

TC
ONDOKUZ MAYIS ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

DOKTORA TEZİ

BAZI ÇOKLU SPİN SİSTEMLERİNDE KUANTUM
TERMODİNAMİK ÇEVİRİMLERİN KUANTUM BİLGİ İŞLEME
AÇISINDAN İNCELENMESİ

SELÇUK ÇAKMAK

FİZİK ANABİLİM DALI

SAMSUN
2016

Her hakkı saklıdır.

TEZ ONAYI

Selçuk Çakmak tarafından hazırlanan "Bazı çoklu spin sistemlerinde kuantum termodinamik çevrimlerin kuantum bilgi işleme açısından incelenmesi" adlı tez çalışması 07/10/2016 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından Ondokuz Mayıs Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı'nda **Doktora Tezi** olarak kabul edilmiştir.

Danışman Prof. Dr. Azmi GENÇTEN
Fizik Anabilim Dalı

İkinci Danışman Prof. Dr. Özgür E. MÜSTECAPLIOĞLU
Koç Üniversitesi
Fizik Anabilim Dalı

Jüri Üyeleri

Başkan Prof. Dr. Hümeysra PAŞAOĞLU
Ondokuz Mayıs Üniversitesi
Fizik Anabilim Dalı

Üye Prof. Dr. Azmi GENÇTEN
Ondokuz Mayıs Üniversitesi
Fizik Anabilim Dalı

Üye Doç. Dr. Erdal KILIÇ
Ondokuz Mayıs Üniversitesi
Bilgisayar Mühendisliği Anabilim Dalı

Üye Doç. Dr. Fatih ÖZAYDIN
Işık Üniversitesi
Enformasyon Teknolojileri Anabilim Dalı

Üye Yrd. Doç. Dr. Aşkın KOCABAŞ
Koç Üniversitesi
Fizik Anabilim Dalı

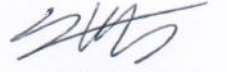
Yukarıdaki sonucu onaylarım. .../.../2016

Prof. Dr. Bahtiyar ÖZTÜRK
Enstitü Müdürü

ETİK BEYAN

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

06 Ekim 2016



Selçuk Çakmak

ÖZET

Doktora Tezi

BAZI ÇOKLU SPİN SİSTEMLERİNDE KUANTUM THERMODİNAMİK ÇEVİRİMLERİN KUANTUM BİLGİ İŞLEME AÇISINDAN İNCELENMESİ

Selçuk Çakmak

Ondokuz Mayıs Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Azmi Gençten

İkinci Danışman: Prof. Dr. Özgür E. Müstecaplıoğlu

Bu tez çalışması termodinamiksel süreçlerin ve Otto ısı motorunun kuantum mekaniksel versiyonları ve bunların kuantum mekaniksel sistemlere uygulanmasını içeren dört çalışmadan oluşmaktadır. İlk olarak iki spinli LMG model üzerinde çeşitli durumda iş üretimi ve verimlilik üzerinde anizotropinin ve çiftlenimin etkilerine bakıldı. Ortak yapılan işin iki spinin ayrı ayrı yaptığı işin toplamından fazla olabileceği gösterildi. İkinci çalışmada adyabatik süreçte transfer manyetik alan tarafından sürülen, basit ve deneysel olarak ulaşılabilir spin modeli üzerinde tamamen kuantum mekaniksel bir olay olan içsel sürtünme konusu incelendi. İçsel sürtünme üzerinde toplam dönüşüm zamanının ve farklı puls kontrol şemalarının rolü analiz edilerek içsel sürtünmenin monoton olmayan karakteri toplam protokol zamanının fonksiyonu olarak gösterildi. Üçüncü çalışmada ise farklı kontrol alan profillerinde kuantum Otto çevrimin adyabatik kollarındaki toplam izinli zamanın iş üretimi ve termal verimlilik üzerindeki rolü incelendi. İçsel sürtünme, fazladan entropi üretimi ile karakterize edildi ve sonlu-zamanlı üniter süreç sonundaki durumun, sonsuz uzun üniter süreç sonundaki duruma olan yakınlığı çalışılarak kuantum bağlı entropi yoluyla nicel olarak belirlendi. İdeal olmayan, sonlu-zamanlı adyabatik dönüşümlerin kuantum ısı motorunun iş üretimini ve termal verimliliğini negatif etkilediği bulundu. Neredeyse sürtünmesiz adyabatik dönüşümlerin çok az entropi üretimi ile kısa adyabatik zamanda elde edilebileceği gösterildi. Dördüncü çalışmada da Deneysel olarak ulaşılabilir kuantum spin modeli için NMR'da algoritmik soğutma tekniği kullanılarak, Otto çevrimindeki kuantum termodinamik süreçler açıklandı.

