması nedeniyle temel kuantum mantık geçitlerinin fiziksel gerçekleştirilmesinde bir hayli mesafe almıştır (Jones, 2001; Ramanathan ve diğ., 2004; Rule ve Hitchens, 2006; Oliviera ve diğ., 2007). Bunun yanında ışık polarizasyonu, tuzaklanmış iyonlar gibi teknikler de kullanılmaktadır. Bu alanda, bu çalışmanın yapıldığı tarih itibarıyla pulslu NMR kadar olmasa bile dikkat çekici çalışmaların önerildiği ve gerçekleşme ihtimali yüksek olan elektron spin sistemleri ve dolayısıyla bu alanda en güçlü spektroskopi tekniği olan Elektron Paramanyetik Rezonans (EPR) Spektroskopisinin kullanılabilirliği, biradikal yapısı üzerinden tartışılacaktır. EPR ile birlikte NMR spektroskopisini içeren ENDOR dahil olmak üzere EPR spektroskopisi oldukça geniş uygulaması olan bir tekniktir. Pulslu NMR tekniğinin başarıları göz önüne alınarak farklı spin sistemlerinde EPR spektroskopisinin de kuantum bilgi teorisinin gerçekleştirilmesinde başarılı sonuçlar vereceği beklenebilir (Schweiger ve Jeschke, 2001; Malinovski ve Rudin, 2012). Bu alanda farklı safsızlıklar içeren nanotüpler ve fullerenler üzerinden umut verici sonuçlar alınmaktadır. Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı bünyesinde NMR spektroskopisi ile gerçekleştirilen yüksek lisans ve doktora tezleri yapılmış, özgün bilgiler ortaya konulan bu tezler kitap olarak da yayınlanmıştır (Şaka, 2007; Gün, 2011; Türkpençe, 2013).

Spin dipol momenti, ya da kısaca spin ve yörüngesel açısal momentum kuantum mekaniğinin temel unsurlarıdır. Atomların, çekirdeklerin, moleküllerin ve çeşitli örgülerin yapılarının oluşmasında ve enerji düzeylerinin belirlenmesinde esas rolü oynar. Spektroskopinin temel değişkenidir. Bunların yanında spin tabanlı quantum hesaplama tekniklerinde yine temel değişkendir. Bu tez çalışması, spinlerin iyi bilinen davranışları yanında spin kavramı altında ele alacağımız elektron spini, çekirdek spini,

yörüngesel açısal momentum ve bunların birleşmesiyle oluşan çiftlenmiş spinlere karşılık gelen dönme işlemcilerinin içinden merdiven, ya da artıran ve eksilten spin işlemcileri ile toplam spin işlemcisine karşılık gelen ve daha önce türetilmemiş olan dönme işlemcilerinin açık ifadeleri türetilmiştir.

Söz edilen dönü işlemcileri, kaynak olan üstel işlemcinin doğrusal olmaması nedeniyle sayısal yöntemler kullanarak art arda birkaç adımla dolaylı olarak türetilmiştir. Bu adımlar özetle aşağıda verilmiştir. Ayrıntılı yöntem Bölüm 3'te (Meteryal ve Metot Bölümü) verilmiştir.

Birinci adımda üstel işlemci, zamana bağlı Schrödinger denkleminde elde edilerek

$$\hat{R}_\alpha(\hat{S}_\alpha) = \exp(i\theta\hat{S}_\alpha) = \cos(\theta\hat{S}_\alpha) + i \sin(\theta\hat{S}_\alpha), \quad (\alpha = x, y, z) \quad (1.1)$$

ifadesiyle verilir. İfadede θ dönme açısı ve $\hat{S}_\alpha, (\alpha = x, y, z)$ spin işlemci matrisidir. Matrisin üstel konumda olması nedeniyle işlemi sürdürebilmek için önce Euler tanımı ile trigonometrik fonksiyonlara, sonra bu fonksiyonları da kuvvet serisine açmak gereklidir. İşlemin doğal sonucu olarak ifade gerçel ve sanal bileşenlerden oluşacaktır.

İkinci adımda her bir spinin işlemci matrisleri oluşturulacaktır.

Üçüncü adımda spin işlemci matrisinin her bir elemanı için kuvvet serisinin gerçel ve sanal bileşenleri belirli bir açı aralığında (örneğin $\theta = 0^\circ$ ile 360°) belirli adımlarla (örneğin $\Delta\theta = 5^\circ$) olabildiğince hassas biçimde toplanarak elemanın değişim değerleri liste halinde elde edilir.

Dördüncü adımda elde edilen değişim listesi ek küçük kareler yöntemiyle tam fonksiyona uydurularak açığa bağlı eleman fonksiyonu bulunur. (Uyum fonksiyonunun değişime tam uyması gerekir, yaklaşık uyum fonksiyonu kabul edilmez. Uyum fonksiyonunu, ya da elemanı temsil eden fonksiyonu deneme-yanılma işlemi ile bulunabilir).

Ana hatlarıyla verilen dört adımlık işlem bütün spin işlemci matrislerinin elemanları için ayrı ayrı uygulanarak dönü işlemci matrisleri oluşturulur.

Pulslu spektroskopi tekniklerinde ve dolayısıyla spin tabanlı kuantum bilgi işlemede yapılan ve yapılması gereken şey, hedef spine bir manyetik alan pulsu

uygulayarak kararlı durumundan belirli bir açı ile döndürmektir. Döndürme açısı puls genişliği (τ) ve sistemin frekansı (ω) ile belirlenir;

$$\theta = \omega\tau. \quad (1.2)$$

Şekil 2.10, NMR spektroskopisinde spine uygulanan bir pulsun spini kararlı durumdan döndürmesini ve sonra oluşan sönümlü sinüs dalgayı (FID) göstermektedir. Bu durum, dönme işlemcilerinin fonksiyonunu göstermesi bakımından önemlidir. Bu örnek sadelik için spin-1/2 için verilmiştir, ancak diğer spinler için farklı tepkiler oluşacaktır. Bu tepkileri önceden görme bakımından farklı spinlere karşılık gelen dönme işlemcilerini incelemenin yararlı olmasını beklemek yerindedir.

1.2. Literatür Araştırması

Daha önceki yıllarda mekanik sistemlerle yapılan hesaplama işlemleri İkinci Dünya savaşından sonra yapılan devasa bilgisayarla yapılmaya başlamıştır. Büyük boyutlu ve fazla elektrik harcayan elektron tüpleriyle oluşturulan mantık geçitlerin içeren bu birinci nesil bilgisayarın yerini 1960'lı yıllarda ortaya çıkan transistörlü mantık geçitlerini kullanan daha kapasiteli, fakat hâlâ büyük boyutta, fakat daha az enerji harcayan, daha hızlı ve daha kapasiteli bilgisayarlar almıştır. 1970'li yılların ortalarında çok sayıda transistor ve diyot içeren tümleşik devreler yapılmıştır. Sonuçta işlem hızı, işlem kapasitesi artmış, buna karşın fiyatı ve enerji tüketimi büyük ölçüde azalmıştır, artık bilgisayarlar kurumsal kullanımdan çıkmış evlerde kişisel kullanıma uygun hale gelmiştir. Artık masaüstü ve dizüstü bilgisayarlar dönemi başlamıştır. Bu gelişme sonucunda ilk bilgisayarlarla kıyaslanamayacak kadar güçlü, fakat çok daha küçük boyutlu bilgisayarlar yapılmaktadır. Akıllı taşınabilir telefonlar bunun en güzel örneğidir. Zira bu telefonlar aslında güçlü bir bilgisayardır.

Günümüzde yaygın olan bilgisayarlar klasik mantık geçitlerini kullanırlar. Artık bilgisayarlar oldukça düşük güçte çalışmakta, yani nanoamper mertebesinde akım çekmektedir. Bize çok küçük gelse de mevcut mikroişlemciler hâlâ çok sayıda elektron kullanmaktadır (1 nA, saniyede bir devreden yaklaşık 6 milyar elektronun geçtiği devredir ki kuantum mekaniğe göre çok büyüktür). Çok sayıda elektron akım anlamına gelmektedir ve akım dirençli iletken ve yarı iletken içinde olduğundan işlem hızının sınırlı olması ile sonuçlanır. Kuantum bilgi işleme ise bilgi işleme sistemini oluşturan mantık geçidinin çalışması için gerekli elektronun sayılabilir miktarda olmasını gerektirir ya da devre sayılabilir elektron üzerine kurulacaktır.

1.2.1. Kuantum Bilgi İşleme Hakkındaki Literatür Özeti

Kuantum bilgi işleme fikrinin öncülerinden Richard Feynman, mevcut bilgisayar teknolojisi ile kuantum mekaniksistemlerin, örneğin bir molekülün bile tamamıyla yerli terinde modellenemeyeceğini ileri sürmüştür (Feynman, 1986, 2000). Feynman'ın bu makalelerinden sonra kuantum bilgi işlemenin mümkün olabileceği düşüncesi üzerine teorinin temelleri atılmış, on yıl geçmeden kuantum hesaplamanındayandığı kuantum mantık geçitleri oluşturulmaya başlanmıştır. Bunun ardından kuantum mekanik temele dayalı sistemlere bilgi yükleme ve program kodlama işlemlerini kapsayan ve son yıllarda artık ayrıntıları ortaya çıkan “Kuantum Bilgi Teorisinin ve sistemlerinin” mevcut klasik bilgi işleme ve iletişim araçlarıyla mümkün olmayan birçok sistemin artık yapılabilir hale gelmesi bir beklenti ortaya çıkarmıştır (Türkpençe, 2007). Ayrıca nanoteknolojide son yıllarda kaydedilen gelişmeler, bu umudubeslemektedir. Her ne kadar teoride “kuantum mantık geçidi” ismi verilse de bu mantık geçitleri klasik mantık geçitlerinden tamamen farklıdır.

Klasik mantık geçitleri VE (AND), VEYA (OR) ve DEĞİL (NOT) geçitlerinden ve bunların farklı birleşimlerinden ve iki düzeyli $\{0 \text{ ve } 1\}$ durumdan oluşur. Kuantum mantık geçitlerinden Hadamard, CNOT, SWAP gibi geçitlerin klasik karşılıkları yoktur. Bunlardan Hadamard geçiti, uygulandığı salt bir durumun başka durumlarla süperpozisyonunu oluşturur (Bellac, 2006; McMahan, 2008; Nakahara ve Ohmi, 2008). Bu konuda bilinen kuantum mantık geçitlerinin özellikleri ve fonksiyonları Bölüm 2’de ele özetlenmiştir.

Klasik geçitlerde olmayan tersinirlik (reversibility) kuantum geçitlerinin önemli özelliklerinden birisidir. Bunun anlamı, kuantum bilgi işlemede bir işlemin geri alınabileceğidir. Öte yanda klasik mantık geçitlerinde bir işlem tek yönlüdür ve geri alınamaz. Tersinirlik özelliği kuantum mekanikte önemli ve temel bir işlemlerden olan “benzerlik dönüşümü” işleminden kaynaklanmaktadır (Ramanathan ve diğ., 2004; Boas, 2006; Arfken ve diğ., 2013).

Feynman’a (2000) göre klasik bilgisayarların bir kuantum sisteminin dinamiklerini taklit etmesi için üstel artan bir hesaplama kapasitesi gerektirmektedir. 1990’li yıllardan bu yana kuantum bilgisayarlarında uygulanabilecek temel algoritmaları geliştirilmeye başlanmıştır. Bilgilerin klasik bitler yerine kuantum sistemin kubitlerinde (veya kutritlerinde) saklandığı, kuantum mekaniğinin geçerli olduğu sistemde kuantum bilgi işleme algoritmaları işlemlerinde kuantum kubit ya da

daha yüksek mertebeden unsurlarının süperpozisyon özelliklerini değerlendirir. Bu zamana kadar kadar geliştirilen kuantum bilgi işlem algoritmalarından başlıcaları Deutsch, Shor ve Grover algoritmalarıdır (Bellac, 2006; McMahan, 2008; Nakahara ve Ohmi, 2008).

Kuantum bilgi teorisinin temellerinin atılması ile birlikte bunların uygulanabileceği ve bir fiziksel sistemde bilgi işleminin modellenilebileceği veya gerçekleştirilebileceği araştırılmaya ve denenmeye başlanmıştır. Bunun için kullanılacak fiziksel sistemlerin başında başında EPR, NMR ve ENDOR gibi çok iyi bilinen spektroskopi teknikleri gelmektedir.

Gershenfeld ve Chuang, (1997) pulslu NMR spektroskopik tekniklerinin kuantum bilgi işlemede gösterdiler. Bunun peşinden Shor'un çarpanlara ayırma algoritmasının uygulamasında sıvı NMR kullanılmış ve sonuç başarılı olmuştur, (Çakmak, 2011). Üç tane Spin-1/2 çekirdekli bir kuantum sistemde puls NMR tekniğinde faz işlemcileri kullanılarak Grover algoritmasının birinci aşaması olan süperpozisyon durumunu oluşturmada üç kubitlik Hadamard geçidi elde edilmiştir. Kuantum bilgi işleminin gerçekleşmesini uygulamadaki zorluklar engellemektedir. Farklı puls dizileri ile oluşturulan puls programlı NMR spektroskopisi neredeyse sınırsız sayıda teknik bu alandaki çalışmalara umut vermektedir.

NMR tekniğinin kuantum bilgi işlemedeki uygulamasının başında Deutsch algoritmasının iki kubitte temsil edildiği sitozin molekülü gelmektedir. Aynı moleküllere Grover'in arama algoritması da uygulanmıştır (Gruska, 1999). diVincenzo, (2000) bir kuantum bilgisayarın uygulanabilir olması için gerekli kriterleri ortaya koymuştur. diVincenzo'ya göre bu kriterlerden birisi evrensel kuantum mekanik mantık geçitlerinin olması gereğidir. Kuantum bilgi işlemede en basit mantık geçiti NOT olup tek kubitlik bir geçittir. Diğer mantık geçitleri 2 veya daha fazla kubitte oluşabilir. Eğer çok kubitli mantık geçitlerinden bir kubitin durumu diğer kubitin durumuna bağlı ise böyle mantık geçitleri kontrollü mantık geçitleridir. Evrensel mantık geçitlerinin sıralı ve ardışık biçimde belli kurullarla uygulanarak sonucu başka farklı mantık geçitleri oluşturulabilir. İki farklı kubitin durumları arasında değiş tokuş işlemi yapan ve CNOT geçitlerinin arda arda uygulanmasıyla SWAP mantık geçidinin oluşumu buna verilebilecek bir örnektir, (Bellac, 2006; McMahan, 2008; Nakahara ve Ohmi, 2008).

Pulslu NMR tekniklerinin kuantum bilgi işlemede kullanılması hakkında son yıllarda çok sayıda çalışma yayınlanmıştır. Bu çalışmalar ayrıca kitap halinde toplanmıştır, (Rule ve Hitchens, 2006; Oliviera ve diğ., 2007).

Radyo frekansı (RF) bandında işleyen Pulslu NMR tekniğinin bu alanda sağladığı gelişmelerden sonra mikrodalga frekans bandında çalışan pulslu EPR spektroskopisinin gecikmeli olsa da denenmeye ve üzerinde çalışılmaya başlanmıştır. Uygun paramanyetik yapıların kullanılmasıyla kuantum bilgi işleminin EPR tekniğiyle de yapılabileceği bazı özel yapılarda gösterilmiştir. Bu yapıların başında endohedral fullerenler gelmektedir. Buna paralel olarak EPR ve NMR tekniklerini birlikte kullanan ENDOR tekniği ile bu alanda umut verici çalışmalar yapılmaktadır.

Puls ve Fourier transform NMR tekniğinin kuantum hesaplama işlemlerinde öncelikli kullanılması nedeni, teknolojisinin uygulanabilirliğinin öncelikle mümkün olmasıdır. Bu sürede pulslu NMR ve Fourier transform spektroskopik teknikleri ile bazı kuantum mantık geçitleri oluşturulabilmiştir, (Cory ve diğ., 1997; Rule ve Hitchens, 2006; Oliviera ve diğ., 2007).

EPR spektroskopisi çalışma frekansı ve incelemeye konu maddeler ve sistemler dışında teknik olarak NMR ile benzerdir. Belki de en önemli farkların başında NMR spektroskopisinde farklı çekirdeklerin rezonans frekansları birbirinden oldukça farklı olduğundan farklı çekirdekler için farklı detektörler kullanılırken EPR spektroskopisinde bütün çekirdekler tek bir detektörle gözlenebilir. Bu özelliği kuantum bilgi işleme için güçlü bir teknik olabilir. Pulslu EPR tekniği ile yapılan çalışmalardan birisi Ayabe ve diğ. (2013) örnek olarak incelenebilir.

Paramanyetik merkezleri oluşturan eşlenmemiş elektron içeren kimyasal maddelerin başında geçiş metal iyon kompleksleri, lantanit grubu iyonlarla yapılan kompleksler, yapı bozukluklarında tuzaklanan elektronlar, spin etiketleri gibi çok sayıda yapı bulunmaktadır ve bunlar EPR spektroskopisi ile incelenebilmektedir. Bu yapıların her birisi kuantum bilgi işlemede potansiyel oluşturmaktadır. EPR spektroskopisinin inceleme alanına giren diğer bir yapı iki komşu paramanyetik merkezin oluşturduğu biradikallerdir. Bu yapı üzerinde başlangıç düzeyinde bazı çalışmalar yayınlanmıştır, (Nakazawa ve diğ., 2012; Ayabe ve diğ., 2013). Çalışılacak biradikallerin kararlı olmaları öncelikli bir gerekliliktir. Bu biradikallerden birisi $K_2S_2O_8$ ve $(NH_4)_2S_2O_8$ kristalleri içinde oldukça basit ve kolay çözümlenebilen SO_4^- –

SO_4^{2-} biradikalidir, (Tapramaz, 1991). Diğer kararlı biradikaller, α -kuartz içinde oluşturulan oksijen boşluk kusurları, (Maskhovtsev ve Pan, 2011), ^{14}N merkezli yapılar, (Nakazawa ve diğ., 2012), $\text{Cu}^{2+} - \text{Cu}^{2+}$ yapısındaki biradikaller, (Kirk ve Shultz, 2013; Fatila ve diğ., 2013; Kim ve diğ., 2003), iki Mn^{2+} iyonunun CaO ve MgO örgüleri içinde oluşturduğu biradikeller, (Harris, 1971), olabilir. Bu ve benzeri yapılar EPR spektroskopisiyle incelenebilir ve kuantum bilgi teorisinin bu teknikle uygulanmasında değerlendirilebilir.

Nanoteknolojinin konusu olan endohedral fullerenler ile nanotüpler, örgüdeki karbonlardan bir veya birkaçının farklı atomlarla değiştirilebilmesi, kafes içine atom veya atom grubunun konulabilmesi ve bunların kafes içindeki farklı durumları alanda ayrıca gelecek vaadeder görünmektedir. Çünkü fullerenlerle tek bir radikal, biradikal, triradikal gibi oldukça kararlı yapıların yapılması mümkündür. Bu yapıların kullanılmasına örnek olarak W. Harneit tarafından fullerenlerin içerisine yerleştirilen bir atomun elektron ve çekirdek spinlerinin ENDOR tekniğinin yardımıyla kontrolü yapılarak bir kuantum bilgisayarının yapılabileceği üzerindeki çalışması gösterilebilir (Çakmak, 2011). Bu çalışmadan sonra endohedral fullerenlerle iki kubitlik kuantum mantık geçitleri oluşturulmaya başlanmıştır (Ju ve diğ., 2007).

1.2.2. Dönme İşlecileri Hakkındaki Literatür Özeti

Kuantum mekanikte ve pulslu manyetik rezonans spektroskopilerinde spin dönme işlemcilerinden yaygın olarak sadece spin-1/2 dönme işlemcilerinin bileşenleri $\hat{R}_x(\theta)$, $\hat{R}_y(\theta)$ ve $\hat{R}_z(\theta)$ ile spin-1 ve spin-3/2 için Wigner formülü kullanılarak ve grup teorisi bağlamında sadece $\hat{R}_y(\theta)$ verilmektedir, (Messiah, 2007; Takahiro ve diğ., 2007; Sakurai and Napolitano, 2011; Blanca and Florez, 1997; Dachsels, 2006; Gimbutas and Greengard, 2009; Aubert, 2013; Morrison ve Parker, 1987;).

Herhangi bir spin için dönme işlemcilerinin bütün elemanlarını veren fonksiyonlar tamamen matematik işlemlerle Curtright ve diğ. (2014) ve peşinden eklemeleri Curtright and Van Kortryk, (2014) tarafından trigonometrik polinomlarla toplu biçimde oluşturularak verilmiştir. Ancak bu fonksiyonlar salt spinler içindir. Yüksek mertebeden spin içeren Hamiltonianlardaki örneğin $\hat{S}_x^2, \hat{S}_y^2, \hat{S}_z^2, \hat{S}^2$ ya da $\hat{S}_x \hat{S}_y$ veya merdiven işlemcileri olan \hat{S}_+ veya \hat{S}_- işlemciler bu fonksiyonlarla doğrusal bağlantılı olmadıkları için bulunamaz. Bu tür yüksek mertebeden ya da çapraz spin işlemcileri de spin-spin dipolar, kuadrupol gibi hamiltonian terimlerine karşılık gelen

dönme işlemcilerini bulmak için matematik yöntemle oluşturulan genel fonksiyonlar yoktur. Bu tür işlemcilerin dönme işlemcilerini oluşturmanın yolu ilk defa Kocakoç (2014) tarafından yapılmış, daha sonra yüksek mertebeden spinlere uygulanmıştır, (Kocakoç ve Tapramaz, 2018). Buna ek olarak \hat{S}_z^2 , \hat{S}^2 spinlerine karşılık gelen karşılık dönme işlemcileri Kocakoç ve Tapramaz (2020) tarafından Hezarfen kongresinde sunulmuştur.

Bu tez çalışmasında da bu çalışmaların devamı olarak \hat{S}_+ , \hat{S}_- ve \hat{S}^2 spin işlemcilerine karşılık gelen dönme işlemcileri bulunacaktır.

2. GENEL BİLGİLER

2.1. Kuantum Bilgi Teorisi

Kuantum bilgi işlemede tanımlar, kavramlar, temel bilgi birimi olan kuantum bit, (kubit), işlemler ve işlemciler aşağıda tanımlanmıştır. Ancak bu işlemciler kavram ve işlem olarak alışılmış olan klasik mantık işlemleri ve işlemcilerinden tamamen farklıdır. Bu kesimde bu tanımların ve işlemcilerin en temelleri kısaca verilmiştir.

2.1.1. Kubit (Kuantum Bit)

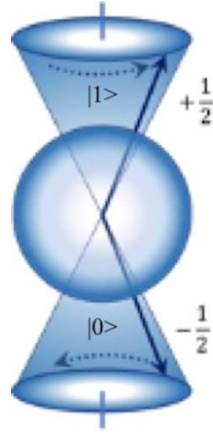
Kuantum bilgi ve hesaplamada iki durumlu sistemler kuantum bit veya kısaca kubit olarak adlandırılır ve günümüzde üzerinde çalışılan kuantum hesaplamasının ve kuantum bilgisayarların temel bilgi birimidir. Kuantum bilgide birimler ve kavramlar klasik bilgisayardan esinlenerek türetilmiştir. Klasik anlamda bilginin bir bit dizisiyle temsil edilmesine benzer biçimde kuantum hesaplama da bir kubit dizisiyle temsil edilmektedir. Fakat kuantum bilgisayarlarda mümkün olan ve klasik bilgisayarlarda karşılığı olmayan farklı durumlar söz konusudur. Bunlardan en önemlisi bilginin süperpozisyon halde iletilmesidir, (Schumacher, 1997). Yani bir kuantum bilgi işleme sistemi klasik geçitlerin aksine kubitlerden oluşan durumların hepsinde belirli oranlarda bulunabilir. Bir kubitlik bir sistemde $|0\rangle$ ve $|1\rangle$ durumları baz durumlarıdır. En basit yapı olan bu baz durumları tek tek var olmazlar; aynı anda her ikisi de belirli oranlarda vardır, (McMahon, 2008). Başka bir deyişle bir kubit, klasik bit gibi yalnızca “0” ve “1” (“yanlış”, “doğru”) mantıksal konumlarında bulunmaz, bu klasik pozisyonların üst üste gelmeleriyle (süperpozisyon) oluşan durumlarda da bulunabilir. Başka deyişle bir kubit aynı anda hem $|0\rangle$ hem $|1\rangle$ veya bu ikisinin arasındaki değerler de olabilir, (McMahon, 2008; Spiller, 2003). İki kubitlik bir kuantum sisteminde girilebilir durumlar süperpozisyon şeklinde bir durum vektörü $|\psi\rangle$ ile ifade edilir. Süperpozisyon

$$\psi = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

şeklinde gösterilir. Burada α ve β olasılık genliğidir ve genel olarak her ikisi de kompleks (karmaşık) sayılardır ve $\alpha^2 + \beta^2 = 1$ normalizasyon şartını sağlamalıdır. (Oliviera, 2007; McMahon, 2008; Nakahara ve Ohmi, 2008). Kubit sistemlerine örnek olarak spin-1/2 olan parçacıklar, ışık polarizasyonu, atomik temel durum geçişleri, iyon tuzakları ve süperiletken yapılar örnek olarak gösterilebilir.

2.1.2. Spin 1/2 Sistemler

Elektronlar için hangi yönde ölçülürse ölçülün sadece iki farklı spin durumu vardır. Elektronun spini $S = 1/2$ değeri ve alacağı $1/2$ ve $-1/2$ kuantum durumları ile kubitini temsil etmek üzere kullanılabilir. Bu spin kuantum durumları genellikle ‘spin aşağı’ ve ‘spin yukarı’ olarak adlandırılmakta ve ‘aşağı’ ve ‘yukarı’ oklarla temsil edilmektedirler. Böylece $|0\rangle$ ve $|1\rangle$ baz vektörleri, kuantumlanma doğrultusu olan z -ekseni boyunca yukarı spin $|\uparrow\rangle$ ve aşağı spin $|\downarrow\rangle$ durumlarını temsil eder. Seçilen herhangi bir eksene göre elektronlar iki spin durumundan birine sahiptir.

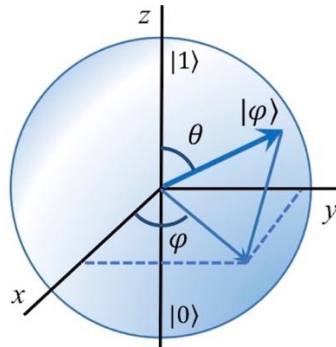


Şekil 2.1. Kuantum mekaniksel bir özellik olan spinin ‘basitleştirilmiş’ modeli

Bir tek kubitini görselleştirebilmek için, geometrik bir model olarak; birim vektörü çevreleyen bir küre alınır. Yarıçapı 1 birim olan kubitini ifadesi,

$$|\psi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle + e^{i\varphi}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|1\rangle \quad (2.2)$$

olarak gösterilir. Bu gösterim biçimi Bloch küresi olarak adlandırılır. Şekil 2.2 Üç boyutlu bir küredeki herhangi bir nokta, kubitini durumunu göstermektedir.



Şekil 2.2. Bloch küresinin temsili

İfadede ve şekilde φ ve θ açıları küresel koordinat sisteminde x - y düzleminde x eksenine ve z eksenine ile yapılan açıdır.

Bu tanımlamalar Bloch küresinin üzerinde sonsuz sayıda noktayı yani sonsuz sayıda olasılığı işaret eder. Klasik bilgi işleme tekniklerindeki sıralı işlemin aksine kuantum hesaplama teorisinin özünü uygun olarak işlemin tamamını, Bloch küresinin yüzeyinin tamamı gibi, bir seferde hesaplamayı öngörmektedir. Kuantum hesaplamada bu sonsuz ihtimaldeki bilgilerden istediğini seçerek alır.

2.1.3. Kutritler

Kutrit (kuantum-trit), 3 olasılıklı durumun kuantum mekaniksel karşılığıdır. Bir kutrit üç boyutlu Hilbert uzayında $|0\rangle$, $|1\rangle$, $|2\rangle$ gibi üç ortonormal baza sahip kuantum durumudur. Bu bazların temsilleri

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |2\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (2.3)$$

dir. Kutritin süperpozisyonu $|\psi\rangle = \alpha_0|0\rangle + \alpha_1|1\rangle + \alpha_2|2\rangle$ denkliği ile gösterilir. Bu gösterimde $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2$ kompleks sayılardır ve $|\alpha_0|^2 + |\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 = 1$ şartını sağlamalıdır (Oliviera ve diğ., 2007).

2.1.4. Çoklu Kubitler

Çoklu kubitler, $n=1, 2, 3, \dots$ olmak üzere $2n$ elemanlı sütun vektörü ya da öz durum fonksiyonu olarak gösterilir ve bir kubitlik sistemden türetilir. Türetme işlemi tensör çarpımı ile yapılır, (Oliviera ve diğ., 2007; McMahan, 2008; Jones, 2001, 2011). $|x\rangle$ ve $|y\rangle$ birer kubitlik öz durum fonksiyonları kabul edilirse mümkün dört durum için tensörel çarpım iki kubitlik sistemin öz durumlarını verecektir.

$$|0\rangle \otimes |0\rangle = |00\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.4)$$

$$|0\rangle \otimes |1\rangle = |01\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.5)$$

$$|1\rangle \otimes |0\rangle = |10\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.6)$$

$$|1\rangle \otimes |1\rangle = |11\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (2.7)$$

İşleme benzer şekilde devam edilerek üç, dört, beş vb. kubitlik sistemlerin öz durumları oluşturulabilir.

Kronecker çarpımı olarak bilinen tensörel çarpım için $m \times n$ boyutlu \mathbf{A} matrisi ile $p \times q$ boyutlu \mathbf{B} matrisi alınır, tensörel çarpım sonucu olan \mathbf{C} matrisi $(mp) \times (nq)$ boyutlu olacaktır.

$$\mathbf{C} = \mathbf{A} \otimes \mathbf{B} = \begin{bmatrix} a_{11}\mathbf{B} & a_{12}\mathbf{B} \dots & a_{1n}\mathbf{B} \\ a_{21}\mathbf{B} & a_{22}\mathbf{B} \dots & a_{2n}\mathbf{B} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{m1}\mathbf{B} & a_{m2}\mathbf{B} \dots & a_{mn}\mathbf{B} \end{bmatrix} \quad (2.8)$$

Tensörel çarpım işleminin algoritması Algoritma 1'de verilmiştir.

Algoritma 1. Tensörel çarpım algoritması. $m \times n$ boyutlu \mathbf{A} tensörü ile $p \times q$ boyutlu \mathbf{B} tensörünün çarpımı $(mp) \times (nq)$ boyutlu \mathbf{C} tensörünü verecektir. Re ve Im olarak yazılan indisler kompleks olan tensörlerin gerçel ve sanal bileşenleridir.

1. m, n, p ve q sayılarını oku (giriş matrislerinin boyutları),
2. Kompleks $\mathbf{A}_{\text{Re}}, \mathbf{A}_{\text{Im}}$ ve $\mathbf{B}_{\text{Re}}, \mathbf{B}_{\text{Im}}$ tensörlerini oku.
3. $i_3=0$ al.
4. $i_1=1, 2, 3, \dots m$ değerleri ve $i_2=1, 2, 3 \dots p$ değerleri için
 - i- $i_3=i_3+1$ al,
 - ii- $j_3=0$ al,

iii- $j_1=1, 2, 3 \dots n$ için

iv- $j_2=1, 2, 3 \dots q$ için

I. $j_3=j_3+1$ al,

II. $C_{Re}(i_3, j_3)=A_{Re}(i_1, j_1)B_{Re}(i_2, j_2)-A_{Im}(i_1, j_1)B_{Im}(i_2, j_2)$

III. $C_{Im}(i_3, j_3)=A_{Re}(i_1, j_1)B_{Im}(i_2, j_2)+A_{Im}(i_1, j_1)B_{Re}(i_2, j_2)$

işlemlerini yap.

5. $i_1=1, 2, 3 \dots (m \times p)$ ve

$j_1=1, 2, 3 \dots (n \times q)$ değerleri için

$C_{Re}(i_1, j_1)$ ve $C_{Im}(i_1, j_1)$ değerlerini yaz (Sonuç kompleks tensördür).

2.2. Kuantum Mantık Geçitleri

Klasik bilgisayarlarda bitler üzerinde mantık işlemleri yapan temel birimlere “mantık geçitleri” denir. Bu geçitler girişten bir ya da iki biti alır ve çıktı olarak bir bit üretir. Bir bilgisayarın işlemesi için gerekli tüm mantık geçitleri, birbirlerinden tamamen bağımsız devre elemanları olabileceği gibi bir ya da birkaç mantık geçidini farklı kombinasyonlarda bir araya getirerek tüm mantık geçitlerini üretmek de mümkündür, (Ocak,2018). Bilgisayar teknolojisi, hızlı bir ilerleme ile atom boyutlu bir bilgisayar tasarımı olarak düşünölmeye başlamıştır. Bu nedenle, kuantum bilgisayarlar için mantık kapıları ve algoritmalar kurmak önemlidir, (Kocakoç, Tapramaz,2018). Kuantum mantık geçitlerinin klasik geçitlerden en önemli farkı işlemlerin tersinir (reversible) olmalarıdır. İşlem için gerekli olan girdi, işlem yapıldıktan sonra tersten başlanarak tekrar elde edilebilir. Benzerlik dönüşümü bu tersinir özelliğın teorik zeminini oluşturmaktadır, (Bellac, 2006; Oliviera ve diğ., 2007; McMahan, 2008).

2.2.1. Tek Kubitlik Geçitler

Tek kubit geçitler tek bir spin üzerindeki işlemlerle ve spin alt uzayına karşılık gelen dönmelerden oluşturulabilir. Kubit sistemleri manipöle eden ve değıştiren matematiksel işlemciler ise kubit geçitler olarak tanımlanmaktadır. Tek kubitli kuantum geçitlerinin ilk özelliğının eşlenikleriyle çarpımlarının birim işlemcisini vermeleri olduđu söylenebilir, (Duran, 2017). Bu mantık geçitleri en sade şekilde Bloch küresi modeliyle görselleştirilmektedir. Bloch küresi üzerinden çoklu kubit tanımlamaları yapabilmek ise mümkün değıildir.

Kubit sistemlerde kuantum mantık geçitleri aşağıda verilmiştir.

2.2.1.1. NOT (DEĞİL) Geçiti, Pauli-X İşlemcisi

NOT (DEĞİL) geçiti en basit tek kubitlik geçittir. Tersinir (reversible) özelliğindedir. Bu geçitte, giriş $|1\rangle$ durumu ise çıkış durumu mantık $|0\rangle$, giriş durumu $|0\rangle$ ise çıkış durumu $|1\rangle$ olur.

NOT geçit işlemcisi Pauli-X işlemcisidir ve \hat{N} veya \hat{X} sembolü ile gösterilir;

$$\hat{N} = \hat{X} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.9)$$

Pauli-X matrisi (spinör) tek kubitlik durumlarda aşağıdaki dönüşümleri yapar.

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \text{ ve } \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.10)$$

Ya da $\hat{X}|0\rangle = |1\rangle$, $\hat{X}|1\rangle = |0\rangle$ veya $|0\rangle \xrightarrow{N} |1\rangle$ ve $|1\rangle \xrightarrow{N} |0\rangle$

2.2.1.2. Pauli-Y Geçiti

Pauli-Y geçiti, klasik bilgi teorisinde karşılığı olmayan bir geçittir. Sistemin dalga fonksiyonu üzerine Pauli-Y matrisinin uygulanmasıyla gerçekleştirilir. Pauli-Y geçitinin matris gösterimi,

$$\hat{Y} = i \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.11)$$

olarak verilir. Görüldüğü gibi Pauli-Y işlemcisi sanal bir işlemcidir.

2.2.1.3. Pauli-Z Geçiti

Pauli-Z geçiti, faz dönme işlemcisidir. Matris temsili,

$$\hat{Z} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (2.12)$$

olan bu geçit tek kubitlik sisteme uygulandığında,

$$|\varphi_1\rangle = \hat{Z}|\varphi_0\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} [a_0|0\rangle + a_1|1\rangle] = a_0|0\rangle - a_1|1\rangle \quad (2.13)$$

sonucunu verir. Bu işlem iki kubitin süperpozisyon durumunu değiştirir.

2.2.1.4. Bir Kubit İçin Hadamard Geçiti

Kuantum bilgi teorisinde Hadamard geçiti özel bir öneme sahiptir. Hadamard geçiti H harfi ile temsil edilir. Kuantum mantık geçitleri arasında en yaygın olan Hadamard geçiti uygulandığı kuantum bilgi sistemini süperpozisyon durumuna getirmektedir, (McMahon, 2008). Bir kubitlik sistemde Hadamard geçitinin matris temsili

$$\hat{H} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \quad (2.14)$$

dir. Hadamard işlemcisinin kubitler üzerine etkisi işe aşağıdaki gibi verilebilir:

$$\hat{H}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle) \quad (2.15)$$

Hadamard geçiti iki önemli özelliğe sahiptir. İlk olarak $|0\rangle$ saf durumunu kombinasyon durumuna, yani $|0\rangle$ ve $|1\rangle$ durumlarının katsayılarının özdeş olduğu duruma çevirir; ikinci olarak zıttı (self inverse) bir işlemci olmasıdır ki, bu da Hadamard işlemcisi art arda iki kez uygulandığında hiçbir şey yapılmamış duruma döndürür. Son olarak, Hadamard işlemcisi Pauli geçitleri türünden ifade edilebilir. Örneğin Pauli-X ve Pauli-Z geçitleri türünden bir Hadamard geçiti şu şekilde ifade edilir,

$$\hat{H} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} + \hat{Z}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \right\} \quad (2.16)$$

2.2.1.5. Arttıran ve Eksilten İşlemciler (Merdiven İşlemcileri)

Spin işlemcilerinin x, y ve z bileşenlerinden sadece z bileşeni doğrudan kullanılır fakat x ve y bileşenlerini doğrudan kullanmak yerine buna eşdeğer olan arttıran ve eksilten işlemcilerini kullanmak daha kolay yorumlanan sonuç üretir. Bu iki bileşeni, özdeğerleri iyi bilinen arttıran (\hat{S}_+) ve eksilten (\hat{S}_-) spin işlemcilerini tanımlamak için

$$\hat{S}_+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y \quad \text{ve} \quad \hat{S}_- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y \quad (2.17)$$

ifadelerini yazılır. Bu iki ifade bir kere toplanır ve bir kere de çıkarılırsa \hat{S}_x ve \hat{S}_y işlemcileri arttıran ve eksiltten spin işlemcileri cinsinden yazılır,

$$\hat{S}_x = \frac{1}{2}(\hat{S}_+ + \hat{S}_-) \text{ ve } \hat{S}_y = \frac{1}{2i}(\hat{S}_+ - \hat{S}_-) \quad (2.18)$$

Arttıran ve eksiltten spin işlemcilerinin $|S, M_S\rangle$ üzerindeki etkisi

$$\hat{S}_+ |S, M_S\rangle = \sqrt{S(S+1) - M_S(M_S \pm 1)} |S, M_S \pm 1\rangle \quad (2.19)$$

olarak bilinen ve gerçel bir özdeğer verirken spinin kuantum durumunu bir kuantum arttırır veya azaltır. \hat{S}_x ve \hat{S}_y işlemcileriyle ilgileri nedeniyle bu tez çalışmasında \hat{S}_+ ve \hat{S}_- işlemcilerine karşılık gelen $\hat{R}_+(\theta)$ ve $\hat{R}_-(\theta)$ dönme işlemcileri de oluşturulacaktır. Ayrıca bütün spinler için \hat{S}_x ve \hat{S}_y işlemcilerinin matris temsilleri doğrudan oluşturulamaz, bunun yerine Bölüm 4'te gösterildiği gibi bütün spinlerin \hat{S}_+ ve \hat{S}_- işlemcileri kolayca oluşturulup daha sonra Denklem 2.18'de verilen ifadelerle \hat{S}_x ve \hat{S}_y işlemcileri bulunur.

2.2.2. İki Kubitlik Kuantum Mantık Geçitleri

İki kubitlik kuantum mantık geçitleri, iki kubitli kuantum durumlarına etki eden ve değiştiren geçitler olarak tanımlanabilir. Bir kısmı iki tek kubitlik sistemin genişletilmesiyle elde edilirken bir kısmı da ancak iki kubitlik sistemlerde geçerli olan mantık geçitleridir. İki kubitlik geçitlerin önemlileri: CNOT, SWAP, Toffoli veya CCNOT ve Fredkin veya CSWAP geçitleridir.

2.2.2.1. CNOT (Kontrol-NOT) Geçiti

Bir işlemcide herhangi bir kubitin durumu başka bir kubitin durumuna bağlı ise, bu işlemcilere kontrollü işlemciler denmektedir. CNOT geçiti bu tür işlemcilerden en fazla bilinen, temelde iki kubitlik bir işlemcidir, bu kubitlerden birine kontrol kubit, diğerine ise hedef kubit denilmektedir.

CNOT işlemcisinde kontrol kubitin durumu $|1\rangle$ ise hedef kubitin durumunu tersine çevirirken, kontrol kubitin durumu $|0\rangle$ ise hedef kubitin durumunu değişmez bırakır. İki kubitlik bir $|ab\rangle$ kuantum sistemi dikkate alındığında, burada a kontrol kubit, b ise hedef kubit olarak alınırsa CNOT geçidinin etkisi

$$\text{CNOT}_a|ab\rangle = |a a \oplus b\rangle \quad (2.20)$$

şeklinde olur. İfadede \oplus sembolü dışlayan veya geçidinin kuantum hesaplamadaki karşılığı olan 2 tabanına göre “a mod b” yani toplama işlemidir. İşlemden önce kontrol ve hedef kubitlerin durumları a, b ve işlemden sonra a' ve b' olmak üzere bu durum bir doğruluk tablosuyla gösterilebilir.