Ekim 2016, 107 Sayfa

Anahtar Kelimeler: LMG Modeli, Kuantum Otto Motoru, İçsel Sürtünme, Algoritmik Soğutma, Kuantum Termodinamik

ABSTRACT

Doctoral Dissertation

EXAMINATION OF QUANTUM THERMODYNAMIC CYCLES IN TERMS OF QUANTUM INFORMATION PROCESSING IN SOME MULTIPLE SPIN SYSTEMS

Selçuk Çakmak

Ondokuz Mayıs University
Graduate School of Sciences
Department of Physics

Supervisor: Prof. Dr. Azmi Gençten

Co-Supervisor: Prof. Dr. Özgür E. Müstecaplıoğlu

In this thesis, there exist four studies which consist of quantum mechanical versions of thermodynamic processes and Otto cycle; and their applications to quantum mechanical systems. First the effects of anisotropy and coupling strength on the work and the efficiency for two spin LMG model are investigated. It is shown that cooperative work can be greater than the total work done by the two spins separately. In the second, the concept of internal friction, which is a fully quantum mechanical phenomena, is investigated in a simple, experimentally accessible quantum system in which a spin is driven by a transverse magnetic field in a quantum adiabatic process. By analyzing the role of total transformation time and the different pulse control schemes on the internal friction, the non-monotone character of the internal friction as a function of the total protocol time is shown. In the third study, the role of total allocated time to the adiabatic branches of the Otto cycle, generated by different control field profiles, on the extractable work and the thermal efficiency are analyzed in detail. The internal friction is characterized by the excess entropy production and quantitatively determined by studying the closeness of an actual unitary process to an infinitely long one via quantum relative entropy. It is found that the non-ideal, finite-time adiabatic transformations negatively affect the work output and the thermal efficiency of the quantum heat engine. It is also found that almost frictionless adiabatic transformations with small entropy production can be obtained in a short adiabatic time. In the fourth study, quantum thermodynamic processes in Otto cycle are explained by using algorithmic cooling technique in NMR for the applications of experimentally accessible quantum spin model.

October 2016, 107 Pages

Key Words: LMG Model, Quantum Otto engine, Internal friction, Algorithmic Cooling, Quantum thermodynamic

ÖNSÖZ VE TEŞEKKÜR

Bu tez çalışmasında, bazı spin sistemleri üzerinde kuantum termodinamik süreçler ve kuantum Otto ısı motoru uygulamaları üzerinde durulmuştur. Adyabak süreçlerdeki ileri-geri üniter dönüşümlerde sistemde meydana gelen kayıplar açıklanmıştır.

Tez süreci boyunca her türlü bilgi, tecrübe ve desteklerini benimle paylaşan danışmalarım Prof. Dr. Azmi Gençten ve Prof. Dr. Özgür Müstecaplıođlu'na sonsuz teşekkür ve şükranlarımı sunarım. Yine bu süreçte yardımlarını benden esirgemeyen değerli arkadaşım Dr. Ferdi Altıntaş'a teşekkür ederim. Ayrıca çeşitli kongre gibi etkinliklere katılmama ve çalışmalarım için teknik altyapı oluşturmama maddi imkan sağlayan Lockheed Martin Şirketi ve Koç Üniversitesi ortak proje işbirliğine teşekkür ederim. Bunun yanında doktora sürecim boyunca imkan sağlayan hocalarım ve yöneticilerime saygılarımı iletirim.

Son olarak benden hiç bir emeđini fedakarlığını esirgemen kıymetli aileme en içten duygularımı sunarım. Doktora tez çalışmamı değerli ağabeyim Evren Çakmak'a ithaf ediyorum.