Tablo 2.1. CNOT geçitinin doğruluk tablosu

a	b	a'	b'
0	0	0	0
0	1	0	1
1	0	1	1
1	1	1	0

Denklem 2.20’de \oplus işlemi mod 2’ye göre toplama (XOR) işlemidir. Tablo 2.1 dikkate alınarak CNOT geçitinin matris işlemcisi oluşturulabilir.

$$\text{CNOT} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.21)$$

Matris temsili dikkate alındığında $|a b\rangle$ durumu için eğer kontrol kubit a seçilirse operatör CNOT_a , kontrol kubit b seçilirse operatör CNOT_b olacaktır,

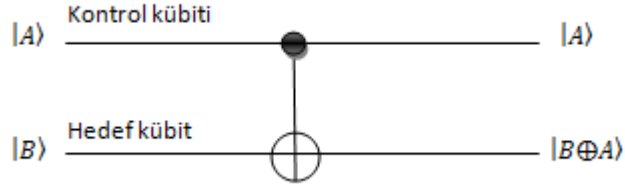
$$\text{CNOT}_a = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \text{ ve } \text{CNOT}_b = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.22)$$

Örnek olarak CNOT_a geçiti $|11\rangle$ durumuna uygulandığında,

$$\text{CNOT}_a|11\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = |10\rangle \quad (2.23)$$

sonucunu verir.

CNOT işlemcisi Şekil 2.3.’teki gibi sembolleştirilir.



Şekil 2.3. CNOT geçitinin bir devredeki gösterimi (\oplus işlemi mod 2'ye göre toplama işlemidir.)

2.2.2.2. SWAP Geçiti

Diğer bir kuantum mantık geçiti SWAP geçitidir. SWAP geçitinin en önemli özelliği uygulandığı kuantum bilgi sisteminde kubitlerin yerlerini değiştirmesidir. SWAP geçiti $|a b\rangle$ iki kubitlik bir kuantum durumuna uygulandığında a kubitini ile b kubitinin yerleri değişir,

$$\text{SWAP}|a b\rangle = |b a\rangle \quad (2.24)$$

sonucu elde edilir. SWAP işlemcisi için doğruluk tablosu Tablo 2.2.'de verilmiştir.

Tablo 2.2. SWAP işlemcisinin doğruluk tablosu

a	b	a'	b'
0	0	0	0
0	1	1	0
1	0	0	1
1	1	1	1

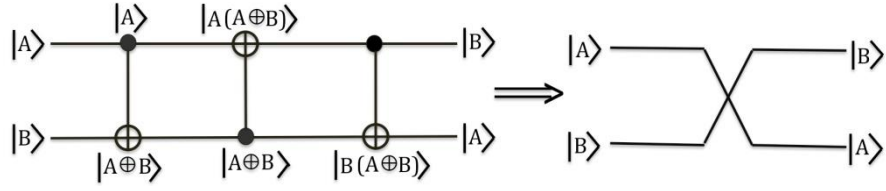
Şekil 2.4.'te sembolü verilen SWAP geçiti CNOT kapıları art arda kullanılarak oluşturulur.

$$\text{SWAP} = \text{CNOT}_a \text{CNOT}_b \text{CNOT}_a \quad (2.25)$$

Bu işlemin matris temsili

$$\text{SWAP} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.26)$$

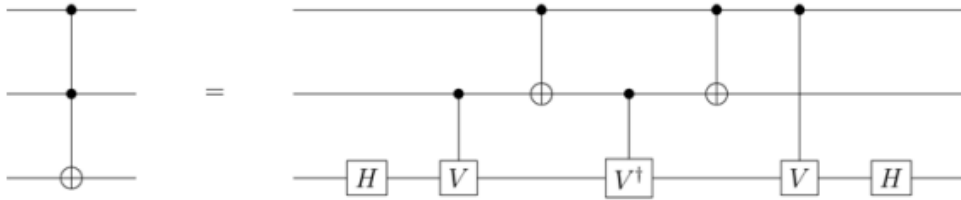
şeklindedir.



Şekil 2.4. SWAP mantık geçitinin üç CNOT geçitiyle oluşumu ve spin değiş tokuşu devre gösterimi

2.2.2.3. Toffoli (CCNOT) Geçiti

Tersinir kapılar kullanılarak rastgele bir işlevi hesaplamak için başka bir geçit gerekir. Bunlardan birisi de Tommaso Toffoli tarafından 1980 yılında önerilen geçittir. 3-kubit girişine sahip geçitlere pek çok örnek verilebilir. İlk akla gelen ve en önemli örneği Toffoli (CCNOT) geçitinin Şekil 2.5.'te sembolü verilen işlem şeması ile ifadesi mümkündür, (Kızılırmak, 2020).



Şekil 2.5. Toffoli (CCNOT) geçiti ve eşdeğer devresi

Toffoli geçiti, üç kubitlik bir geçittir. İlk iki kubit kontrol kubitleri ve üçüncü kubit hedef kubitidir. Toffoli geçitinin doğruluk tablosu Tablo 2.3.'te gösterilmiştir.

Tablo 2.3. Toffoli (CCNOT) geçitinin doğruluk tablosu

Giriş			Çıkış		
a	b	c	a'	b'	c'
0	0	0	0	0	0
0	0	1	0	0	1
0	1	0	0	1	0
0	1	1	0	1	1
1	0	0	1	0	0
1	0	1	1	0	1
1	1	0	1	1	1
1	1	1	1	1	0

Tabloda verilen sonucu oluşturan Toffoli geçitinin matris ifadesi aşağıdaki biçimdedir:

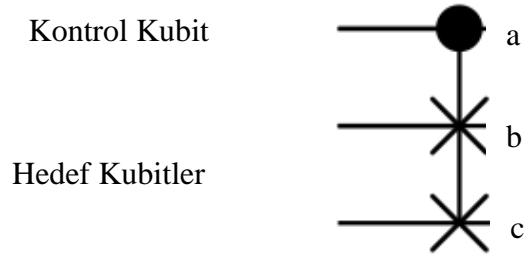
$$\text{Toffoli} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.27)$$

2.2.2.4. Fredkin (CSWAP) Geçiti

Edward Fredkin tarafından oluşturulan ve CSWAP veya Fredkin ismiyle bilinen geçit üç-bitlik bir geçit olup ilk bit 1 ise son iki bit yer değiştirir. Tablo 2.4.'te bu geçite ait doğruluk tablosu ve Şekil 2.6.'da devre gösterimi verilmiştir.

Tablo 2.4. Fredkin (CSWAP) geçidinin üç kubit için doğruluk tablosu

Giriş			Çıkış		
a	b	c	a'	b'	c'
0	0	0	0	0	0
0	0	1	0	0	1
0	1	0	0	1	0
0	1	1	0	1	1
1	0	0	1	0	0
1	0	1	1	1	0
1	1	0	1	0	1
1	1	1	1	1	1



Fredkin geçidinin matris ifadesi aşağıdaki biçimdedir:

$$\text{Fredkin} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.28)$$

2.3. Kuantum Hesaplama Sistemleri

Kuantum hesaplamının yapılabileceği muhtemel donanım veya sistemler başta manyetik puls spektroskopi teknikleri, ışık polarizasyonu, fotonik gibi farklı sistemlerdir. Önce değerlendirilen ve değerlendirilme potansiyeli olan fiziksel sistemler özetlendikten sonra tezin konusu bakımından bu çalışmada puls manyetik rezonans teknikleri ve buna esas olan spin sistemlerinin manipülasyonu ele alınacaktır.

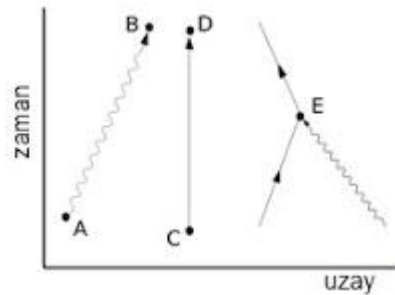
2.3.1. Kuantum Elektrodinamiği (KED)

Kuantum elektrodinamiği (KED), Richard Feynman tarafından ortaya atılan ve atomaltı yüklü parçacıkların arasındaki elektromanyetik etkileşmeyi inceleyen relativistik kuantum mekaniğini kullanan bir teoridir.

Kuantum elektrodinamiği temel olarak iki ilkeye dayanır:

1. Bir elektron bir yerden ve zamandan diğer yere ve zamana gidebilir.
2. Bir elektron belirli bir yerde ve zamanda bir fotonu yayınlar veya soğurur.

Bu olaylar şekilde verilen Feynman diyagramlarının üç elementiyle temsil edilmiştir. Bu elementler, (1) foton için dalgalı bir çizgi (A – B), (2) elektron için düz bir çizgi (C – D) ve (3) bir fotonun elektron tarafından yayınlanması veya soğurulmasını temsil eden ikidüz çizginin birleşme noktası ve bir dalgalı bir çizgi kombinasyonu (E).

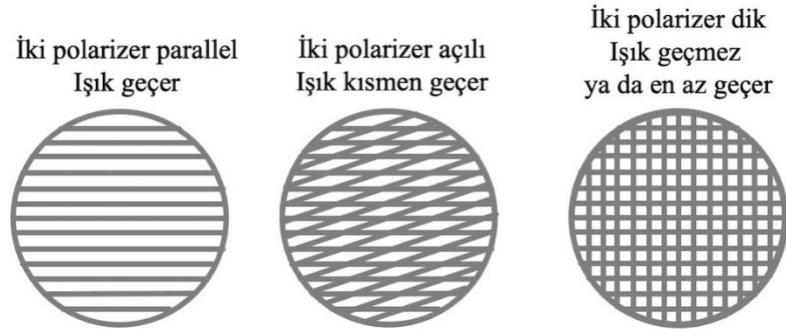


Şekil 2.7. Feynman diyagramı elementleri

2.3.2 Işık Polarizasyonu

Işığın bir polarizör çifti ile polarizasyonu kubit duruma dayalı kuantum hesaplama için uygun olaylardan birisidir. Bir elektromanyetik dalga olan ışık birbirine dik alternatif elektrik ve manyetik alan bileşiklerinden oluşmuştur ve bu bileşenler yayılma yönüne diktir. Eğer bir polarizör (kutuplayıcı) kullanılırsa bir ışığın sadece polarizör yönünde kutuplu olması sağlanabilir. Bu özelliğten yararlanılarak ışık istenilen doğrultuda kutuplandırılabilir.

Örneğin yayılma doğrultusuzolan ışık demeti bir polarizörle x ve y doğrultularında kutuplandırılabilir, bu iki kutuplu durum bir kubit oluşturacaktır. İkinci bir polarizör kullanılarak ışık tam geçirilebilir ya da tam engellenebilir, ayrıca bu ikisinin sonsuz ara durumu da vardır, (Şekil 2.8). Dolayısıyla kutuplandırılabilen ışık kuantum bilgi işlemede güçlü bir fiziksel sistemdir.



Şekil 2.8. Işık polarizasyonu

2.3.3. Süperiletkenlik

Süperiletkenler elektriği sıfır direnç göstererek iletken maddelerdir. Bir süperiletken bir akım ilmeğinden akım başlatıldıktan sonra dış müdahale olmaksızın akım kesintisiz sürer. Bu durumda bir süperiletken manyetik dipol momentinin oluşturulmuştur ve bunun yönü isteğe bağlı iki durumda yapılabilir, yani bir kubitlik sistem yapılmıştır ve kararlıdır. Kuantum bilgi işlemede bu dipollerin nanometrik boyutlarda olması beklenmektedir ve bu yönde çalışmalar yapılmaktadır.

Günümüzde süperiletkenlik 4 K sıcaklıkta oluşmaktadır. Yüksek sıcaklıkta T_c süperiletkenler bulunduğu takdirde bu uygulamanın mümkün olması beklenmektedir, (Nielsen ve Chuang, 2010).

2.3.4. Kuantum Nokta Kusurları

Kuantum nokta kusurları ya da kuantum noktalar (quantum dots), elektronların, deşiklerin veya iyonların sınırlı bir bölgede (kuantum mekaniğinde potansiyel kuyusu), tutulduğu yapılardır. Bu yapıların boyutları nanometre mertebesindedir elektriksel ve optiksel özellikleri kuantum hesaplama için uygun davranış sergilerler, (Üstün, 2011). Bu noktalarda tutulan elektronlar, deşikler veya diğer iyonlar bir kübitten başlayıp daha büyük kübitleri oluşturabilecek yapı olarak alınabilir, dolayısıyla kuantum hesaplamanın uygulanmasında bir alternatif olma potansiyeline sahiptir, (Nielsen ve Chuang, 2010).

2.3.5. Spintronik

Spintronik, spin–elektronu kelimesinden türetilen isimdir. Spintronik, elektronik aygıtlardaki bilgiyi elektronun spinini kullanarak taşıyan sistemdir. Diğer ismi magneto-elektroniktir. Spintronik nano- veya mikro-elektronikte gelişmelere yol açmıştır. Spintronik daha hızlı çalışan, kısa başlama zamanı olan, küçük hacimlerde daha büyük veri kapasitesi olan bilgi depolama aygıtlarıdır, (Nielsen ve Chuang, 2010). Spintronik elektron spinini değerlendirdiğinden, kuantum hesaplamanın yapılabileceği minimum güç harcayan ve olabildiğince hızlı çalışan bir fiziksel yapı olma potansiyeline sahiptir.

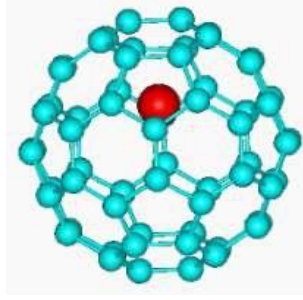
2.3.6. Moleküler Mıknatıslar

Moleküler mıknatıslar aslında metal kompleksleridir ve tek bir molekülden oluşan mıknatıslardır. Bu kompleksler bir kritik sıcaklığın altında mıknatıslanırlar ya da mıknatıslıkları kaybolur. Yani mıknatıslanması kontrol edilebilen iki durumlu yapılardır, bu özelliği nedeniyle kubit sistem oluştururlar.

Moleküler mıknatıslarda merkez metal çoğunlukla Mn^{2+} veya Fe^{3+} elementleridir. Ligantlar farklı organik gruplar olabilir. Manyetik dipol momentlerinin olması nedeniyle moleküler mıknatıslar manyetik rezonans spektroskopileri (NMR veya EPR) ile davranışları kontrol edilebilir. Bu yapılar da kuantum hesaplama için değerlendirilebilecek fiziksel yapı olmaya adaydırlar, (Ruiz–Molina ve diğ., 2000).

2.3.7. Endohedral Fullerenler

Fulleren olarak bilinen özel moleküller tamamen karbon atomlarının oluşturduğu örgü olan kapalı bir tür moleküldür. Bu örgüler küre, silindir veya elipsoit yapıda olmaktadır. Fullerenlerin en küçük üyesi C₂₀, en bilinen üyesi de C₆₀ ve C₇₀ molekülleridir. Silindir biçiminde olanlar karbon nanotüp olarak bilinmektedir. Örgüdeki karbon sayısı nanotüplerin büyüklüklerine ve örgü biçimine bağlı olarak çok fazladır. Nanometre boyutunda olan fullerene örneği Şekil 2.9.'da verilmiştir.



Şekil 2.9. Bir endohedral fullerenin yapısı

Fullerenler kapalı kafes yapıları nedeniyle benzersiz bir iç uzaya sahiptir. İç uzayın boyutu fullerenin içine bazı atomların, küçük moleküllerin ya da grupların konulmasına yetecek kadar olabilir. İçine bir atom veya atom grubu hapsedilen bu kafes yapılar endohedral fullerene olarak adlandırılmaktadır ve $M@C_{60}$ sembolüyle temsil edilirler. M burada metal veya ametal olabilir. Kararlı yapıda olmaları, içine atomların veya molekül gruplarının konulabilmesi gibi nedenlere bağlı olarak fullerenler spin tabanlı kuantum hesaplama için uygun yapılardan olma özelliğine sahiptir, (Yadav ve Kumar, 2008).

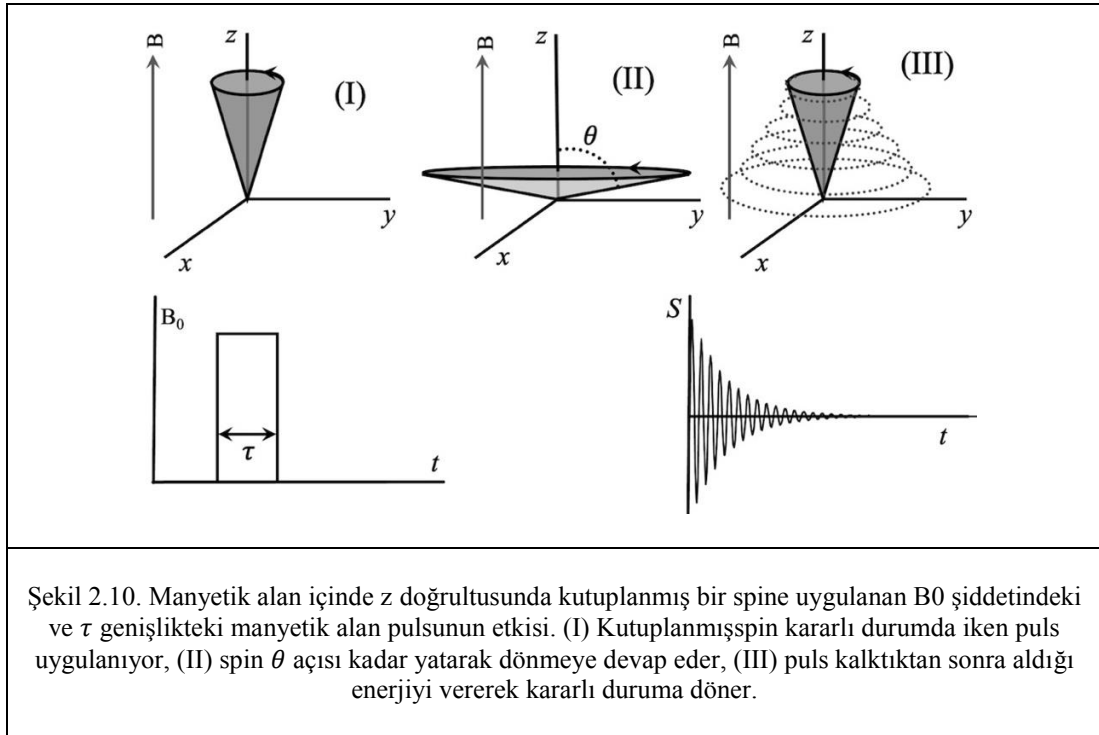
2.3.8. Spin Tabanlı Kuantum Hesaplama Sistemleri

Spin tabanlı kuantum hesaplama sistemleri, çekirdek ya da elektron spinlerini konu alan ve spin durumlarına göre yapı incelemesi yapan spektroskopi dallarıdır. Bunlar esas olarak Nükleer Manyetik Rezonans (NMR), Elektron Paramanyetik Rezonans (EPR) ve bu ikisinin birlikte kullanıldığı Elektron Nükleer Double Rezonans (ENDOR) spektroskopileridir. Bu sistemlerden özellikle NMR halihazırda kuantum hesaplama çalışmalarında kullanılmaktadır. Diğerlerinin de henüz kullanılmaları bile, kuantum hesaplamada uygulanma potansiyelleri vardır.

Özellikle hem kubit, hem de kutrit ve daha yüksek mertebeli durumlar için bu spin sistemleri oldukça uygun görünmektedir.

2.3.8.1. Spin Tabanlı Kuantum Hesaplama Sistemi 1: NMR Spektroskopisi

Nükleer manyetik rezonans spektroskopisi (NMR), molekül yapısı ile birlikte moleküllerin fiziksel özellikleri, bağ uzunlukları ve yapıları ile bağ açılarının değerleri, molekül içi dinamikler ve dengeler, delokalizasyon ve kinetik veriler hakkında önemli bilgiler veren oldukça önemli bir spektroskopik yöntemdir, (Balcı, 2000). NMR spektroskopisi moleküllerin yapısal olarak belirlenmesinde, spin tabanlı kuantum hesaplamaya esas olan spin-spin ve çekirdek kuadrupol moment etkileşimleri yaygın olarak kullanılan etkileşimlerdir, (Oliviera ve diğ., 2007; Nakahara ve Ohmi, 2008). Ayrıca pulslu-Fourier dönüşüm tekniğinin bu spektroskopide özellikle 1970'lerden sonra yaygın kullanımı ile hassasiyeti ve uygulama alanları da genişlemiştir. Bu teknikte edinilen birikim ve tecrübe kuantum hesaplamaya uygulanabilecek birçok bilgi ve ayrıntı içermektedir.



Şekil 2.10 manyetik alan içinde kutuplanmış ve kararlı bir çekirdek veya elektron spininin manyetik alana dik yönde uygulanan şiddetli bir manyetik pulsu uygulandıktan sonraki durumun göstermektedir. Uygulanan puls genişliği ve sistemin çalışma frekansı ile tanımlanan bir açı kadar kararlı yöneliminden döndürülen spin, pulstan aldığı enerjisi sonra karakteristik frekansta vererek yine kararlı hale döner. Uygulamalarda tek bir puls yerine farklı genişliklerde ve farklı aralıklarla bir takım puls dizileri ile, farklı spin sistemlerini içeren maddenin yapısal özellikleri çözülür. Bu

teknik puls ve Fourier dönüşüm NMR spektroskopisinde uzun yıllardan bu yana gelişerek kullanılmaktadır, ayrıca en iyi gözleendiği uygulamalardan yaygın olanı da tıbbi teşhis cihazı olan manyetik rezonans görüntüleme (MRI) cihazı uygulamalarıdır.

İlk olarak 1945 yılında gözlenen Nükleer Magnetik Rezonans, (NMR), özellikle 1970'li yıllardan sonra çok büyük bir gelişme gösterdi. Bunun nedeni bilgisayar teknolojisindeki gelişmeler ve süperiletken magnetlerin yapımının yanı sıra sürekli dalga tekniklerinden puls tekniklerine geçiştir, (Tabak, 2009). Konvensiyonel NMR spektroskopisi, sabit manyetik alanda frekans tarama yapmaktadır ve bu teknikte integral alma, dekuplaj gibi işlemler yapılsa da bu işlemler fazla değildir.

NMR spektroskopisinde kullanılan MHz mertebesindeki radyo frekansı ve numuneye uygulanan puls sonrası tepki sinyali, FID (serbest sönüm sinyali; free induction signal) süresi mikro saniyelerden dakikalara kadar değişebilmektedir. Bu durum puls ve FT teknolojisinin NMR spektroskopisinde hızla gelişmesine yol açmıştır. Tıbbi teşhis cihazı olarak kullanılan Manyetik Rezonans Imaging (MRI) bu teknolojinin bir başka uygulamasıdır.

Pulsu Fourier transform NMR (FT-NMR) spektroskopisinin geliştirilmesiyle 1970'den sonra NMR ölçümlerinin hassasiyetleri ve fonksiyonları büyük oranda artmıştır. Özellikle puls programlama ile spin manipülasyonu işlemleri spektroskopi amaç yanında spin tabanlı kuantum hesaplama da uygulamanın önünü açmıştır.

2.3.8.2. Spin Tabanlı Kuantum Hesaplama Sistemi 2: EPR Spektroskopisi

Elektron Paramanyetik Rezonans (EPR) spektroskopisi aynı zamanda Elektron Spin Rezonans (ESR) spektroskopisi olarak da adlandırılır. ESR bir atom, atom grubu veya molekülde eşlenmemiş elektron spininin çevre spinlerle etkileşmesini esas alır. Çevre spinleri demek, eşlenmemiş elektronun yakınındaki çekirdek spinleri ile varsa yakındaki başka bir eşlenmemiş elektronun spinidir. Spektroskopi esas olarak paramanyetik merkezleri inceler. Paramanyetik merkezler kimyasal radikaller, ki bunlar eşlenmemiş elektron içeren atom, grup veya moleküllerdir, nokta kusurlarında tuzaklanan elektron veya iyonlar, paramanyetik safsızlıklar ve benzeri oluşumlardır. Kapsayıcı olması nedeniyle ESR (Elektron Spin Rezonans) yerine EPR (Elektron Paramanyetik Rezonans) kısaltması daha uygun düşmektedir ve yaygın kullanılmaktadır. EPR spektroskopisinde eşlenmemiş elektronla etkileşen bütün

çekirdekler ilave donanıma gerek olmadan tek bir cihazla incelenebilir. Bu özellik EPR spektroskopisinin öne çıkan özelliğidir.

Bir düzgün manyetik alan içine konulan paramanyetik merkezdeki eşlenmemiş elektronunspini manyetik alan içinde ya alana paralel ya da antiparalel olarak yönelir. Bu iki yönelim, elektron ve alan arasındaki etkileşme şiddetine bağlı olan bir ΔE enerjisi ile ayrılır. Bu enerji farkı (ΔE), elektronların düşük enerji seviyesinden, yüksek enerji seviyesine geçmesine sebep olan ν frekanslı mikrodalğanın enerjisidir. Bir B manyetik alanı içinde kutuplanan elektron spinine mikrodalğanın $h\nu$ enerjisi uygulanırsa, g değerine sahip elektronun spektroskopik yarıma değeri ve elektron Bohr magnetonu β ile tanımlanan enerjiye eşit olduğunda elektron spini durum değiştirir.

$$h\nu = g\beta B. \quad (2.29)$$

Bu ifade EPR'nin gerekli ve yeterli rezonans şartıdır.

NMR'da oldukça fazla sayıda uygulanmakta olan puls dizisi vardır. Örneğin '150 and More Basic NMR Experiments' kitabında 150'den fazla puls dizisi tanıtılmaktadır, (Braun, 1998). EPR'de, biraz geriden de olsa NMR'daki puls dizilerine benzer puls tekniklerine sahiptir. Bu konudaki gelişmeler hala devam etmektedir. Yaklaşık 40 yıl önce küçük moleküllerin yapılarının tayininde sürekli dalga EPR ve NMR kullanılmakta iken, daha sonra ortaya çıkan pulslu-NMR ve pulslu-EPR spektroskopik yöntemleriyle çok daha büyük moleküllerin yapıları hakkında incelenmeye başlanmıştır.

Pulslu-EPR deneyleri 1960 yılında Bill Mims tarafından yapılmaya başlanmıştır, (Schweiger ve Jeschke, 2001). Puls EPR tekniğinde, süperiletken mıknatıslarla oluşturulan kararlı ve durgun B_0 manyetik alanına B_1 şiddetinde manyetik alan pulsu eklenmiş, bu uygulanan pulslarla manyetizasyon altüst edilmiş ve dengeye dönüşlerini veren FID sinyalinin Fourier dönüşümü alınarak yapı çözümlenir. Gerçekte tek bir puls yerine programlı puls dizileri ile spinler manipüle edilerek birçok bilgi edinilir.

Söz edilen pulslu spektroskopi teknikleri aynı zamanda spin-tabanlı kuantum hesaplama işlemlerinin yapılabilişliğini ortaya koymasından önemlidir.

2.3.8.3. Spin Tabanlı Kuantum Hesaplama Sistemi 3: ENDOR Spektroskopisi

Elektron nkleer double rezonans (ENDOR) spektroskopisi, 1950'li yıllarda EPR ile NMR spektroskopilerini birlikte kullanan bir manyetik rezonans tekniğidir, (Feher, 1956). ENDOR'un başlangıçta katıhal fiziğinde uygulanmıştır. Daha sonra ENDOR, daha fazla biyoinorganik sistemlere de uygulanmıştır. Bu spektroskopi tekniğinde önce paramanyetik bir numunenin EPR spektroskopisi alınır. Herhangi bir EPR geiş çizgisinde eşlenmemiş elektronun etkileştiği çekirdekleri gözlemek ve belirlemek için EPR o çizginin üzerinde sabit tutularak NMR spektroskopi tekniği aynı cihazda uygulanır. Bu işlem Elektron Nkleer Çift Rezonans (Electron Nuclear Double Resonance, ENDOR) olarak bilinir. ENDOR geişleri sürekli dalga spektroskopisi ile yapılabildiği gibi pulslu spektroskopi ile de yapılabilir, (Mims, 1965; Davies, 1974; Sato ve diğ., 2007; Nakahara ve diğ., 2007).

3. MATERYAL VE METOT

3.1. Spin İşlecileri ve Spinlerin Matris Temsilleri

Spin işlemcilerinin matris temsilleri temel özelliklerinden yararlanılarak oluşturulabilen matrislerdir. Kaynaklarda hazır olarak verilen spin işlemcilerinin bazıları, ki en fazla bilineni spin-1/2 için Pauli spin matrisleridir. Bunun dışındaki spin işlemcilerinin x , y ve z koordinat temsilleribelirli bir algoritma ile kolaylıkla oluşturulabilir. uygulamalarda kolaylık için oluşturulmasını bir örnek üzerinde göstermek yararlı olacaktır.

Spin 1/2 sistem için Bölüm 2’de matrisler verilmiştir. Burada örnek olarak spin 1 ya da kutrit sistem, spin 3/2, spin 2 ve spin 5/2 için spin matrisleri Algoritma 4.1’den yararlanılarak oluşturulacaktır, Bölüm 4’te ayrıca algoritma ile birlikte örnek de verilmiştir.

Çalışmada önce spin işlemcileri ele alınarak, literatürde verilen spin-1/2 dönme işlemcisi yanında spin-1 ile spin-5/2 arası kuantum spin dönme işlemcilerinin sembolik ifadeleri sayısal hesaplama yöntemi ile türetilmiştir. Her ne kadar pulslu NMR spektroskopisinin kuantum bilgi teorisindeki uygulamaları spin-1/2 için, yani kubit esaslı sistemler için yapılyorsa da, işlemin tartışmasının ve uygulamalarının farklı spin sistemlerine yaygınlaşması, diğer spin sistemlerinin dönme işlemcilerinin sembolik ifadelerini gerekli hale getirecektir. Bu işlemciler gerektiğinde Bulgular ve Tartışmalar bölümünde ele alındığı üzere seri açılımı yöntemiyle sayısal olarak türetilmektedir, fakat bu yöntem ilave bir işlem yüküdür. Dönme işlemcilerinin sembolik olması doğal olarak kolaylık sağlamaktadır.

Spin vektörleri gerçekte birer işlemcidir. Kartezyen koordinat sisteminde bileşenleri cinsinden yazılabilir;

$$\hat{\mathbf{S}} = \begin{bmatrix} \hat{S}_x \\ \hat{S}_y \\ \hat{S}_z \end{bmatrix} \quad (3.1)$$

Klasik karşılığı olmayan spin operatörlerinin ilgili dalga fonkiyonuna farklı biçimlerde etkir ve özdeğerleri verir. Spin dalga fonksiyonu $|S, M_S\rangle$ olsun, özdeğerler şunlar olacaktır;

$$\hat{\mathbf{S}}^2 |S, M_S\rangle = S(S+1) |S, M_S\rangle$$

$$\hat{S}_z |S, M_S\rangle = M_S |S, M_S\rangle$$

$$\hat{S}_+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y, \quad \hat{S}_- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y$$

(3.2)

$$S_{\pm} |S, M_S\rangle = \sqrt{S(S+1) - M_S(M_S \pm 1)} |S, M_S \pm 1\rangle$$

\hat{S}_x ve \hat{S}_y işlemcilerini doğrudan kullanmak yerine yükseltme ve alçaltma işlemcilerini kullanmak daha anlaşılır, daha uygulanabilir özelliktedir. Bu nedenle yükseltme ve alçaltma (merdiven) işlemcilerini tanımlamak ve buradan matris temsillerini oluşturmak gereklidir. Bu işlemler Bölüm 4'te Algoritma 4.1 ve izleyen örnek işlemlerde yapılmıştır.

Spin matrisinin ve dolayısıyla spin öz durumlarının boyutunu spin değeri belirler. Herhangi bir S spini için öz durumlar $M_S = S, S-1, S-2 \dots -S+1, -S$ ve dolayısıyla boyut $N = 2S+1$ olacaktır. Buna karşılık spin öz durumları da her birisi N elemandan oluşan $|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle \dots |N\rangle$ ket vektörleri olacaktır,

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |2\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \dots |N\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \quad (3.3)$$

Spin işlemcileri ve öz durumları için yapılan tanımları verecek biçimde bir algoritma oluşturulabilir (Algoritma 3.1). Bazı spin işlemcileri (matris temsilleri) Bulgular ve Tartışmalar Bölümünde verilmiştir.

Benzer biçimde, dönme işlemcileri de spinler üzerine etkiyerek onların, örneğin manyetik alan içinde kutuplandıktan farklı yönelimlerde yönlerecektir.

3.2. Üstel İşlemciler: Dönme İşlemcisi ve Yoğunluk Matrisi İşlemleri

Gerek kuantum mekanikte spin dönme işlemcisi ve gerekse yoğunluk matrisinde esas olan üstel işlemciler aritmetik kullanıma uygun değildir. Bu işlemcilerle aritmetik işlemleri yapabilmek için işlem yapmaya uygun hale getirmek, diğer ifadeyle bu işlemcilerin seri açılımlarının yapılarak doğrusal hale getirilmesi gerekir.

Denklem 3.1 ile tanımlanan spin dönme işlemcisi, $\hat{R}_x, \hat{R}_y, \hat{R}_z$, hatta spin arttırma ve azaltma işlemcilerinin oluşturabileceği \hat{R}_+ ve \hat{R}_- işlemcileri aşağıda açıklandığı biçimde oluşturulur.

Zamana baęlı Schrödinger denklemi alınır.

$$i\hbar \frac{d\psi}{dt} = \hat{\mathcal{H}}\psi \quad (3.4)$$

İfadede \mathcal{H} spin sistemini tanımlayan Hamiltoniandır. Örneęin eşlenmemiş bir elektron içeren spin sistemi için B_1 şiddetindeki puls ile Hamiltonian

$$\hat{\mathcal{H}} = g\beta B_1 \hat{\mathbf{S}} + \text{dięer etkileşmeler} \quad (3.5)$$

olacaktır. Bu aşamada sadelik için dięer etkileşmeleri daha sonra ayrıntılandırmak üzere bir yana bırakarak Zeeman etkileşmesi dikkate alınabilir. Zamana baęlı Schrödinger denklemi çözülrse ki birinci merteye diferansiyel denklemdir,

$$\psi = Ae^{-i\hat{\mathcal{H}}t/\hbar} \quad (3.6)$$

ifadesi bulunur. İfadede A genliktir ve başlangıç şartına baęlıdır. Üstel ifadede rezonans şartını, ($h\nu = g\beta B_0$), ve $\hbar = h/2\pi$ tanımı kullanılırsa

$$\frac{\hat{\mathcal{H}}}{\hbar} = \frac{2\pi h\nu \hat{\mathbf{S}}}{h} = \omega \quad \text{ve } e^{-i\hat{\mathcal{H}}t/\hbar} = e^{-i\omega t \hat{\mathbf{S}}} \quad (3.7)$$

olacaktır. Pulslu manyetik rezonans spektroskopilerinde puls süresi sınırlı olduęundan $\omega t = \theta$ açısı olarak tanımlanır. Bu açı pulsun süresi ile tanımlanır ve manyetik alan içinde kutuplanan spinin kararlı z doęrultusundan ne kadar döndürüleceęini belirler. Bu sonuçla üstel ifade yeniden

$$\psi = Ae^{-i\theta \hat{\mathbf{S}}} \quad (3.8)$$

yazılabilir. Üstel ifadede bulunan spin bir işlemci olduęundan, bu ifade üstel işlemci olarak tanımlanır ve dönme işlemcisi (rotation operator) olarak tanımlanır.

$$\hat{R}(\theta) = e^{-i\theta \hat{\mathbf{S}}} \quad (3.9)$$

Spin vektör olduęundan üstel ifade de vektör bileşenleri olarak tanımlanmalıdır. Ayrıca üstel işlemci doęrudan uygulanamayacaęından doğrusallaştırmak gerekir. Kompleks fonksiyon tanımı ile ve α indisi $x, y, z, +$ ve $-$ yerine kullanılarak dönme işlemcisi,

$$\hat{R}(\theta) = e^{i\theta\hat{S}_\alpha} = \cos(\theta\hat{S}_\alpha) + i \sin(\theta\hat{S}_\alpha) \quad (3.10)$$

olacaktır. Üstel işlemci bu haliyle de herhangi bir fonksiyona uygulanamaz. Uygulanabilirlik için trigonometrik fonksiyonların argümanları skaler θ ve matris \hat{S}_α ile işlem yapabilmek için seri açılımı yapılmalıdır,

$$\begin{aligned} \cos(\theta\hat{S}_\alpha) &= \mathbb{1} - \frac{1}{2!}\theta^2\hat{S}_\alpha^2 + \frac{1}{4!}\theta^4\hat{S}_\alpha^4 - \frac{1}{6!}\theta^6\hat{S}_\alpha^6 + \frac{1}{8!}\theta^8\hat{S}_\alpha^8 - \dots \\ \sin(\theta\hat{S}_\alpha) &= \theta\hat{S}_\alpha - \frac{1}{3!}\theta^3\hat{S}_\alpha^3 + \frac{1}{5!}\theta^5\hat{S}_\alpha^5 - \frac{1}{7!}\theta^7\hat{S}_\alpha^7 + \frac{1}{9!}\theta^9\hat{S}_\alpha^9 - \dots \end{aligned} \quad (3.11)$$

İfadede \hat{S}_α spinin boyutuna bağlı işlemci matrisi ve $\mathbb{1}$ spin işlemcisi ile aynı boyutta birim matristir.

Bu işlemleri yapabilmek için matris formundaki spin işlemcilerinin terim terim kuvvetlerini almak gerekir. Spin işlemcisi matrislerin boyutları $S = 0$ için 1×1 , $S = 1$ için 3×3 olacaktır. Dolayısıyla işlemleri yeterli duyarlıkta, örneğin $\varepsilon = 10^{-9}$ duyarlıkta yapabilmek için spin matrisinin boyutuna ve açının değerine bağlı olarak seriyi 7 ile 40 terim arasında toplamak gerekmektedir ve bu işlemler ancak bilgisayar yardımı ile yapılabilir. Seri toplama, dönme işlemcisinin bütün bileşenleri için ayrı ayrı yapılmalıdır.

3.3. Yoğunluk İşlemci Teorisi

Spektroskopik teknikleri açıklamanın önemli ve verimli yollarından birisi yoğunluk matrisi teorisidir. Yoğunluk matrisi teorisiyle zamana bağlı spin sistemleri kontrol edilebilmektedir. Kuantum mekaniğinde her yalıtılmış sistem N boyutlu karmaşık Hilbert uzayında bir saf bir ψ dalga fonksiyonu ile tanımlanır;

$$\psi = \sum_i c_i \phi_i, \quad c_i (i = 1, 2, 3 \dots N) \quad (3.12)$$

Yalıtılmamış bir sistem çevreyle etkileşim halindedir ve bu nedenle sistemdeki bilgi tanımsızdır ve karışık durumlar olarak bilinirler. Böyle sistemlerin, bir kuantum mekanik tanım ve işlem olan yoğunluk matrisi ile temsil edilmesi daha uygun düşmektedir, (Atkins ve Friedman, 2005; Oliviera ve diğ., 2007). H sembolü Hilbert uzayını tanımlasın, N boyutlu bir Hilbert uzayında $|\psi_k\rangle \in H$ olmak üzere yoğunluk matrisi,

$$\rho = \sum_{k=1}^N P_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k|, \quad (k = 1, 2, 3 \dots N) \quad (3.13)$$

olarak tanımlanır. p_k katsayısı sistemin k 'nci durumda bulunma olasılığıdır. Salt durumlar için $p_k = 1$ olacağından $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ değerini alacaktır. Yoğunluk matrisinin temel özellikleri aşağıda verilmiştir.