Ekim 2016, Samsun

Selçuk Çakmak

İÇİNDEKİLER DİZİNİ

| | |
|--|-----|
| ÖZET | i |
| ABSTRACT | ii |
| ÖNSÖZ VE TEŞEKKÜR | iii |
| İÇİNDEKİLER DİZİNİ | iv |
| SİMGELER VE KISALTMALAR | vi |
| ŞEKİLLER DİZİNİ | vii |
| 1. GİRİŞ | 1 |
| 2. KURAMSAL TEMELLER | 9 |
| 2.1. Kuantum Bilgi İşleme | 9 |
| 2.1.1. Spin-1/2 döndürme | 10 |
| 2.1.2. Bazı kuantum mantık kapıları | 10 |
| 2.2. Kuantum Mekaniksel Bilgiler | 12 |
| 2.2.1. Yoğunluk işlemcisi | 12 |
| 2.2.2. Dirac gösterimi | 13 |
| 2.2.3. Kuantum bit termodinamiği | 13 |
| 2.2.4. Termal kübit ile ışık ve ısı | 14 |
| 2.2.5. Zamana bağlı schrödinger denklemi | 15 |
| 2.2.6. İşlemcilerin gelişimi ve beklenen değer | 15 |
| 2.3. Kuantum Termodinamik | 15 |
| 2.3.1. Kuantum entropi ve sıcaklık | 16 |
| 2.3.2. Kuantum termodinamik süreçler | 17 |
| 2.3.2.1. Kuantum izotermal süreç | 18 |
| 2.3.2.2. Kuantum izokorik süreç | 18 |
| 2.3.2.3. Kuantum adyabatik süreç | 19 |
| 2.3.3. Kuantum otto çevrimi | 19 |
| 2.3.4. İki seviyeli sistemlerde kuantum Otto çevrimi: kübit işi | 21 |
| 2.4. Sistem İçi Sürtünme Etkileri | 23 |
| 2.4.1. Kuantum ve termodinamik adyabatik şartlar ve kuantum sürtünme | 23 |
| 2.4.2. Zamanla gelişim ve üniter dinamik | 25 |
| 2.4.3. Kapalı kuantum sistemlerinde zamanla gelişim | 25 |
| 2.4.4. Açık kuantum sistemlerinde zamanla gelişim | 27 |
| 2.5. Nükleer Manyetik Rezonans | 28 |
| 2.5.1. Nükleer spinlerin durağan manyetik alanla etkileşmesi | 29 |
| 2.5.2. Nükleer spinlerin değişen manyetik alanla etkileşmesi | 30 |
| 2.5.3. Yapısal etkiler | 31 |
| 2.5.4. Başlangıç durumu | 31 |
| 3. MATERYAL VE YÖNTEM | 33 |
| 3.1. Kuantum Durumları Arasında İlişki-Ölçüm Yöntemleri | 33 |
| 3.1.1. İki kuantum durumu arasında fidelity ölçümü | 33 |
| 3.1.2. Kuantum bağlı entropi | 33 |
| 3.2. Algoritmik Soğutma | 34 |
| 3.2.1. Polarizasyon ve termal denge | 35 |
| 3.2.2. Partner paylaşma algoritması | 36 |

| | |
|--|-----|
| 3.3. Termal Dengelenme | 38 |
| 3.3.1. Kübit termalizasyonu | 38 |
| 4. BULGULAR VE TARTIŞMA | 41 |
| 4.1. Kuantum Otto Çevriminde Lipkin-Meshkov-Glick Modelinin İş Kaynağı Olarak İncelenmesi | 41 |
| 4.1.1. Lipkin-Meshkov-Glick modeli | 42 |
| 4.1.2. Lipkin-Meshkov-Glick modeli üzerinde kuantum Otto çevriminin uygulanması | 44 |
| 4.1.3. Yapılan analizler | 46 |
| 4.1.3.1. Durum i): $h_1 \rightarrow h_2 \rightarrow h_1$ ve $J_1 = J_2 = J$ | 46 |
| 4.1.3.2. Durum ii): $J_1 \rightarrow J_2 \rightarrow J_1$ ve $h_1 = h_2 = h$ | 51 |
| 4.1.3.3. Durum iii): $J_1/h_1 = J_2/h_2 = r$ | 56 |
| 4.2. Sonlu-Zamanlı Üniter Bir Protokolde Tersinmezlik ve İçsel Sürtünme Kavramının İncelenmesi | 58 |
| 4.2.1. Tersinmezlik ve içsel sürtünmenin analizi | 60 |
| 4.3. Kuantum Otto Çevriminde Keyfi Spin İçin Geri Alınmaz İş ve İçsel Sürtünmenin İncelenmesi | 68 |
| 4.3.1. Üzerinde çalışılan spin modeli | 68 |
| 4.3.2. Kuantum Otto çevriminin uygulanması | 69 |
| 4.3.3. Adyabatik kollarda entropi üretimi | 71 |
| 4.3.4. İş ve verimlilik analizi | 72 |
| 4.3.5. İçsel sürtünme kayıplarının incelenmesi | 76 |
| 4.4. NMR Uyumlu Model Önerisi: Algoritmik Soğutmalı Kuantum Isı Motoru | 81 |
| 4.4.1. Kuantum Otto çevrimi süreçlerinin uygulanması | 82 |
| 4.4.2. Kuantum Otto çevriminde hedef kübit'in yaptığı işin hesaplanması | 86 |
| 5. SONUÇ VE ÖNERİLER | 93 |
| 5.1. Sonuçlar | 93 |
| 5.2. Öneriler | 95 |
| KAYNAKLAR | 97 |
| ÖZGEÇMİŞ | 109 |