- i. Yoğunluk matrisi ağırlıklı ortalama değer bu teorideki ifadesidir.
- ii. Yoğunluk matrisi Hermitik olmalıdır, zira özdeğerleri gerçeldir: $\rho = \rho^\dagger$.
- iii. Salt durumlar için yoğunluk matrisinin kendisinin ve karesinin izi bir birimdir: $\text{Iz}(\rho) = 1$ ve $\text{Iz}(\rho^2) = 1$.
- iv. Karışık durumlarda yoğunluk matrisinin izi birimden küçük olabilir: $\text{Iz}(\rho) \leq 1$.
- v. Bir \hat{A} işlemcisinin özdeğeri ya da beklenen değeri yoğunluk matrisinin değerlendirilmesiyle bulunabilir. Bu değer gerçekte yoğunluk matrisi ile \hat{A} işlemcisinin çarpımının izine eşittir,

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_j \sum_k \rho_{jk} \hat{A}_{kj} = \sum_j (\rho \hat{A})_{jj} = \text{Iz}(\rho \hat{A}) \quad (3.14)$$

- vi. Yoğunluk matrisi, zamana bağlı süreçlerin incelenmesinde güçlü işlemlerden birisidir. Zamana bağlı Schrödinger denklemi yoğunluk matrisi ile birlikte alınarak,

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = \mathcal{H}|\psi\rangle \text{ ve Hermitik eşleniği } i\hbar \frac{d\langle\psi|}{dt} = -\mathcal{H}\langle\psi| \text{ ile}$$

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle\langle\psi|}{dt} = i\hbar \left(\frac{d|\psi\rangle}{dt} \langle\psi| + |\psi\rangle \frac{d\langle\psi|}{dt} \right) \text{ işlemi açık biçimiyle} \quad (3.15)$$

$$i\hbar \frac{d\rho(t)}{dt} = \mathcal{H}|\psi\rangle\langle\psi| - |\psi\rangle\langle\psi|\mathcal{H} = \mathcal{H}\rho - \rho\mathcal{H} = [\mathcal{H}, \rho]$$

komütasyon değeri elde edilir. Bu son ifade yoğunluk matrisi teorisinde önemli işlemlerden birisidir ve Sturm Liouville - von Neuman teoreminin kuantum mekanikteki ifadesidir. Birinci mertebe bir diferansiyel denklem olan bu ifadenin çözümü yapılırsa,

$$\rho(t) = e^{-i\mathcal{H}t/\hbar} \rho(0) e^{i\mathcal{H}t/\hbar} \quad (3.16)$$

sonucu bulunur. Eğer başlangıçta yoğunluk matrisinin değeri biliniyorsa sonraki bir t zamanındaki yoğunluk matrisinin değeri yani sistemin durumu belirlenebilir. Termal dengedeki bir sistem için başlangıç yoğunluk matrisi,

$$\rho(0) = \frac{e^{-\mathcal{H}/k_B T}}{\sum_m e^{-E_m/k_B T}} = \frac{e^{-\mathcal{H}/k_B T}}{Z(T)} \quad (3.17)$$

denklemleri ile verilir. İfadelerde k_B Boltzmann sabiti, E_m sisteminin m durumunun enerjisidir. Başlangıç durumu biliniyorsa $t_1, t_2, t_3 \dots t_N$ zamanlarındaki $\rho(t_1), \rho(t_2), \rho(t_3) \dots \rho(t_N)$ yoğunlukları aşağıda verilen ifade ile bulunur,

$$\rho(t_i) = e^{-iHt_{i+1}/\hbar} \rho(t_{i+1}) e^{iHt_{i+1}/\hbar}, \quad (i = 1, 2, 3, \dots N). \quad (3.18)$$

Son aşamada uygulanan puls dizisine spin sisteminin tepkisi belirlenecektir. Sistemin tepkisi serbest indüksiyon bozulma sinyali (SİB) ya da FID (Free Induction Decay) denilmektedir. Bu işleme sinyal yoğunluk matrisi teorisinde sinyalin ortalaması işlemi (signal averaging) veya çeyrek bölge deteksiyonu (quadrature detection) denilmektedir. Bu işlem, matematik olarak, artırma spin işlemcisi ile yapılır, (Schweiger ve Jeschke, 2001; Rule ve Hitchens, 2006; Oliviera, 2007).

$$\mathcal{J} = \text{İz}(\hat{S}_+ \rho(t_i)) \quad (3.19)$$

SİB sinyali, zamana göre sönümlü sinüs dalgadır, yani zaman uzayında değişen bir sinyaldir. Bu sinyalin Fourier dönüşümü alınarak frekans uzayında spektrum elde edilir. Bu anlaşılabilir ve çözümlenebilir spektrumdur. Bu işlemler Algoritma 4.1 ile adımlar halinde verilmiştir.

Bu işlemler çok fazla ve zaman alıcı olduğundan üstel fonksiyonun başka ifadesi olan kosinüs ve sinüs fonksiyonlarının seri açılımının yapılması gerekmektedir ki bu işlemler ancak bir yazılım ile mümkün olmaktadır.

4. BULGULAR

4.1. Spin İşlemci Matrislerinin Türetilmesi

Spin matrisleri ya da spin işlemcileri spinlerin temel özelliklerinden yararlanılarak oluşturulabilir. Kaynaklarda hazır olarak verilen spin işlemcilerinin bazıları, ki en fazla bilineni Pauli spin matrisleridir, çeşitli kaynaklarda bulunabilmekteyse de uygulamalarda kolaylık için oluşturulmasını bir örnek üzerinde göstermek yararlı olacaktır.

Spin 1/2 sistem için Bölüm 2’de matrisler verilmiştir. Burada örnek olarak spin 1 ya da kutrit sistem, spin 3/2 ve spin 2 için spin matrisleri Algoritma 4.1’den yararlanılarak oluşturulacaktır.

Algoritma 4.1 Farklı spin sistemleri için spin işlemcilerinin ya da matris temsillerinin oluşturulmasında kullanılacak algoritma:

- 1) Spin öz durumlarına etkideği zaman M_S özdeğerlerini verecek olan \hat{S}_Z matrisini oluştur,
- 2) Spin öz durumlarına etkideği zaman durumu bir üst duruma yükseltecek olan yükseltme işlemcisini, \hat{S}_+ oluştur, (tanımlı uzay dışına çıkılamayacağından $\hat{S}_+|0\rangle$ işlemi tanımsızdır),
- 3) Spin öz durumlarına etkideği zaman durumu bir alt duruma indirecek olan alçaltma işlemcisini, \hat{S}_- oluştur, (tanımlı uzay dışına çıkılamayacağından $\hat{S}_-|N\rangle$ işlemi tanımsızdır).
- 4) \hat{S}_+ ve \hat{S}_- matrisleriyle $\hat{S}_x = \frac{1}{2}(\hat{S}_+ + \hat{S}_-)$ ve $\hat{S}_y = \frac{1}{2i}(\hat{S}_+ - \hat{S}_-)$ matrislerini oluştur.

Spin 1 için $M_S = 1, 0, -1$ olduğundan öz durumlar ile \hat{S}^2 ve \hat{S}_Z işlemcileri, $|S, M_S\rangle = |F\rangle$, ($F = 0, 1, 2$) öz durumları için,

$$|1, 1\rangle = |0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |1, 0\rangle = |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |1, -1\rangle = |2\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (4.1)$$

$$\hat{S}^2 = 2 \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{ve} \quad \hat{S}_Z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (4.2)$$

olacaktır. \hat{S}_+ işlemcisinin özdeğerleri $M_S = 1, 0, -1$ spin kuantum durumlarına karşılık gelen $|0\rangle, |1\rangle$ ve $|2\rangle$ durumları için aşağıdaki gibi bulunur.

Yükseltme ve alçaltma işlemcileri \hat{S}_+ ve \hat{S}_- ile \hat{S}_x ve \hat{S}_y işlemcileri arasındaki ilişki aşağıda tanımlanmıştır.

$$\begin{aligned}\hat{S}_+ &= \hat{S}_x + i\hat{S}_y, & \hat{S}_- &= \hat{S}_x - i\hat{S}_y \\ \hat{S}_x &= \frac{1}{2}(\hat{S}_+ + \hat{S}_-), & \hat{S}_y &= \frac{1}{2i}(\hat{S}_+ - \hat{S}_-)\end{aligned}\quad (4.3)$$

Yükseltme ve alçaltma işlemcilerinin özdeğerleri,

$$S_{\pm}|S, M_S\rangle = \sqrt{S(S+1) - M_S(M_S \pm 1)}|S, M_S \pm 1\rangle \quad (4.4)$$

olarak tanımlanmaktadır. \hat{S}_x ve \hat{S}_y işlemcilerinin özdeğerleri de bu tanımlar kullanılarak bulunabilir. Spin durumu $|S, M_S\rangle$ olarak alınırsa \hat{S}_+ işlemcisinin $S=1$ için özdeğerleri,

$$\begin{aligned}\hat{S}_+|1, 1\rangle &= 0 \quad (\text{tanımlı uzayın dışına taşır}) \\ \hat{S}_+|1, 0\rangle &= \sqrt{2}|1, 1\rangle \\ \hat{S}_+|1, -1\rangle &= \sqrt{2}|1, 0\rangle\end{aligned}\quad (4.5)$$

olarak bulunur. Benzer işlemler \hat{S}_- işlemcisi için yapılırsa aşağıdaki sonuçlar bulunur.

$$\begin{aligned}\hat{S}_-|1, 1\rangle &= \sqrt{2}|1, 0\rangle \\ \hat{S}_-|1, 0\rangle &= \sqrt{2}|1, -1\rangle\end{aligned}\quad (4.6)$$

$$\hat{S}_+|1, -1\rangle = 0 \quad (\text{tanımlı uzayın dışına taşır})$$

Bu sonuçlarla \hat{S}_+ ve \hat{S}_- işlemcilerinin matris temsilleri elde edilir.

$$\hat{S}_+ = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{ve} \quad \hat{S}_- = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{bmatrix} \quad (4.7)$$

Buradan \hat{S}_x ve \hat{S}_y işlemcileri de Denklem 4.8'deki gibi bulunur.

$$\hat{S}_x = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{bmatrix} \quad \text{ve} \quad \hat{S}_y = \frac{1}{2i} \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 \end{bmatrix} \quad (4.8)$$

İkinci örnek olarak Spin-3/2 için önce \hat{S}_+ ve peşinde \hat{S}_- işlemcileri oluşturulmalıdır. Spin-3/2 için önce \hat{S}_+ işlemcisinin özdeğerleri bulunur. Arttıran işlemcinin özdeğer tanımından Denklem 4.9 elde edilir.

$$\begin{aligned}
\hat{S}_+|3/2, 3/2\rangle &= 0 \quad (\text{tanımlı uzayın dışına taşır}) \\
\hat{S}_+|3/2, 1/2\rangle &= \sqrt{3} |3/2, 3/2\rangle \\
\hat{S}_+|3/2, -1/2\rangle &= 2 |3/2, 1/2\rangle \\
\hat{S}_+|3/2, -3/2\rangle &= \sqrt{3} |3/2, -1/2\rangle
\end{aligned} \tag{4.9}$$

Bu özdeğerler spin-3/2'nin durumları olan

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |2\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |3\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{4.10}$$

durumlarına uygulanırsa işlemci matrisi aşağıdaki gibi elde edilir.

$$\hat{S}_+ = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{4.11}$$

Benzer olarak, \hat{S}_- işlemcisinin özdeğerleri bulunur;

$$\begin{aligned}
\hat{S}_-|0\rangle &= \hat{S}_-|3/2, 3/2\rangle = \sqrt{3} |3/2, 1/2\rangle \\
\hat{S}_-|1\rangle &= \hat{S}_-|3/2, 1/2\rangle = 2 |3/2, -1/2\rangle \\
\hat{S}_-|2\rangle &= \hat{S}_-|3/2, -1/2\rangle = 2 |3/2, -3/2\rangle \\
\hat{S}_-|3\rangle &= \hat{S}_-|3/2, -3/2\rangle = 0 \quad (\text{tanımlı uzay dışına taşır})
\end{aligned} \tag{4.12}$$

bulunacaktır. Buna göre \hat{S}_- işlemcisi de, yukarıda yapılan işlemlerin benzeri olarak,

$$\hat{S}_- = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{bmatrix} \tag{4.13}$$

sonucu bulunur. Bu işlemcilerle \hat{S}_x ve \hat{S}_y işlemcileri de, spin-3/2 için,

$$\hat{S}_x = \frac{1}{2}(\hat{S}_+ + \hat{S}_-) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{bmatrix} \quad (4.14)$$

$$\hat{S}_y = \frac{1}{2i}(\hat{S}_+ - \hat{S}_-) = \frac{1}{2i} \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ -\sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & -\sqrt{3} & 0 \end{bmatrix} \quad (4.15)$$

olarak bulunur. \hat{S}_z ve \hat{S}^2 işlemcilerinin doğrudan spin özdeğerlerinden, $\hat{S}_z|S, M_s\rangle = M_s|S, M_s\rangle$ ve $\hat{S}^2|S, M_s\rangle = S(S+1)|S, M_s\rangle$ oluşturulur.

$$\hat{S}_z = \begin{bmatrix} 3/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3/2 \end{bmatrix} \quad (4.16)$$

$$\hat{S}^2 = \frac{15}{4} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \frac{15}{4} \mathbb{I} \quad (\mathbb{I} : \text{Birim batris})$$

Diğer bir örnek olan spin-2 için işlemciler de aynı yöntemle bulunabilir. Yani önce \hat{S}^2 , sonra \hat{S}_z matrisleri oluşturulabilir. Sonra \hat{S}_+ ve \hat{S}_- işlemcileri, arttırma ve eksiltme işlemlerini yapan matrisler ve en sonunda da $\hat{S}_x = \frac{1}{2}(\hat{S}_+ + \hat{S}_-)$ ve $\hat{S}_y = \frac{1}{2i}(\hat{S}_+ - \hat{S}_-)$ tanımları ile \hat{S}_x ve \hat{S}_y işlemcileri bulunur. Spin-2 için durumlar

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |2\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |3\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |4\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (4.17)$$

olacağından işlemci matris temsilleri

$$\hat{S}_+ = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{S}_- = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.18)$$

$$\hat{S}_x = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{6} & 0 & \sqrt{6} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \end{bmatrix} \hat{S}_y = \frac{1}{2i} \begin{bmatrix} 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{6} & 0 & \sqrt{6} & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{6} & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & -2 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.19)$$

$$\hat{S}^2 = 6 \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \hat{S}_z = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2 \end{bmatrix} \quad (4.20)$$

elde edilir. Diğer bütün spinlerin matris temsilleri aynı yöntemle türetilir.

4.2. Dönme İşlecilerinin Türetilmesi ve Etkileri

Kuantum mekaniğinde dönme işlecileri klasik mekanikten oldukça farklıdır ve kuantum mekaniğe özgüdür ve klasik karşılığı olmayan dönme işlecileridir. Bu çalışmada sırasıyla 1/2 ile 5/2 arası spinlere karşılık gelen dönme işlecileri oluşturulmuştur.

Spin dönme işlecileri üç temel aşamada hesaplanmıştır. Bu aşamalar şunlardır:

Birinci aşama: Bu aşamada üstel işlemci olan dönme işlemcisi önce trigonometrik bileşenlere ayrılır.

$$\hat{R}_\alpha(\theta) = e^{-i\theta\hat{S}_\alpha} = \cos(\theta\hat{S}_\alpha) - i \sin(\theta\hat{S}_\alpha), \quad (\alpha = x, y, z, +, -) \quad (4.21)$$

Dönme işlemcisi bu haliyle uygulanabilir değildir, çünkü işlemci olan spin bileşenleri kosinüs ve sinüs fonksiyonlarının argümanıdır. Bu nedenle kosinüs ve sinüs fonksiyonlarının kuvvet serisine açılarak doğrusal hale getirilmesi gerekmektedir.

Dönme işlecilerinin ilginç olan özelliği, kaynağı spin olan bu işlemcinin yine bir spin durumu üzerine etki ederek onu başka bir duruma getirmesidir,

$$\hat{R}_\alpha(\theta)|n\rangle = |n'\rangle, \quad (\alpha = x, y, z, +, -). \quad (4.22)$$

Örnek olarak bilinen spin-1/2'nin dönme işlemcisi $\hat{R}_y(\theta)$ spin-1/2'nin $|0\rangle$ durumuna uygulanırsa,

$$\begin{bmatrix} \cos(\theta/2) & \sin(\theta/2) \\ -\sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sin(\theta/2) \\ \cos(\theta/2) \end{bmatrix} \quad (4.23)$$

olacaktır. Açının 60° ve 90° olması durumunda spinin aldığı durumlar şunlar olacaktır.

$$\theta = 60^\circ \text{ için } \begin{bmatrix} 1/2 \\ \sqrt{3}/2 \end{bmatrix}, \quad \theta = 90^\circ \text{ için } \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \right\} \quad (4.24)$$

Bu işlemler $\hat{R}_y(\theta)$ işlemcisinin $\theta = 90^\circ$ için Hamard geçidine benzer biçimde her bir salt kubit durumunu iki durumun eşit oranda karışımı haline getirir. İşlemcinin $\theta = 60^\circ$ ve 90° için dönme işlemcisinin açık ifadesi

$$\hat{R}_y(90^\circ) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}, \quad \hat{R}_y(60^\circ) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & \sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & 1 \end{bmatrix} \quad (4.25)$$

olarak verilir. Dönme işlemcisi θ açısının herhangi bir değerlerinde salt durumu kubit sistemin her iki durumunun farklı oranlarda karışımı yapmaktadır. Diğer spinlere karşılık gelen dönme işlemcileri salt spinler üzerine farklı biçimlerde etki etmektedir.

İkinci aşama: Bu aşamada kosinüs ve sinüs terimleri kuvvet serisine açılır. Bu yolla işlemci matrisleri trigonometrik fonksiyonlarda işlem yapılabilir hale gelir.

$$\begin{aligned} \cos(\theta \hat{S}_\alpha) &= \mathbb{1} - \frac{1}{2!} \theta^2 \hat{S}_\alpha^2 + \frac{1}{4!} \theta^4 \hat{S}_\alpha^4 - \frac{1}{6!} \theta^6 \hat{S}_\alpha^6 + \frac{1}{8!} \theta^8 \hat{S}_\alpha^8 - \dots \\ \sin(\theta \hat{S}_\alpha) &= \theta \hat{S}_\alpha - \frac{1}{3!} \theta^3 \hat{S}_\alpha^3 + \frac{1}{5!} \theta^5 \hat{S}_\alpha^5 - \frac{1}{7!} \theta^7 \hat{S}_\alpha^7 + \frac{1}{9!} \theta^9 \hat{S}_\alpha^9 - \dots \end{aligned} \quad (4.26)$$

Seri açılımlarda α indisi spin işlemcinin koordinat bileşenleri x , y , z ve arttıran ve eksiltten $+$ ve $-$ işlemcileri temsil etmekte, $\mathbb{1}$ spin işlemcisi ile aynı boyutta birim matrisi göstermektedir.

Bu aşamadan sonra yoğun sayısal işlemler gerekmektedir. Bu işlemler en küçük spin işlemcisi olan spin-1/2'nin \hat{S}_y bileşeni için örnek olarak yapılacaktır. Kosinüs bileşeninin ilk birkaç terimi

$$\cos(\theta \hat{S}_y) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \frac{\theta^2}{8} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \frac{\theta^4}{384} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \dots \quad (4.27)$$

ve sinüs bileşeninin ilk birkaç terimi

$$\sin(\theta \hat{S}_y) = \frac{\theta}{2i} \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} - \frac{\theta^3}{48i} \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} + \frac{\theta^5}{3480i} \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} + \dots \quad (4.28)$$

olarak bulunur. Bundan sonra spin işlemcilerinin sıfırdan farklı her bir elemanı için seri belirli açılarda, örneğin $\theta = 0^\circ, 10^\circ, 20^\circ, 30^\circ \dots 180^\circ$ veya 360° açılarının her

birisinde olabildiğince hassas toplanmalıdır. Spin işlemcisinin $S_{y,(1,1)}$ elemanına karşılık gelen dönü matrisinin r_{11} ve r_{12} elemanlarının her bir açıda yapılan toplama işleminin değerleri aşağıda verilmiştir;

Tablo 4.1. Spin işlemcisinin $S_{y,(1,1)}$ elemanına karşılık gelen dönü matrisinin r_{11} ve r_{12} elemanlarının her bir açıda yapılan toplama işleminin değerleri

Matris elemanı: r_{11}		Matris elemanı: r_{12}	
Açı (derece)	Toplam	Açı (derece)	Toplam
0	1.0000	0	0.0000
20	0.9848	20	0.1736
40	0.9397	40	0.3420
60	0.8660	60	0.5000
80	0.7660	80	0.6428
100	0.6428	100	0.7660
120	0.5000	120	0.8660
140	0.3420	140	0.9397
160	0.1736	160	0.9848
180	0.0000	180	1.0000
200	-0.1736	200	0.9848
220	-0.3420	220	0.9397
240	-0.5000	240	0.8660
260	-0.6428	260	0.7660
280	-0.7660	280	0.6428
300	-0.8660	300	0.5000
320	-0.9397	320	0.3420
340	-0.9848	340	0.1736
360	-1.0000	360	0.0000

Toplama işlemleri olabildiğince hassas, en azından $\varepsilon = 10^{-9}$ mertebesinde hassas olmalıdır.

Üçüncü aşama: Bu aşamada değerlerin açılara göre değişimleri çizilerek fonksiyonları belirlenmeye çalışılır. Muhtemel doğrusal fonksiyonlar ayrı ayrı en küçük kareler yöntemiyle eğri uydurma yapılarak terim katsayıları ve sonuçta değişimi temsil eden fonksiyon bulunur. Bu fonksiyon yaklaşık olmamalı, tam fonksiyon olmalıdır. Şekil 4.1’de her iki değişim açılara göre çizilmiş ve değişimleri temsil eden dönü matrisinin elemanlarının

$$r_{ij}(\theta) = \xi_1 \cos(\theta/2) + \xi_2 \sin(\theta/2) \quad (4.29)$$

fonksiyonuna tam uyması nedeniyle en küçük kareler yöntemi ile eğri uydurma işlemi sonunda terim katsayıları olan ξ_1 ve ξ_2 belirlenmiştir. Yapılan işlem sonunda r_{11} elemanı için katsayılar $\xi_1 = 1$ ve $\xi_2 = 0$ olarak, r_{12} elemanı için katsayılar $\xi_1 = 0$ ve

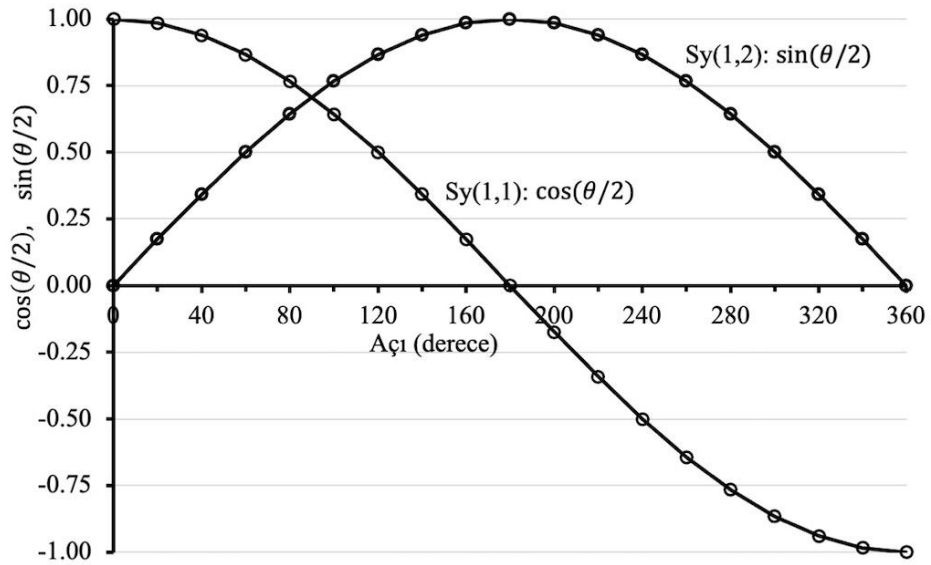
$\xi_2 = 1$ olarak bulunmuştur. Aynı işlemler \hat{S}_x , \hat{S}_y ve \hat{S}_z işlemcilerinin bütün elemanları için uygulandığında spin-1/2 için aşağıdaki dönü işlemcileri bulunur.

$$\hat{R}_x(\theta) = \begin{bmatrix} c & is \\ is & c \end{bmatrix}, \quad \hat{R}_y(\theta) = \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix}, \quad \hat{R}_z(\theta) = \begin{bmatrix} c + is & 0 \\ 0 & c - is \end{bmatrix} \quad (4.30)$$

$$c = \cos(\theta/2), \quad s = \sin(\theta/2)$$

Çalışmada $\hat{R}_+(\theta)$, $\hat{R}_-(\theta)$ ve \hat{S}^2 işlemcisine karşılık gelen $\hat{R}^2(\theta)$ işlemcileri bu yöntemle bulunacaktır.

Yukarıda yapılan kosinüs ve sinüs serilerinin toplamalarında argüman olan spin işlemcilerinden \hat{S}_x ve \hat{S}_z işlemcileri gerçel, fakat \hat{S}_y işlemcisi sanaldır. Kosinüs serisinde tüm terimlerde argümanların kuvvetleri çift sayı olduğundan dolayı, argüman gerçel de olsa sanal da olsa sonuç iki durumda da gerçel olacaktır. Sinüs serisinde ise kuvvetler tek sayı olduğundan dolayı gerçel olan \hat{S}_x ve \hat{S}_z işlemcileri için toplamalar sanal, sanal olan \hat{S}_y işlemcisi için toplamalar tam tersine gerçel olacaktır. Sonuçta \hat{R}_x ve \hat{R}_z işlemcilerinin terimleri kompleks ve \hat{R}_y 'nin elemanları gerçel olacaktır. Diğer spinlere karşılık gelen dönü işlemcileri de benzer olacaktır.



Şekil 4.1. Spin-1/2'nin \hat{S}_y işlemcisinin (1,1) ve (1,2) elemanlarına karşılık gelen dönü işlemcisinin elemanlarının açıya göre değişimleri.

4.3. \hat{R}_+ , \hat{R}_- ve \hat{R}^2 İşlemci Elemanlarının Uyum Fonksiyonları

Bölüm 4.2'de anlatılan toplama işlemleri herhangi bir spin elemanına karşılık gelen dönme işlemcisinin açılara göre değişimini sayı olarak verir. Bu kesimde bu sayısal değerleri temsil eden fonksiyonlar bulunacaktır.

Dönme işlemcilerinin matris elemanı olan tek tür bir fonksiyon yoktur. Değişim farklı terimlerden oluşan polinomlar olacaktır, ancak bu polinomların terimleri trigonometrik fonksiyonlar (sinüs ve kosinüs) ya da doğrudan açı olabilir.

Bu tez çalışmasında \hat{S}_+ ve \hat{S}_- elemanlarının açığa bağlı değişimlerini temsil eden fonksiyonlar doğrudan açığa bağlı polinomlardır.

$$r_{ij}(\theta) = \xi_0 + \xi_1\theta + \xi_2\theta^2 + \xi_3\theta^3 \dots \quad (\theta : \text{radyan}) \quad (4.31)$$

Eleman sayısı fazla olduğundan, sınırlı sayıda eleman için çözüm yapılarak fonksiyonların bulunması gösterilecektir.

Bunun yanında \hat{S}^2 işlemcisinin elemanları argümanları farklı olan trigonometrik fonksiyonlar olarak belirlenecektir. Elemanlar, β parametresi değişimlerden belirlenmek kaydıyla,

$$r_{ij}(\theta) = \cos(\beta\theta) + i \sin(\beta\theta) \quad (\theta : \text{radyan}) \quad (4.32)$$

olarak belirlenmiştir.

Tüm uyum fonksiyonu işlemleri, regresyon katsayısı olarak bilinen r değeriyle veya orijinal ve uydurulmuş eğrilerin eşzamanlı çizimlerinde görsel olarak uyum açısından kontrolleri yapılarak elde edilmiştir.

4.3.1. Spin-1/2'ye Karşılık Gelen \hat{R}_+ , \hat{R}_- ve \hat{R}^2 Dönü İşlemcileri

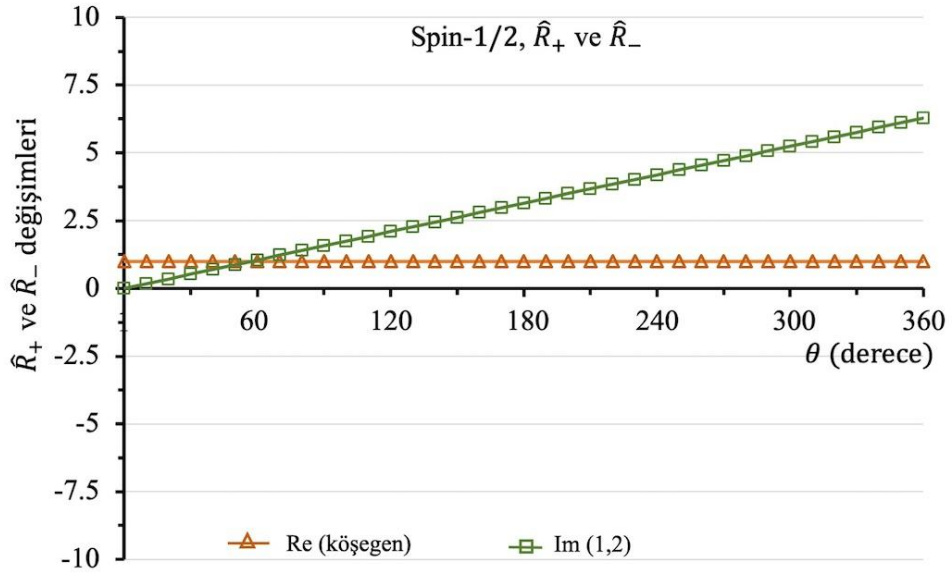
\hat{S}_+ ve \hat{S}_- işlemcileri olan matrisin elemanları dikkate alınır

$$\hat{S}_+ = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{S}_- = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.33)$$

Hem \hat{S}_+ ve hem \hat{S}_- işlemcilerinin (1,1) ve (2,2) elemanları, seri toplamı dikkate alınarak sabit ve 1 olarak bulunur. \hat{S}_+ işlemcisinin sıfırdan farklı olan (1,2) elemanı ile \hat{S}_- işlemcisinin (2,1) elemanı için Denklem 4.32'de verilen kosinüs ve sinüs serilerinin toplamları 0° ile 360° arasında 20° adımlarla toplanırsa aşağıdaki tabloda verilen değerler bulunur. Spin-1/2 için dönme matrisinin değişken olan bu elemanların değişimi çizilirse bunun θ açısına doğru orantılı olacağı görülecektir. Şekil 4.2 bu değişimleri göstermektedir. Görüldüğü üzere dönme işlemcisinin köşegen elemanları sabit ve birim, sıfırdan farklı olan elemanlar da, θ (radyan) açısına bağlı doğru denklemdir.

Tablo 4.2. \hat{S}_+ işlemcisinin sıfırdan farklı olan (1,2) elemanı ile \hat{S}_- işlemcisinin (2,1) elemanı için kosinüs ve sinüs serilerinin toplamları 0° ile 360° arasında 20° adımlarla toplanırsa bulunan değerleri

\hat{R}_+ : Matris elemanı r_{12}	\hat{R}_- : Matris elemanı r_{21}	$\hat{R}^{(2)}$: Matris elemanı r_{11} ve r_{22}	$\cos(\beta\theta)$	$\sin(\beta\theta)$
	θ (derece)	r_{11} ve r_{22}		
	0	0.0000	1.0000	0.0000
	20	0.3491	0.9659	0.2588
	40	0.6981	0.8660	0.5000
	60	1.0472	0.7071	0.7071
	80	1.3963	0.5000	0.8660
	100	1.7453	0.2588	0.9659
	120	2.0944	0.0000	1.0000
	140	2.4435	-0.2588	0.9659
	160	2.7925	-0.5000	0.8660
	180	3.1416	-0.7071	0.7071
	200	3.4907	-0.8660	0.5000
	220	3.8397	-0.9659	0.2588
	240	4.1888	-1.0000	0.0000
	260	4.5379	-0.9659	-0.2588
	280	4.8869	-0.8660	-0.5000
	300	5.2360	-0.7071	-0.7071
	320	5.5851	-0.5000	-0.8660
	340	5.9341	-0.2588	-0.9659
	360	6.2832	0.0000	-1.0000

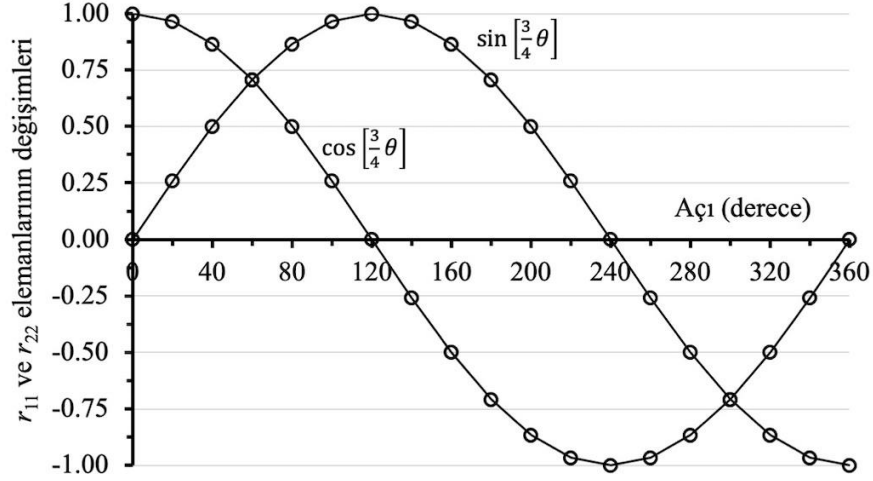


Şekil 4.2. Spin-1/2 için arttıran ve eksiltten işlemcilerinin sıfırdan farklı elemanlarına karşılık gelen dönme işlemci matrislerinin açısıl değışimleri.

Spin-1/2 için bulunan dönme işlemcileri,

$$\hat{R}_+(\theta) = \begin{bmatrix} 1 & i\theta \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \hat{R}_-(\theta) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ i\theta & 1 \end{bmatrix} (= \hat{R}_+^T) \quad (4.34)$$

Spin-1/2 için $\hat{R}^2(\theta)$ işlemcisinin elemanlarının değişimleri tabloda verilmiştir. Şekil 4.3.'te gösterilen değişimler biraz denemeye $\beta = \frac{3}{4} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right)$ olmak üzere $\cos \beta\theta$ ve $\sin \beta\theta$ fonksiyonlarına uyduğu görülecektir.



Şekil 4.3. Spin-1/2 için $\hat{R}^2(\theta)$ dönü işlemcisinin köşegen elemanlarının açığa bağlı değişimleri.

Elde edilen sonuçlarla dönme işlemcisi

$$\hat{R}^{(2)}(\theta) = \left[\cos\left(\frac{3\theta}{4}\right) + i \sin\left(\frac{3\theta}{4}\right) \right] \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.35)$$

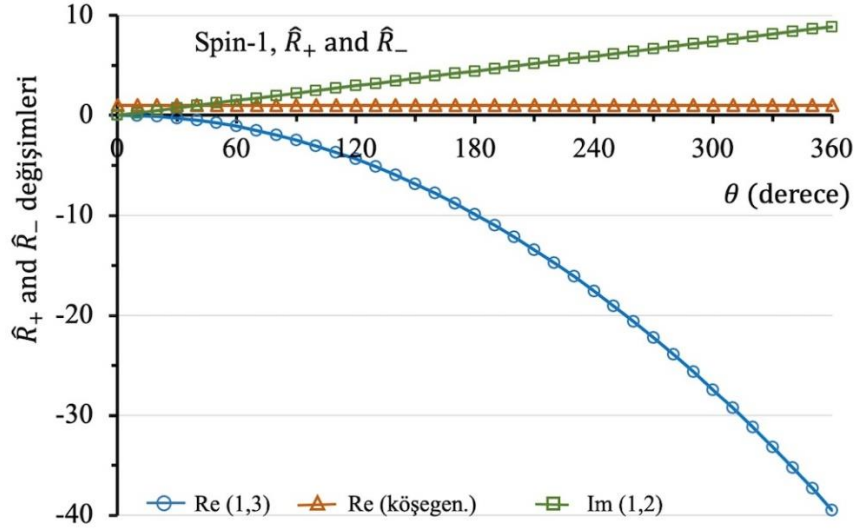
olarak bulunur. Dikkat edilirse trigonometrik fonksiyonların argümanları $\beta = \frac{3}{4} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right)$, spin-1/2 dikkate alınırsa $\beta = S(S + 1)$ olacaktır.

4.3.2. Spin-1'e Karşılık Gelen \hat{R}_+ , \hat{R}_- ve \hat{R}^2 Dönü İşlemcileri

Spin-1/2 için yapılan işlemlerin benzerleri \hat{S}_+ , \hat{S}_- işlemcilerinin elemanlarına ayrı ayrı uygulanırsa sıfırdan farklı dönme işlemci elemanlarının değişimi Şekil 4.4.'te verildiği gibi olur. Bu değişimler doğrudan θ değişkenine bağlı farklı derecelerden polinomlara uymaktadır. Bu fonksiyonlarla \hat{R}_+ , \hat{R}_- dönü matrisleri

$$\hat{R}_+(\theta) = \begin{bmatrix} 1 & i\sqrt{2}\theta & -\theta^2 \\ 0 & 1 & i\sqrt{2}\theta \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \hat{R}_-(\theta) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ i\sqrt{2}\theta & 1 & 0 \\ -\theta^2 & i\sqrt{2}\theta & 1 \end{bmatrix} \quad (4.36)$$

olarak bulunur. Dikkat edilirse \hat{R}_+ ve \hat{R}_- arasında $\hat{R}_- = \hat{R}_+^T$ ilişkisi vardır.



Şekil 4.4. Spin-1 için arttıran, eksiltken ve toplam spin işlemcilerine karşılık gelen dönme işlemci matris elemanlarının değişimleri.

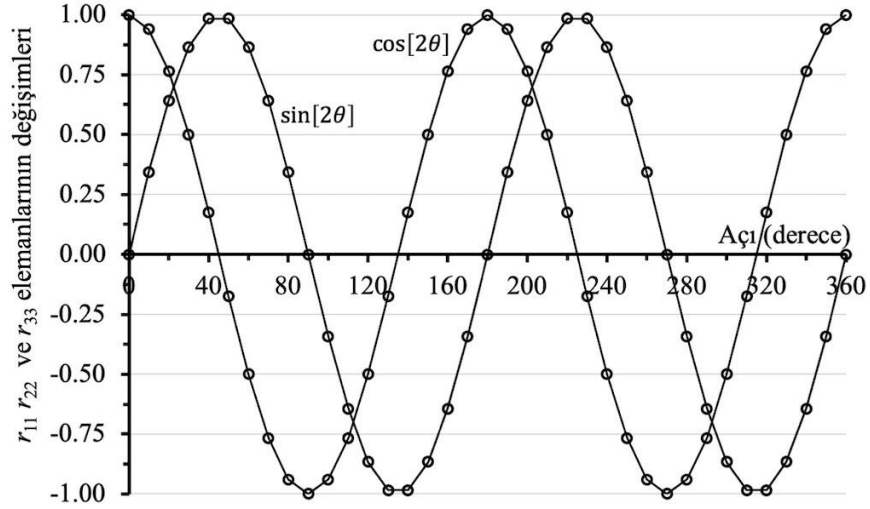
$\hat{R}^2(\theta)$ işlemcisinin açığa bağlı değişim eğrisi Şekil 4.5.'te verilmiştir. Gerek gerçel kosinüs ve gerekse sanal sinüs bileşenlerinde argüman $\beta = 2\theta$ olarak bulunmuştur. Buna göre argüman $\beta = S(S + 1)$ yani $\beta = 1(1 + 1)$ olarak alınabilir ve dönme işlemcisi, sadelik için

$$\hat{R}^2(\theta) = [\cos(2\theta) + i \sin(2\theta)] \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.37)$$

ifadesiyle verilir. Dolayısıyla $c = \cos[S(S + 1)\theta]$ ve $2 = \sin[S(S + 1)\theta]$ olacaktır.

4.3.3. Spin-3/2'ye Karşılık Gelen \hat{R}_+ , \hat{R}_- ve \hat{R}^2 Dönü İşlemcileri

Spin-1/2 için yapılan işlemler spin-3/2 için uygulanırsa \hat{R}_+ ve \hat{R}_- işlemcilerinin elemanları Denklem 4.38'de verildiği gibi bulunacaktır. Dikkat edilirse bu iki işlemci arasında $\hat{R}_- = \hat{R}_+^T$ ilişkisi vardır.



Şekil 4.5. Spin-1 için $\hat{R}^2(\theta)$ işlemcisinin elemanlarının değişimleri.

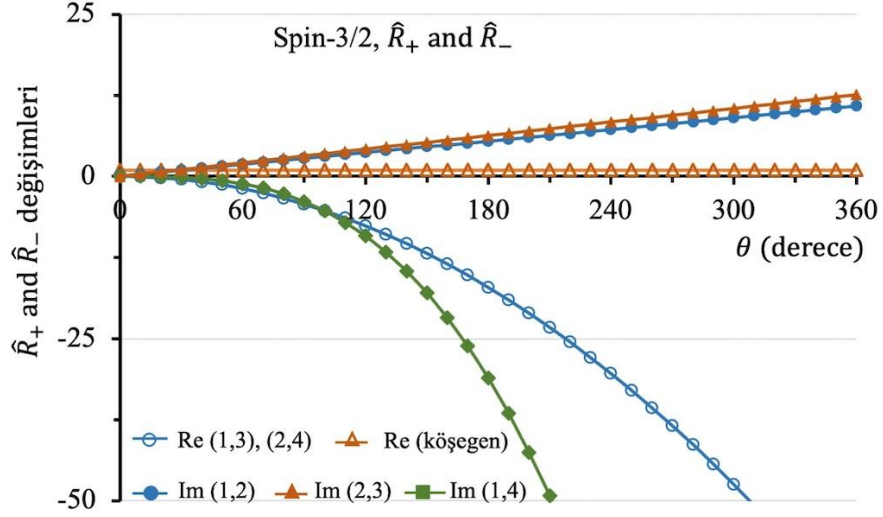
$$\hat{R}_+(\theta) = \begin{bmatrix} 1 & i\sqrt{3}\theta - \sqrt{3}\theta^2 & -i\theta^3 \\ 0 & 1 & i2\theta & -\sqrt{3}\theta^2 \\ 0 & 0 & 1 & i\sqrt{3}\theta \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.38)$$

$$\hat{R}_-(\theta) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ i\sqrt{3}\theta & 1 & 0 & 0 \\ -\sqrt{3}\theta^2 & i2\theta & 1 & 0 \\ -i\theta^3 & -\sqrt{3}\theta^2 i & \sqrt{3}\theta & 1 \end{bmatrix}$$

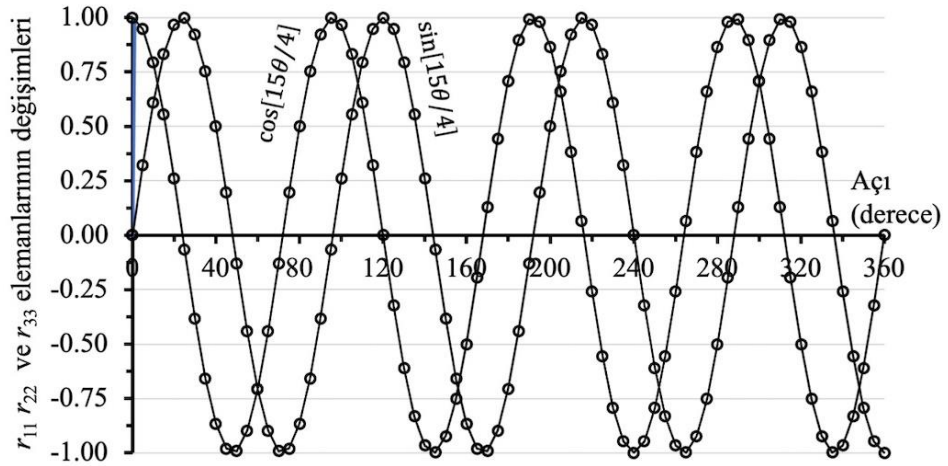
Spin-3/2'nin \hat{R}_+ , \hat{R}_- dönme işlemcilerinin elemanlarının değişimleri topluca Şekil 4.6.'da verilmiştir. Görüldüğü üzere polinomun derecesi artan spin ile artmaktadır.