SİMGELER VE KISALTMALAR

SİMGELER

| | |
|----------|------------------------|
| η | Verimlilik |
| γ | Anizotropi |
| H | Hamiltonyen |
| J | Çiftlenim sabiti |
| Q | Isı |
| ρ | Yoğunluk Matrisi |
| S | Entropi |
| τ | Toplam adyabatik zaman |
| W | İş |

KISALTMALAR

| | |
|-------|------------------------------|
| CCNOT | Kontrol-Kontrol-Değil Kapısı |
| CNOT | Kontrol-Değil Kapısı |
| CSWAP | Kontrol-Değiş-Tokuş Kapısı |
| LMG | Lipkin-Meshkov-Glick |
| NMR | Nükleer Manyetik Rezonans |
| PPA | Partner Paylaşma Algoritması |
| SWAP | Değiş-Tokuş Kapısı |

ŞEKİLLER DİZİNİ

| | | |
|------------|---|----|
| Şekil 2.1. | Bloch küresi, iki seviyeli kuantum sisteminin geometrik temsili . | 10 |
| Şekil 2.2. | Kuantum Otto döngüsü, enerji ve olasılık değişimleri | 20 |
| Şekil 2.3. | a) Dışarıdan manyetik alan uygulanmazken ($B = 0$) ve uygulanırken ($B = B_0\hat{z}$) spinlerin (proton) yönelimleri. b) Belirli bir durağan manyetik alan altında spinlerin enerji seviyelerine ($ 0\rangle$ taban seviyesini, $ 1\rangle$ ise uyarılmış seviyeyi temsil eder) dağılımları | 30 |
| Şekil 3.1. | PPA tekniği için önce hesaplama kubitleri üzerine entropi sıkıştırma işlemi kuantum bilgi işleme teknikleriyle uygulanır. Yenileme (Yeniden Kurma) kubitlerine doğru yönlendirilen entropi bu kubitler aracılığıyla ısı-rezervine atılır | 37 |
| Şekil 3.2. | σ_z işlemcisinin zamana bağlı beklenen değeri $\langle\sigma_z\rangle = Tr(\sigma_z\rho)$ (Ana Grafik). Zamana bağlı yoğunluk matrisinin ρ , termal denge yoğunluk matrisine ρ_{th} göre Fidelity $F(\rho_{th}, \rho)$ ölçümü (İç Grafik). ρ , başlangıç durumu $ 0\rangle$ olarak alınan sistem için master eşitliğinin gelişimi ile $B_0 = 0.5$, $B_1 = 0.5$, $\gamma = 0.05$ ve $T = 2.0$ parametreleri için belirlendi | 39 |
| Şekil 4.1. | (a) Üretilen işin W ve (b) verimliliğin η çiftlenim büyüklüğünün fonksiyonu olarak J , $T_1 = 1.0$, $T_2 = 0.5$, $h_1 = 0.50$, $h_2 = 0.25$ ve $\gamma = -1.0, -0.5, -0.25, 0.0, 0.25$ parametreleri altında değişimi. İçteki grafikler (a) maksimum iş çıkışının ve (b) maksimum verimliliğin γ 'ya bağlılığını tüm γ aralığı γ ($-1 \leq \gamma \leq 1$) için göstermektedir. Yukarıda alınan parametreler için Carnot verimliliği $\eta_c = 1 - T_2/T_1 = 0.5$ 'dir . . | 48 |
| Şekil 4.2. | Enerji seviyelerinin E_n (Denklem (4.3)) manyetik alanın h fonksiyonu olarak değişimi. $J = 2$ için (a) $\gamma = 0$ ve (b) $\gamma = 0.4$. | 49 |
| Şekil 4.3. | (a) Manyetik alanının h_2 fonksiyonu olarak iş üretimi W ve (b) η 'nın değişimi. Sistemin parametreleri $T_1 = 0.15$, $T_2 = 0.1$, $h_1 = 0.1$, $J = 2.0$ ve $\gamma = 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$ olarak alınmıştır. İçteki grafikler $h_2 > h_1$ olduğu bölgede (a) maksimum iş üretimi W_m ve (b) maksimum verimliliğin η_m γ 'ya göre değişimini göstermektedir. Yukarıda alınan parametreler için Carnot verimliliği $\eta_c = 1 - T_2/T_1 = 1/3$ 'dir | 50 |