Spin-3/2 için $\hat{R}^2(\theta)$ işlemcisinin elemanlarının değişimleri Şekil 4.7.'de verilmiştir. Bu değişimde trigonometrik fonksiyonun argümanları $\beta = \frac{15\theta}{4}$ olduğunda sayısal olan değişimler tam olarak temsil etmektedir. Buna göre $\beta = \frac{15\theta}{4} = \frac{3}{2}\left(\frac{3}{2} + 1\right)\theta$ olacaktır. Bunun anlamı, spin-3/2 için de argüman $\beta = S(S + 1)\theta$ olarak \hat{S}^2 işlemcisinin özdeğerine orantılı olacaktır. Buna göre $\hat{R}^2(\theta)$ işlemcisinin açık ifadesi aşağıdaki şekilde yazılabilir:

$$\hat{R}^2(\theta) = \left[\cos\left(\frac{15\theta}{4}\right) + i \sin\left(\frac{15\theta}{4}\right) \right] \begin{bmatrix} 1000 \\ 0100 \\ 0010 \\ 0001 \end{bmatrix} \quad (4.39)$$



Şekil 4.6. Spin-3/2 için \hat{R}_+ , \hat{R}_- işlemcisinin elemanlarının değişimleri.



Şekil 4.7. Spin-3/2 için $\hat{R}^2(\theta)$ işlemcisinin elemanlarının değişimleri.

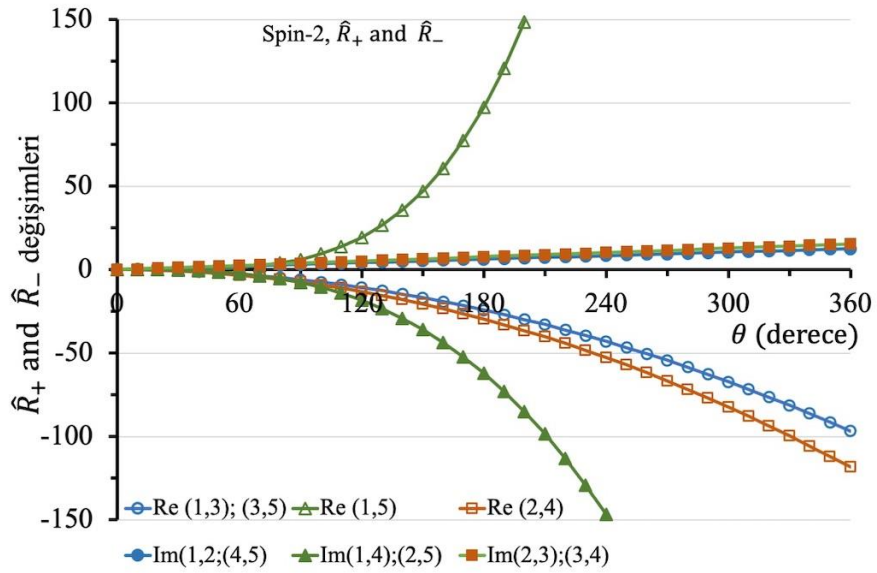
4.3.4. Spin-2'ye Karşılık Gelen \hat{R}_+ , \hat{R}_- ve \hat{R}^2 Dönü İşlemcileri

Spin-1/2 için yapılan işlemler spin-2 için uygulanırsa \hat{R}_+ ve \hat{R}_- işlemcilerinin elemanları Denklem 4.40'ta verildiği gibi bulunacaktır. Dikkat edilirse bu iki işlemci arasında $\hat{R}_- = \hat{R}_+^T$ ilişkisi vardır.

$$\hat{R}_+(\theta) = \begin{bmatrix} 12i\theta - \sqrt{6}\theta^2 - 2i\theta^3 & \theta^4 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.40)$$

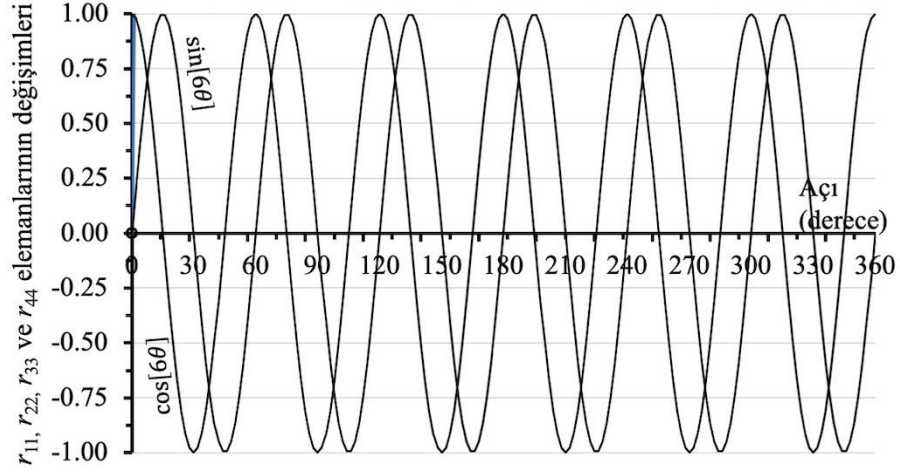
$$\hat{R}_-(\theta) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2i\theta & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -\sqrt{6}\theta^2 & i\sqrt{6}\theta & 1 & 0 & 0 \\ -2i\theta^3 & -3\theta^2 & i\sqrt{6}\theta & 1 & 0 \\ \theta^4 & -2i\theta^3 & -\sqrt{6}\theta^2 & 2i\theta & 1 \end{bmatrix}$$

Spin-2'nin dönme \hat{R}_+ , \hat{R}_- işlemcilerinin elemanlarının değişimleri topluca Şekil 4.8.'de verilmiştir. Görüldüğü üzere polinomun derecesi artan spin ile artmaktadır.



Şekil 4.8. Spin-2 için \hat{R}_+ , \hat{R}_- işlemcisinin elemanlarının değişimleri.

Spin-2 için $\hat{R}^2(\theta)$ işlemcisinin elemanlarının değişimleri Şekil 4.9.'da verilmiştir. Bu değişimde trigonometrik fonksiyonun argümanları $\beta = 6\theta$ olduğunda sayısal olan değişimler tam olarak temsil etmektedir. Buna göre $\beta = 6\theta = 2(2 + 1)\theta$ olacaktır. Bunun anlamı, spin-2 için de argüman $\beta = S(S + 1)\theta$ olarak \hat{S}^2 işlemcisinin özdeğerine orantılı olacaktır. Buna göre $\hat{R}^2(\theta)$ işlemcisinin açık ifadesi yazılabilir.



Şekil 4.9. Spin-2 için $\hat{R}^2(\theta)$ işlemcisinin elemanlarının değişimleri.

Bu değerlendirmeler sonunda $\hat{R}^2(\theta)$ işlemcisinin açık ifadesi aşağıdaki şekilde yazılabilir:

$$\hat{R}^2(\theta) = [\cos(6\theta) + i \sin(6\theta)] \begin{bmatrix} 10000 \\ 01000 \\ 00100 \\ 00010 \\ 00001 \end{bmatrix} \quad (4.41)$$

4.3.5. Spin-5/2'ye Karşılık Gelen \hat{R}_+ , \hat{R}_- ve \hat{R}^2 Dönü İşlemcileri

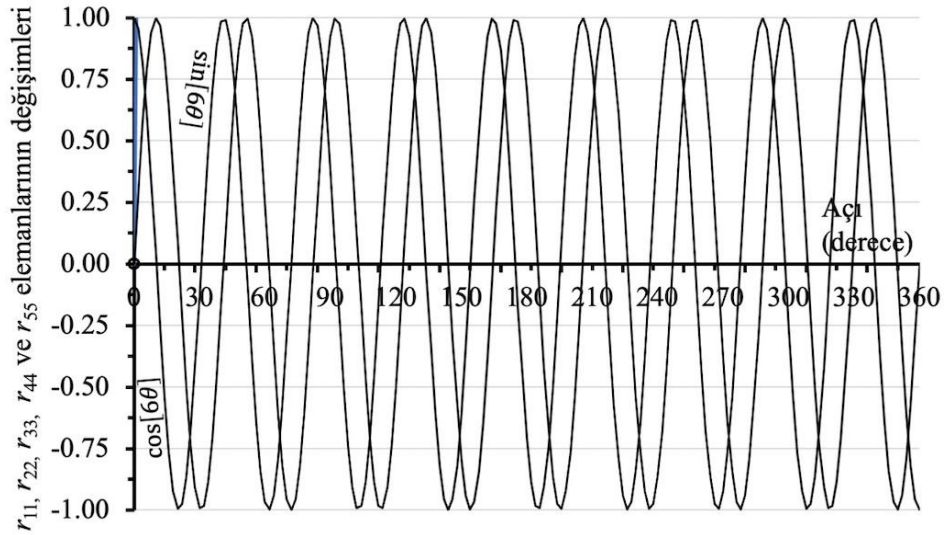
Spin-1/2 için yapılan işlemler spin-5/2 için uygulanırsa \hat{R}_+ ve \hat{R}_- işlemcilerinin elemanları Denklem 4.42'de verildiği gibi bulunacaktır. Dikkat edilirse bu iki işlemci arasında $\hat{R}_- = \hat{R}_+^T$ ilişkisi vardır.

Spin-5/2'nin dönme işlemcileri kalabalık ve birbirlerine çok yakın olduğundan değişimleri çizilmemiştir, ancak Denklem 4.42'de görüleceği üzere polinom dereceleri 0 ile 4 arasında değişmektedir ve katsayılar farklı fakat birbirlerine oldukça yakındır.

$$\hat{R}_+(\theta) = \begin{bmatrix} 1 & i\sqrt{5}\theta - \sqrt{10}\theta^2 - i\sqrt{10}\theta^3 & \sqrt{5}\theta^4 & i\theta^5 \\ 0 & 1 & i\sqrt{8}\theta & -\sqrt{18}\theta^2 & -4i\theta^3 & \sqrt{5}\theta^4 \\ 0 & 0 & 1 & -3i\theta & -\sqrt{18}\theta^2 - i\sqrt{10}\theta^3 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & i\sqrt{8}\theta & -\sqrt{10}\theta^2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & i\sqrt{5}\theta \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.42)$$

$$\hat{R}_-(\theta) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ i\sqrt{5}\theta & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\sqrt{10}\theta^2 & i\sqrt{8}\theta & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -i\sqrt{10}\theta^3 - \sqrt{18}\theta^2 & -3i\theta & \sqrt{18}\theta^2 & i\sqrt{8}\theta & 1 & 0 \\ \sqrt{5}\theta^4 & -4i\theta^3 & -\sqrt{18}\theta^2 & i\sqrt{8}\theta & 1 & 0 \\ i\theta^5 & \sqrt{5}\theta^4 & -i\sqrt{10}\theta^3 - \sqrt{10}\theta^2 i\sqrt{5}\theta & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Spin-5/2 için $\hat{R}^{(2)}(\theta)$ işlemcisinin elemanlarının değişimleri Şekil 4.10.'da verilmiştir. Bu değişimde trigonometrik fonksiyonun argümanları $\beta = 35\theta/4$ olduğunda sayısal olan değişimler tam olarak temsil etmektedir. Buna göre $\beta = \frac{35}{4}\theta = \frac{5}{2}\left(\frac{5}{2} + 1\right)\theta$ olacaktır. Bunun anlamı, spin-5/2 için de argüman $\beta = S(S + 1)\theta$ olarak \hat{S}^2 işlemcisinin özdeğerine orantılı olacaktır.



Şekil 4.10. Spin-5/2 için \hat{R}^2 işlemcisinin elemanlarının değişimleri.

Bu değerlendirmeler sonunda $\hat{R}^{(2)}(\theta)$ işlemcisinin açık ifadesi Denklem 4.43'teki gibi yazılabilir,

$$\hat{R}^2(\theta) = \left[\cos\left(\frac{35\theta}{4}\right) + i \sin\left(\frac{35\theta}{4}\right) \right] \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.43)$$

5. TARTIŞMALAR VE SONUÇLAR

Kuantum mekanikte dönme işlemcilerinden sadece spin-1/2'ye karşılık gelen dönme işlemcisi çok uzun zamandan bu yana bilinmektedir ve bu işlemci klasik dönme işlemcilerinden farklıdır. Spinlere karşılık gelen dönme işlemcilerinden eksik de olsa spin-1'e karşılık gelen işlemci bilinmekte, bunun dışındakilere karşılık gelen dönme işlemcileri bilinmemekte iken Curtright ve diğ. (2014) ve peşinden eklemeleri Curtright and Van Kortryk, (2014) tarafından sadece $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ bileşenleri trigonometrik polinomlar cinsinden tamamen cebirsel yöntemle teorik olarak bulunmuş ve yayınlanmıştır. Buna ek olarak Kocakoç (2014) tarafından aynı işlemciler bu çalışmada kullanılan sayısal yöntemle de açık olarak bulunmuş ve teorik sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Ancak kuantum mekanikte sadece spinlerin bileşenleri değil yüksek mertebeden spinler de tanımlanmakta ve etkileşmeleri açıklamakta kullanılmaktadır. Curtright ve diğ. tarafından ortaya konulan yöntemle $\hat{S}_x^2, \hat{S}_y^2, \hat{S}_z^2, \hat{S}^2$ veya $\hat{S}_{1x}^2 \hat{S}_{2y}^2$ gibi çapraz çarpımlara karşılık gelen dönme işlemcileri bulunamaz. Yüksek mertebeden spinlere ve çapraz çarpımlara karşılık gelen dönme işlemcileri Kocakoç (2014) ve bu çalışmada kullanılan sayısal yöntemle bulunabilmektedir.

5.1. Dönme İşlemcilerinin Elde Edilmesi Üzerine

Bu çalışmada dönme işlemcileri bulunan arttıran ve eksilten spin işlemcilerine, S_+ ve S_- , karşılık gelen dönme işlemcilerinin tanımı

$$\hat{S}_+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y, \quad \hat{S}_- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y \quad (5.1)$$

olmasına rağmen S_+ ve S_- işlemcilerine karşılık gelen dönme işlemcileri benzer tanımla bulunmaz,

$$\hat{R}_+ \neq \hat{R}_x + i\hat{R}_y, \quad \hat{R}_- \neq \hat{R}_x - i\hat{R}_y \quad (5.2)$$

Bu eşitsizliğin nedeni spin işlemcisi ile dönme işlemcisi arasındaki ilişki doğrusal olmamasıdır. Örnek olarak spin-1/2 için spin ve dönme işlemcileri Denklem 5.1 uygulanırsa durum daha açık görünür. Spin-1/2'nin \hat{R}_x ve \hat{R}_y işlemcileri

$$\hat{R}_x = \begin{bmatrix} c & iS \\ iS & c \end{bmatrix}, \quad \hat{R}_y = \begin{bmatrix} c & S \\ -S & c \end{bmatrix}, \quad \begin{array}{l} c = \cos(\theta/2) \\ S = \sin(\theta/2) \end{array} \quad (5.3)$$

Bu dönme işlemcileri,

$$\begin{aligned}\hat{R}_x + i\hat{R}_y &= \begin{bmatrix} c & is \\ is & c \end{bmatrix} + i \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c(1+i) & 2is \\ 0 & c(1+i) \end{bmatrix} \\ \hat{R}_x - i\hat{R}_y &= \begin{bmatrix} c & is \\ is & c \end{bmatrix} - i \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c(1-i) & 0 \\ 2is & c(1-i) \end{bmatrix}\end{aligned}\quad (5.4)$$

Bu çalışmada sayısal yöntemle bulunan \hat{R}_+ ve \hat{R}_- işlemcileri bunlardan oldukça farklıdır ve açıya doğrusal bağlı elemanlardan oluşmaktadır ve bu işlemcilerden farklıdır.

$$\hat{R}_+(\theta) = \begin{bmatrix} 1 & i\theta \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \hat{R}_-(\theta) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ i\theta & 1 \end{bmatrix}\quad (5.5)$$

Dolayısı ile, her bir işlemci ayrı ayrı bulunmalıdır. Diğer spinler için de bu eşitsizlik geçerlidir.

Bu tez çalışmasının diğer konusu olan \hat{S}^2 işlemcisine karşılık gelen \hat{R}^2 işlemcisinin de $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ bileşenleri ile herhangi bir ilişkisi yoktur. Bu durum yine basit spin-1/2 örneği ile iki farklı yoldan gösterilebilir. \hat{S}^2 işlemcisinin tanımı $\hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$ bu çalışmayla bağlantılı olarak iki farklı biçimde yapılır. Birinci yol, $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ işlemcilerine karşılık gelen $\hat{R}_x, \hat{R}_y, R_z$ işlemcilerinin karelerinin toplamı olarak alınmasıyla yapılır,

$$\hat{R}_x^{(2)} = \begin{bmatrix} c & is \\ is & c \end{bmatrix}^2 = \begin{bmatrix} c^2 - s^2 & 2ics \\ 2ics & c^2 - s^2 \end{bmatrix} \begin{matrix} c = \cos(\theta/2) \\ s = \sin(\theta/2) \end{matrix}\quad (5.6)$$

$$\hat{R}_y^{(2)} = \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix}^2 = \begin{bmatrix} c^2 - s^2 & 2cs \\ -2cs & c^2 - s^2 \end{bmatrix}\quad (5.7)$$

$$\hat{R}_z^{(2)} = \begin{bmatrix} c + is & 0 \\ 0 & c - is \end{bmatrix}^2 = \begin{bmatrix} c^2 - s^2 + 2ics & 0 \\ 0 & c^2 - s^2 - 2ics \end{bmatrix}\quad (5.8)$$

Not: $\hat{R}_x^{(2)}$, $\hat{R}_y^{(2)}$ ve $\hat{R}_z^{(2)}$ tanımlarının üst indislerinde bulunan (2) sayısı, bu tanımların $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ işlemcilerine karşılık gelen dönme işlemcileri olan $\hat{R}_x, \hat{R}_y, R_z$ işlemcilerinin kareleri olduğunu göstermek içindir. Bu işlemciler \hat{S}_x^2 , \hat{S}_y^2 ve \hat{S}_z^2 işlemcilerine karşılık gelen dönme işlemcilerinden farklıdır. Bu nedenle $\hat{R}^{(2)}$ tanımı kullanılmıştır.