- Şekil 4.4. (a) Manyetik alanının h fonksiyonu olarak iş üretimi W ve (b) verimliliğin η 'nın değişimi. Sistemin parametreleri $T_1 = 1.0$, $T_2 = 0.5$, $J_1 = 2.0$, $J_2 = 1.0$ ve $\gamma = -1.0, -0.5, -0.25, 0.0, 0.25$ olarak alınmıştır. İçteki grafikler anizotropinin γ tam aralığı ($-1 \leq \gamma \leq 1$) göz önüne alınarak, (a) maksimum iş üretimi W_m ve (b) maksimum verimliliğin η_m γ 'ya göre değişimini göstermektedir. Yukarıda alınan parametreler için Carnot verimliliği $\eta_c = 1 - T_2/T_1 = 0.5$ 'dir 53
- Şekil 4.5. (a) Çiftlenim büyüklüğünün J_2 fonksiyonu olarak iş üretimi ve (b) verimliliğin değişimi. Sistemin parametreleri $T_1 = 0.15$, $T_2 = 0.1$, $h = 1.0$, $J_1 = 1.0$ ve $\gamma = 0.0, 0.25, 0.50, 0.75, 1.0$ olarak alınmıştır. İçteki grafikler $J_2 > J_1$ olduğu bölgede (a) maksimum iş üretimi W_m ve (b) maksimum verimliliğin η_m γ 'ya göre değişimini göstermektedir. Yukarıdaki parametreler için Carnot verimliliği $\eta_c = 1 - T_2/T_1 = 1/3$ 'dir 54
- Şekil 4.6. $\gamma = 0.4$ için (a) $h = 0$ ve (b) $h = 1$ için çiftlenim büyüklüğünün J 'nin fonksiyonu olarak enerji seviyelerinin dağılımı E_n (Denklem (4.3)) 55
- Şekil 4.7. Bağlı çiftlenim büyüklüğüne karşı W/w_q oranının $T_1 = 1.0$, $T_2 = 0.50$, $h_1 = 0.50$, $h_2 = 0.30$, $J_1 = rh_1$, $J_2 = rh_2$ ve $\gamma = -1.0, -0.5, 0.0, 0.5, 1.0$ parametrelerine göre değişimi. İçteki grafik, w_q ya bölünmüş maksimum iş çıkışı üzerindeki anizotropi γ efektlerini gösterir. Yukarıda alınan parametreler için ısı motorunun termal verimliliği ve klasik Carnot verimliliği sırasıyla $\eta = 1 - h_2/h_1 = 0.4$ ve $\eta_c = 1 - T_2/T_1 = 0.5$ 'dir 58
- Şekil 4.8. (a) İleri üniter protokolün ve (b) ardından geri üniter protokolün şematik gösterimi. Burada ρ_α ($\alpha = 0, 1, 2$) ve H_α ($\alpha = 1, 2$) protokollerin terminal noktalarındaki yoğunluk matrisi ve Hamiltonyenidir 62
- Şekil 4.9. Başlangıç termal denge durumu ρ_0 ve geri protokolün sonundaki ρ_2 yoğunluk matrisleri arasındaki Kuantum bağlı entropi $\beta^{-1}S(\rho_2||\rho_0)$ toplam izinli protokol zamanının (τ) fonksiyonu olarak $B_0 = B_1 = 0.5$, $B_2 = 0.05$ ve $\beta = 1$ parametrelili için verilmiştir. Üniter dönüşümler dört farklı sürücü pulslar tarafından üretilmiştir. Çizilen grafiğin termodinamiksel yorumu denklem (4.10)'da verilmiştir 64
- Şekil 4.10. $\tau = 20$ için Şekil 4.9 de verilen ileri-geri protokolde Bloch vektörünün izlediği yol. Kırmızı-üçgen çizgi ileri protokoldeki zamanla gelişimi gösterirken, yeşil-daire çizgi geri protokolde izlenen yolu gösterir. Alt figürler, (a) sinüzoidal, (b) $n = 1$ (c)2 (d) $1/2$ olarak etiketlenen itme pulsları için çizdirilmiştir. İleri-geri üniter protokollerde Bloch vektörünün uzunluğu değişmez kalır 66

- Şekil 4.11. Enerji seviyeleri arasındaki farkın zamanla gelişimi $\Delta E = \sqrt{B_0^2 + B(t)^2}$, ileri dönüşüm protokolünde $2t/\tau$ 'nin fonksiyonu olarak Şekil 4.13'de verilen parametreler ve göz önüne alınan sürücü pulslar için çizdirilmiştir. $t = \tau/2$ ye göre alınan ayna simetrisi ve dönme simetrisi enerji aralığının geri protokoldeki zamanla gelişimini verir 67
- Şekil 4.12. (a) Çevrimde elde edilen ışın ve (b) termal verimliliğin toplam adyabatik zamana τ karşı, spin-1/2 ve $B_0 = B_1 = 0.5$, $B_2 = 0.05$, $T_1 = 2$ ve $T_2 = 1$ parametreleri için değişimi. Adyabatik evreler dört farklı sürücü pulslar tarafından üretilmiştir. (b)'deki iç grafik, adyabatik kollardaki toplam entropi üretimini τ 'ya karşı gösterir. (a)'daki iç grafik ise $W = 0$ olduğu bölgenin büyütülmüş halidir 73
- Şekil 4.13. (a) Çevrimde elde edilen ışın ve (b) termal verimliliğin toplam adyabatik zamana τ karşı, spin- $I = 1/2, 1, 3/2, 2$ ve $B_0 = B_1 = 0.5$, $B_2 = 0.05$, $T_1 = 2$ ve $T_2 = 1$ parametreleri için değişimi. Bu şekilde, sadece sinüzoidal puls adyabatik süreçleri üreten sürücü puls olarak göz önüne alındı. İçteki grafik (a) ışık çıkışı ve toplam entropi üretimi arasındaki ortak ilişkiyi gösterir 77
- Şekil 4.14. Toplam adyabatik zamanın τ fonksiyonu olarak, içsel sürtünmeden kaynaklanan toplam fazladan enerji (W_{fric}) (a) Şekil 4.12 ve (b) Şekil 4.13 de verilen parametreler için görülmektedir. İç grafik (a)'da sonlu zamanda eşevrelilik üretimini gösterir. Spin-1/2 için adyabatik genişleme evresinde τ 'nin fonksiyonu olarak $C = \left| \langle \epsilon_1^{(f)} | \rho_\tau | \epsilon_2^{(f)} \rangle \right|$ ifadesi verilmiştir 80
- Şekil 4.15. (a) $CDCL_3$ (chloroform-d) çözeltisi içerisinde, $^{13}C_2$ TCE paramanyetik ajanıyla $Cr(acac)_3$. (b) Rezonans frekansları ve J çiftlenim değerleri, tabloda sırasıyla köşegen ve köşegen dışı elemanlarda verilmiştir (Atia vd, 2016; Brassard vd, 2014). $C1$, $C2$ ve H için T_1 durulma zamanları sırasıyla 3.5s, 43s ve 20s'dir (Brassard vd, 2014) 81
- Şekil 4.16. Algoritmik soğutma tekniğiyle Kuantum Otto çevrimi 83
- Şekil 4.17. 3 kubitlik Partner Paylaşma Algoritması (PPA)'nın şematik devre gösterimi. $|T\rangle$, $|S\rangle$ ve $|R\rangle$ sırasıyla hedef, yardımcı ve yeniden kurma kubitleridir. R işlemi ile, yeniden kurma kubitinin ısı-rezervindeki kubit ile yer değiştirilerek yenilenmesi temsil edilmektedir. PPA'da *başlangıç adımı* bir kez uygulanırken, *teklanacak adım* belirli bir sayıda tekrarlanır . . . 85

Şekil 4.18. PPA'nın tekrarlanması sonucunda hedef (kırmızı-düz), yardımcı (yeşil-kesikli), ve yenileme (mavi-kesikli noktalı) kubitlerinin polarizasyonlarının kusursuz uygulanan kuantum mantık kapıları göz önüne alınarak hesaplanması. Siyah-kesikli çizgi Shannon'un limitini göstermektedir. Hedef ($C1$) kubitinin polarizasyonu bu limiti aşarken, yardımcı ($C2$) ve yenileme (H) kubitleri aynı polarizasyona sahiptirler ve limitin altında kalırlar 90