Bu üç matrisin toplamı bu çalışmada bulunan \hat{R}^2 işlemcisine eşit değildir.

$$\hat{R}_x^2 + \hat{R}_y^2 + \hat{R}_z^2 = \begin{bmatrix} 3(c^2 - s^2) + 2ics & 2cs(1 + i) \\ 2cs(-1 + i) & 3(c^2 - s^2) + 2ics \end{bmatrix} \quad (5.9)$$

İkinci yol Kocakoç ve Tapramaz tarafından hesaplaması yapılan ve yayın aşamasında olan çalışmadan alınan ve \hat{S}_x^2 , \hat{S}_y^2 ve \hat{S}_z^2 işlemcilerine karşılık gelen $\hat{R}_x^{(2)}$, \hat{R}_y^2 ve \hat{R}_z^2 işlemcileriyle yapılabilir. Spin-1/2 için yapılan bu işlemciler

$$\hat{R}_x^2 = \hat{R}_y^2 = \hat{R}_z^2 = \begin{bmatrix} c + is & 0 \\ 0 & c + is \end{bmatrix} \begin{matrix} c = \cos(\theta/4) \\ s = \sin(\theta/4) \end{matrix} \quad (5.10)$$

$\hat{R}_x^2 = \hat{R}_y^2 = \hat{R}_z^2$ olarak bulunmuştur. Bu işlemcide ayrıca kosinüs ve sinüsün argümanının $\frac{\theta}{4} = \frac{1}{2} \frac{\theta}{2} = S \frac{1}{2}$ olduğu dikkat çekicidir ve bu ayrı bir çalışmadır. Bu üç işlemcinin toplamı olan

$$\hat{R}_x^2 + \hat{R}_y^2 + \hat{R}_z^2 = \begin{bmatrix} 3(c + is) & 0 \\ 0 & 3(c + is) \end{bmatrix} \begin{matrix} c = \cos(\theta/4) \\ s = \sin(\theta/4) \end{matrix} \quad (5.11)$$

olarak bulunur ki bu sonuç da $\hat{R}^{(2)}$ işlemcisinden farklıdır.

Bu sonuçlar, her bir spine ve yüksek mertebeden spinlere karşılık gelen dönme işlemcilerinin ayrı ayrı bulunması gereğini ve bu çalışmada izlenen sayısal yöntemin farklılığını ortaya koymaktadır.

5.2. Dönme İşlemcilerinin Etkileri Üzerine

Bu kesimde, çalışma konusu dönme işlemcileri \hat{R}_+ , \hat{R}_- ve \hat{R}^2 'nin spin durumları üzerine etkileri bazı örneklerle incelenecektir. Konunun anlaşılması için en küçük spin sistemi olan spin-1/2 sisteminin salt durumları alınsın,

$$\hat{R}_+|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 & i\theta \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{R}_+|1\rangle = \begin{bmatrix} 1 & i\theta \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} i\theta \\ 1 \end{bmatrix} \quad (5.12)$$

Görüldüğü gibi arttıran işlemci $|0\rangle$ durumunu değiştirmez, $|1\rangle$ durumunu kompleks, birimsel ve normal olmayan bir uzaya taşır. Eğer sonuç durum normalize edilirse,

$$\hat{R}_+|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{1 + \theta^2}} \begin{bmatrix} i\theta \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (\text{Büyük } \theta \text{ açılı için } |1\rangle \approx i \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}) \quad (5.13)$$

sonucu bulunur. Küçük açılarda durum kompleksliği sürdürürken açı büyüdüğünde $|1\rangle$ durumunu sanal $|0\rangle$ durumuna taşır (denklemden sağda).

Salt durumlara bu defa \hat{R}_- işlemcisi uygulanırsa,

$$\hat{R}_-|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ i\theta & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ i\theta \end{bmatrix}, \quad \hat{R}_-|1\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ i\theta & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (5.14)$$

sonucu bulunur ki bu defa $|0\rangle$ durumu normalize edilerek yukarıdaki sonuca ulaşılır, $|1\rangle$ durumu ise değişmez.

\hat{R}^2 işlemcisinin spin-1/2'nin salt durumlarına etkisi,

$$\hat{R}^2|0\rangle = (c + is) \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = (c + is) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \begin{matrix} c = \cos(3\theta/4) \\ s = \sin(3\theta/4) \end{matrix} \quad (5.15)$$

ve

$$\hat{R}^2|1\rangle = (c + is) \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = (c + is) \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \begin{matrix} c = \cos(3\theta/4) \\ s = \sin(3\theta/4) \end{matrix} \quad (5.16)$$

olacaktır. \hat{R}^2 işlemcisi her iki durumu da birimsel, normal ve kompleks bir uzaya taşır.

Aynı işlemler spin-1 sisteminin salt $|0\rangle$ durumuna uygulanırsa aşağıdaki sonuçlar bulunur;

$$\hat{R}_+|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 & i\sqrt{2}\theta & \theta^2 \\ 0 & 1 & i\sqrt{2}\theta \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{durum değişmez}) \quad (5.17)$$

$$\hat{R}_+|1\rangle = \begin{bmatrix} 1 & i\sqrt{2}\theta & \theta^2 \\ 0 & 1 & i\sqrt{2}\theta \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} i\sqrt{2}\theta \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (5.18)$$

\hat{R}_+ işlemcisi $|1\rangle$ durumunu kompleks, birimsel ve norma olmayan kompleks uzaya taşır. Normalize edilirse

$$\hat{R}_+|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\theta^2 + 1}} \begin{bmatrix} i\sqrt{2}\theta \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \left(\hat{R}_+|1\rangle \approx i \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \right) \quad (5.19)$$

olur ki büyük θ açılarında arttıran işlemciden beklendiği gibi $|1\rangle$ durumunu sanal $|0\rangle$ durumuna taşır, (sağdaki durum).

$$\hat{R}_+|2\rangle = \begin{bmatrix} 1 & i\sqrt{2}\theta & \theta^2 \\ 0 & 1 & i\sqrt{2}\theta \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \theta^2 \\ i\sqrt{2}\theta \\ 1 \end{bmatrix} \quad (5.20)$$

\hat{R}_+ işlemcisi $|2\rangle$ durumunu kompleks, birimsel ve norma olmayan kompleks uzaya taşır. Bu sonuç normalize edilirse,

$$\hat{R}_+|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{(\theta^2 + 1)^2}} \begin{bmatrix} \theta^2 \\ i\sqrt{2}\theta \\ 1 \end{bmatrix} \quad (5.21)$$

olacaktır. Küçük ve orta büyüklükteki açılarda kompleks uzaya taşırken, çok büyük açılarda $|0\rangle$ durumuna taşıyacaktır.

Benzer sonuçlar \hat{R}_- işlemcisi için de yapılabilir.

\hat{R}^2 işlemcisi salt spin-1 durumlarına uygulanırsa, her üç durum birimsel ve normal olan kompleks uzaya taşır,

$$\begin{aligned} \hat{R}^2|0\rangle &= (c + is) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \hat{R}^{(2)}|1\rangle = (c + is) \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\ \hat{R}^2|2\rangle &= (c + is) \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \begin{aligned} c &= \cos(2\theta) = \cos[S(S+1)\theta] \\ s &= \sin(2\theta) = \sin[S(S+1)\theta] \end{aligned} \end{aligned} \quad (5.22)$$

Buraya kadar yapılan örnekler diğer salt spin durumları için yapılabilir. Arttıran, eksiltlen işlemcilerle \hat{R}^2 işlemcisinin etkileri burada yapılanlarla benzer olacaktır.

6. ÖNERİLER

1. Çalışmada çeşitli kaynaklarda bulunabilen spin-1/2 için kuantum dönme işlemcilerine ilave olarak kaynaklarda bulunamayan 1, 3/2, 2, ve 5/2 spinlerinin arttıran, eksiltlen spin işlemcileri ile $\hat{S}^{(2)}$ işlemcisine karşılık gelen dönme işlemcilerinin analitik ifadeleri oluşturulmuştur.

2. Burada kullanılan sayısal yöntem yalnız spin işlemcilerine karşılık gelen dönme işlemcilerinin bulunması yanında yüksek mertebeden spin sistemlerine, karışık

ve apraz spin sistemleri gibi dipol veya kuadrupol etkileşmelerine de uygulanabilecek sayısal yöntemlerdir.

3. Bütün dönme işlemcilerinin sistemli uygulanması ve izlenmesiyle kuantum mekanikte kullanılacak mantık geçitleri de oluşturulabilir.

4. Pulsu manyetik rezonans spektroskopileri spin tabanlı olduğundan farklı spinlerin puls ile nasıl döndürülebileceğini gözleme imkanı vardır.

KAYNAKLAR

- Anonim, 2017. Bilimfili@bohringerstein.<https://bilimfili.com/kuantum-teorisine-genel-bir-bakis> (Erişim tarihi: 10.07.2020)
- Apaydın, F., 1991. Magnetik Rezonans, Temel ilkeleri, Deney Düzenekleri, Ölçüm Yöntemleri, Beytepe-Ankara, 600s.
- Arfken, G. B., Weber, H. J., Harris, F. E., 2013. Mathematical Methods for Physicists, Elsevier Publication.
- Aubert G.(2013). An alternative to Wigner d-matrices for rotating real spherical harmonics. AIP Advances 3, 062121–1, 062121–25. doi: 10.1063/1.4811853
- Ayabe, K., Sato, K., Nakazawa, S., Nishida, S., Sugisaki, K., Ise, T., Morita, Y., Toyota, K., Shiomi, D., Kitagawa, M., Suzuki, S., Okada, K., Takui, T., 2013. Pulsed Electron Spin Nutation Spectroscopy for Weakly Exchange-Coupled Multi Spin Molecular systems with Nuclear Hyperfine Couplings: A General Approach to Bi- and Triradicals and Determination of Their Spin Dipolar and Exchange Interactions, Molecular Physics 111 (18–19) 2767–2787.
- Balcı M. Nükleer Manyetik Rezonans Spektropisi. Metu Press, Ankara, 1-445: (2000).
- Barret, M. D., Chiaverfni, J., Schaetz, T., Britton, J., Itano, W. M., Jost, J. D., Knill, E., Langer, C., Leibfried, D., Ozerf, R., Wineland, D. J., 2004. Deterministic quantum teleportation of atomic qubits, Nature 428 737.
- Bell, J. 1964. On the Einstein, Podolski, Posen paradox, Physics 1 (3) 195-200. doi:10.1103/PhysicsPhysiqueFizika.1.195
- Bell, S. J., 1964. On the Einstein-Podolsky-Rosen paradox, Physics 1, 195-200.
- Bellac, M., 2006. A Short Introduction To Quantum Information and Computation (Fransızcadan tercüme), Cambridge University Press.
- Bennet, C. H. 1973. IBM journal of research and development, April 12, 1973, 525-532.
- Beşergil, 2019 <http://bilsenbesergil.blogspot.com/p/kuantum-elektrodinamik-kuantum.html>, (Erişim tarihi: 09.06.2021)
- Blanca M. A., Flórez M., Bermejo M. 1997. Evaluation of the rotation matrices in the basis of real spherical harmonics, Theochem. doi:10.1016/S0166-1280(97)00185-1
- Boas, M. L., 2006. Mathematical Methods for the Physical Sciences, Wiley and Sons.
- Bouwmeester, D., Wan, J. P., Mattle, K., Eibl, M., Weinfurter, H., Zeilinger, A., 1997. Experimental quantum telepor-station, Nature 390 575.
- Braun, S., Kalinowski, H.O. and Berger, S., 1998. 150 and More Basic NMR Experiments, Wiley-VCH, Weinheim, 596p.
- Cory, D. G., Fahmy, A. F., Havel, T. F., 1997. Ensemble quantum computing by NMR spectroscopy, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 94 1634.
- Curtright T. L., Fairlie D. B., Zachos, C. K. (2014). Compact Formula for Rotations as Spin Matrix Polynomials. SIGMA 10, 1–15. doi:10.3842/SIGMA.2014.084
- Curtright T.L., Van Kortryk T.S.(2014). On Rotations as Spin Matrix Polynomials.Mathematical Physics. 48,2,025202. doi: 10.1088/1751-8113/48/2/025202
- Çakmak, S., 2011. Bazı Endohedral Fullerenlerde Kuantum Bilgi İşleme ve Durum Tomografisinin İncelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Samsun, 299217.

- Dachsel H. (2006). Fast and accurate determination of the Wigner rotation matrices in the fast multipole method. *J. Chem.Phys.* 124, 144115–1 to 144115–6. doi: 10.1063/1.2194548
- Davies, E. R., 1974. A New ENDOR Technique, *Phys. Lett.*, 47A, 1.
- Duran, V., 2017. Bazı Çok Spinli Sistemlerde Kuantum Dolanıklık, Yüksek Lisans Tezi, Fizik Anabilim Dalı, YÖK Tez merkezi No: 468168.
- Einstein, A., Podolsky, B., Rosen, N., 1935. Can quantum mechanical description of physical reality be considered complete?, *Phys. Rev.* 47, 777.
- Einstein, A., Podolsky, B., Rosen, N., 1935. Can quantum mechanical description of physical reality be considered complete?, *Phys. Rev.* 47, 777.
- Feher, G., 1956. Observation of Nuclear Magnetic Resonance Via the Electron Spin Resonance Line, *Phys. Rev.*, 103, 834-836
- Feynman, R. P., Pines D. A., Hey J. G., 2000. Feynman Lectures on Computation, Westview Press.
- Feynman, R., 1986. Quantum Mechanical Computers, *Foundation of Physics*, 16(6) 507.
- Feynman, R., 1985. "Chapter 1". QED: The Strange Theory of Light and Matter. Princeton University Press. p. 6. ISBN978-0-691-12575-6.
- Gershenfeld, N. A., Chuang, I. L., 1997. Bulk Spin-Resonance Quantum Computation, *Science* Vol. 275, 5298, 350-356.
- Gimbutas Z., Greengard L. (2009). A fast and stable method for rotating spherical harmonic expansions. *J. Comput. Phys.* 228, 5621–5627. doi:10.1016/j.jcp.2009.05.014
- Gruska, J., 1999. Quantum Computing, McGraw-Hill Publishing Company, UK, 419
- Gün, A., 2011. SI ($S=3/2$, $I=1/2$ ve $3/2$) spin sistemlerinde kuantum dolanıklık ve kuantum iletişimdeki bazı uygulamaları, Doktora Tezi, Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Samsun, 299255.
- Jones, J. A., 2001. NMR Quantum Computation, *Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy* 38, 325-360.
- Jones, J. A., 2011. Quantum Computing with NMR, *Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy* 59, 91–120
- Kızıllırmak, H., 2020. Kuantum Hata Düzeltme, Yüksek Lisans Tezi, Ankara Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Yök Tez Merkezi No: 619001:
- Kocakoç, M., 2014. Kuantum Bilgi Teorisinde Dönme İşlemcileri ve EPR Tekniğinin Uygulanabilirliği, Ondokuz Mayıs Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, YÖK yez merkezi No: 377449.
- Kocakoç, M. ve Tapramaz, R., (2018). Some Transactions Made with Hadamard Gate in Qutrit Systems, *J. of New Results in Engineering and Natural Science*, No 8 pp. 6-10, <http://jrens.gop.edu.tr>
- Kocakoç, M. and Tapramaz R., 2020. The Quantum Mechanical Rotation Operators Corresponding to J_z^2 and J^2 For All Spins, 2. Hezarfen Uluslararası Fen, Matematik ve Mühendislik Bilimleri Kongresi, tam metin kitabı: www.hezarfenkongre.com
- Litt, A., Eliasmith, C., Kroon, F. W., Weinstein, S. And Thagard, P. 2006. *Cognitive science* 30, May-June 2006, 593-603.
- Malinovsky, V. S., Rudin S., 2012. Geometric Single-Qubit Gates for an Electron Spin in a Quantum Dot, *International Journal of Quantum Chemistry* 112, 3744– 3749.
- McMahon, D. 2008. Quantum computing. Explained John Wiley & Sons, Inc. Publication, 332, USA.

- Mermin, N. D. 1990. *Boojums All the way through: Communicating science in an prosaic age.* Cambridge University Press, 183-183, London.
- Messiah, A. 1967. *Quantum Mechanics*, North Holland Publishing Co.
- Mims, W. B., 1965. Pulsed ENDOR Exsperiment, *Proc. Roy. Soc.*, 283, 452.
- Morrison M. A., Parker G. A. (1987). A Guide to Rotations in Quantum Mechanics. *J. Aust. Phys.* 40, 465–498. doi:10.1071/PH870465
- Nakahara, M. ve Ohmi, T., 2008. *Quantum Computing, From Linear Algebra To Physical Realizations*, Taylor and Francis Books.
- Nakahara, M., Ota, Y., Rahimi, R., Kondo, Y., tada-Umezaki, M., 2007. *Molecular Realization of Quantum Computing*, World Scientific Publishing (Google boks : books.google.com.tr/books, isbn=9812838686).
- Neilsen, M. A., Knill, E., Laflamme, R., 1998. Complete Quantum Teleportation Using Nuclear Magnetic Resonance, *Letterstonature*, 396, 52-55.
- Nielsen, M. A. ve Chuang, I. L., 2010. *Quantum Computation and Quantum Information; 10th Anniversary Edition*, Cambridge University Press.
- Ocak, Dr. Mahir E. Ocak, 2018, TÜBİTAK Bilim ve Teknik Dergisi, https://bilimteknik.tubitak.gov.tr/system/files/44_50_kuantum_bilgisayar_haziran_2018.pdf
- Oliveira, I. S., Bonagamba, T. J., Sarthaur, S. R., Freitas, J. C. C., deAzevedo, E. R., 2007. *NMR Quantum Information Processing*, Elsevier Publishing. <https://doi.org/10.1039/B103231N>
- Ramanathan, C., Boulant, N., Chen, Z., Cory, DG. Chuang, I ve Steffen, S., 2004. NMR Quantum Information Processing, *Quantum Information Processing* 3(1-5), 15-44
- Ruiz-Molina, D., Christou, C. ve Hendrickson, D. N., 2000. Single Molecule Magnets, *Mol. Cryst. and Liquid Cryst.*, 343, 17–27.
- Rule, G. S. ve Hitchens, T. K., 2006. *Fundamentals of Protein NMR Spectroscopy (Focus On Structural Biology, Volume 5, Editor Rob Kaptein)*, Springer, Netherlands.
- Sakurai J. J., Napolitano J. J. 2011. *Modern Quantum Mechanics*. United States of America: Cambridge University Press.
- Sato, K., Rahimi, R., Mori, N., Nishida, S., Toyota, K., Shiomi, D., Morita, Y., Ueda, A., Suzuki, S., Furukawa, K., Nakamura, T., Kitagawa, M., Nakasuji, K., Nakahara, M., Hara, H., Carl, P., Höfer, P., Takui, T., 2007. Implementation of moleculer spin quantum computing by pulsed ENDOR technique: Direct observation of quantum entanglement and spinor, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 40(2) 363–366.
- Schumacher, B. and Westmoreland, M. D.1997. Sending classical information via noisy quantum channels. *Phys. Rev. A*, 56:131-138.
- Schweiger, A. ve Jeschke, G., 2001. *Principles of Pulse Electron Paramagnetic Resonance*, Oxford University Press, New York, 578p. (<https://doi.org/10.1002/jctb.936>)
- Spiller, T. P. 2003. *Materials Today*, January 2003, 30-36.
- Şaka, İ., 2007. Çarpım İşlemci Teorisinin Spin-1 İçeren Sistemlere Genelleştirilmesi ve Bazı Çoklu Kuantum-NMR deneylerine Uygulamaları, Doktora Tezi, Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Samsun, 222388.
- Tabak, 2009 <http://www.library.hacettepe.edu.tr/books/pvfnst.html>

- Takahiro, M., Katori, M. ve Konno, M., 2007. Wigner Formula for Rotation Matrices and Quantum Walks, Phys. Rev. A76 1-15.
- Toyran, M. 2003. Kuantum Triptografi. Yüksek lisans tezi. İstanbul Teknik Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, 176, İstanbul.
- Turgut, S. 2019. Bilim ve ütopya, Mart 2019, 31-35.
- Turing, A. M. 1937. Proceedings of the London mathematical society, November 1937, 230-264.
- Türkpençe, D., 2007. NMR kuantum bilgisayarlarında iki kutritlik bazı mantık kapılarının oluşturulması ve uygulamaları, Yüksek Lisans Tezi, Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Samsun, Yök tez Merkezi: 185643.
- Türkpençe, D., 2013. Sıvı hal NMR kuantum bilgisayarıyla bazı sistemlerin kuantum simülasyonu, Doktora Tezi, Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Samsun, Yök tez merkezi: 341513.
- Üstün, T., 2011. Kuantum Nokta Temelli Bellek Yapılarda Kuantum Noktalarının Elektronik Yapısının Derin Seviye Geçiş Spektroskopisi İle Belirlenmesi. Yüksek Lisans Tezi, Ankara Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 299592.
- Wigner, E. P. 1959. Group theory and its applications to the quantum mechanics of atomic spectra. Los Alamos. New Mexico: Academic Press.
- Yadav, B. C. ve Kumar, R., 2008. Structure, properties and applications of fullerenes, International Journal of Nanotechnology and Applications 2(1) 15–24.

ÖZ GEÇMİŞ

Didem ÇİLENGİROĞLU, İstanbul Erkek Lisesi'ni bitirdikten sonra Boğaziçi Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü'nden 2004 yılında mezun oldu. Mezuniyetinden bu yana farklı sektörlerde çalıştıktan sonra 2014 yılından beri Fizik Öğretmeni olarak görev yapan Didem ÇİLENGİROĞLU, iyi derecede İngilizce ve Almanca bilmektedir. (Haziran 2021)

İletişim Bilgileri

E mail : 15210747@stu.omu.edu.tr

ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-8497-0404>