Şekil 4.19. PPA'nın tekrarlanma sayısı ile kuantum Otto motorunun ürettiği işin W değişimi (Kırmızı-düz çizgi). Aynı parametreler için kubitinin yaptığı iş (Siyah-kesikli çizgi). İçteki grafikte ise algoritmanın iterasyon sayısı ile hedef kubitinin sıcaklığının (T_{Karbon}) değişimi 91



1. GİRİŞ

Üç seviyeli mikro maser ısı-motoru olarak tanımlandığından beri, kuantum ısı motorları son zamanlarda oldukça ilgi çekti (Scovil, 1959; Quan vd, 2007a; Quan, 2009; Kieu, 2004; Kieu, 2006; Dillenschneider & Lutz, 2009; Scully vd, 2003; Hardal & Müstecaplıođlu, 2015; Huang vd, 2014a; Quan vd, 2005; Lin & Chen, 2003; Altintas vd, 2014; Thomas & Johal, 2011; Zhang, 2008; Huang vd, 2013a; Feldmann & Kosloff, 2004; Feldmann & Kosloff, 2003; Huang vd, 2013b; Henrich vd, 2007; Zhang vd, 2007; Thomas & Johal, 2014; Huang vd, 2012; Wu vd, 2006; Ivanchenko, 2015; Wang vd, 2012a; He vd, 2012a; Huang vd, 2014b; Wang vd, 2009; Hubner vd, 2014; Azimi vd, 2014; Albayrak, 2013; He vd, 2012b; Altintas & Müstecaplıođlu, 2015; Roßnagel vd, 2014; Abah vd, 2012; Fialko & Hallwood, 2012; Zhang vd, 2014; Sothmann & Büttiker, 2012; Quan vd, 2006; Altintas vd, 2015). Kuantum ısı motorları, Carnot, Otto, Brayton yada Diesel çevrimleri gibi klasik termodinamiksel çevrimlerin kuantum genellemesi sayesinde, klasik veya kuantum kaynaklarından iş üretmek için iş-modeli olarak kuantum etkilerini kullanır (Quan vd, 2007a; Quan, 2009). İş-kaynađının (üzerinde çalışılan model) yada ısı-rezervinin kuantum doğası, önemli avantajları öne çıkarabilir. Kuantum ısı motorları, klasik ısı motorlarıyla kıyaslandığında, ısı-rezervinden daha fazla iş çıkarabilir (Kieu, 2004; Kieu, 2006). Dolanıklık (Dillenschneider & Lutz, 2009), kuantum eşevreli ısı-rezervleri (Scully vd, 2003; Hardal & Müstecaplıođlu, 2015) yada yeniden üretici adımlar (Huang vd, 2014a) gibi kuantum kaynaklarını harcayarak, ikinci yasayı bozmadan klasik Carnot sınırının üzerinde çalışabilir. Özellikle çiftlenmiş spinler gibi etkileşen iş kaynakları, iki seviyeli (kübit) yada çok seviyeli atomlar, yada basit harmonik osilatör gibi etkileşmeyen iş-kaynakları ile kıyaslandıklarında iş üretmek için daha verimli ve kapasiteli olabilecekleri bulunmuştur (Altintas vd, 2014; Thomas & Johal, 2011; Zhang, 2008; Huang vd, 2013a; Feldmann & Kosloff, 2004; Feldmann & Kosloff, 2003; Huang vd, 2013b; Henrich vd, 2007; Zhang vd, 2007; Thomas & Johal, 2014; Huang vd, 2012; Wu vd, 2006; Ivanchenko, 2015; Zhang vd, 2007; Wang vd, 2012a; He vd,

2012a; Huang vd, 2014b; Wang vd, 2009; Hubner vd, 2014; Azimi vd, 2014; Albayrak, 2013; He vd, 2012b; Altintas & Müstecaphoğlu, 2015). Kuantum ısı motorlarının fiziksel uygulamaları için, tek-iyon (Roßnagel vd, 2014; Abah vd, 2012), Paul tuzağı (Huang vd, 2014a), aşırı-soğuk atomlar (Fialko & Hallwood, 2012), opto-mekanik sistemler (Zhang vd, 2014), kuantum-nokta'lar (Sothmann & Büttiker, 2012), devre ve kavite kuantum elektrodinamik sistemler (Scully vd, 2003; Quan vd, 2006; Altintas vd, 2015) önerilmiştir.

Önerilen birkaç fiziksel kuantum ısı motorları sistemlerine ek olarak, anizotropik spin etkileşmelerini de içeren ve Lipkin-Meshkov-Glick (LMG) modeli olarak adlandırılan genel bir model bu çalışmada ilk olarak göz önüne alınmıştır (Lipkin vd, 1965; Meshkov vd, 1965; Glick vd, 1965). Son günlerde, LMG modeli, nükleer fizik, manyetik moleküller (Heggie vd, 1998), Bose-Einstein yoğunlaşması (Chen vd, 2009; Cirac vd, 1998), optik kavite kuantum elektrodinamiği (Morrison & Parkins, 2008a; Morrison & Parkins, 2008b), eş-evreli olmayan sistemler (Hamdouni & Petruccione, 2007; Quan vd, 2007b) ve söndürücü dinamikler (Das vd, 2006) içerisinde önemli derecede ilgi çekmiştir. LMG modelinin, simetri özellikleri, kuantum dolanıklılığı ve kritikliği detaylı bir biçimde incelenmiştir (Vidal vd, 2004; Ma & Wang, 2009; Ma vd, 2011; Vidal, 2006; Wilms vd, 2012; Wichterich vd, 2010). Dahası Salvatori vd (2014) tarafından LMG modeli, küçük-ölçekli kuantum termometresi olarak incelenirken, kuantum ısı motoru olarak, LMG modelinin tek-eksen bükülme modeli ($\gamma = 0$) kurgusu ve bu kurgunun termal korelasyonları detaylı bir şekilde analiz edilmiştir (Altintas vd, 2014).

Nanoteknolojideki son gelişmeler, kuantum özelliklerin ve dalgalanmalarının baskın olduğu ölçekte sistemler üretip, bu sistemleri kontrol etmeyi mümkün kılmıştır. Eğer bu kuantum sistemleri, ısıyı işe dönüştüren kullanışlı sistemler gibi faydalı amaçlar için kullanılmak isteniyorsa, kuantum mekaniği tarafından dayatılan limitler incelenmek zorundadır. Termodinamiksel dönüşümlerde ve çevrimlerde meydana gelen kuantum sürtünme etkileri bu limitlere örnek olarak verilebilir (Plastina vd, 2014; Alecce vd, 2015; Thomas & Johal, 2014; Feldmann & Kosloff, 2004; Feldmann & Kosloff, 2006; Kosloff & Feldmann, 2010; Rezek & Kosloff, 2006; Rezek, 2010; Allahverdyan &

Nieuwenhuizen, 2005; Allahverdyan vd, 2008; Deffner & Lutz, 2010; Deffner & Lutz, 2011; Deng vd, 2013; del Campo vd, 2014; Vaikuntanathan & Jarzynski, 2009; Wei & Plenio, 2015; Ribeiro vd, 2016; Batalhao vd, 2015).

Kuantum srtnme, sonlu-zamanlı termodinamiksel dnmlerin ayak izidir. Kuantum sistemini bir denge durumundan bir baka denge durumuna gtren sozsuz-uzun sreli termodinamiksel dnmler tersinir srelerdir. Genelde tersinir sreler, i retme ve verimlilik aısından ideal sreler olmasına raėmen g retme aısından ideal deėildirler. Daha gl kuantum motorlar, tipik olarak hızlı termodinamiksel dnmleri gerektirirler. Bu hızlı dnmler ise tersinir olmayan ve sistemi denge durumunun dıına srerek istenmeyen entropi retimine nc olan termodinamiksel dnmlerdir.

Isı motoru, sıcak enerji kaynaėı, soėuk entropi tahliyecisi (soėuk ısı-rezervi) ve i rezervi arasındaki enerji akıını kullanarak i retir. Klasik ısı motorlarının kuantum rejimine genellenmesi yaygın olarak son zamanlarda alıılmaktadır (Scovil, 1959; Kieu, 2004; Kieu, 2006; Thomas & Johal, 2011; Altintas vd, 2014; Quan vd, 2005; Henrich vd, 2007; Zhang vd, 2007; Quan vd, 2007a; Quan, 2009; Tonner & Mahler, 2005; Turkpence & Mstecaplıoėlu, 2016; Dillenschneider & Lutz, 2009; Scully vd, 2003; Hardal & Mstecaplıoėlu, 2015; Gardas & Deffner, 2015; Ronagel vd, 2014; Abah vd, 2012; Fialko & Hallwood, 2012; Zhang vd, 2014; Sothmann & Bttiker, 2012; Quan vd, 2006; Altintas vd, 2015; Geva & Kosloff, 1992; Rezek, 2010; Kosloff, 2013; Rezek vd, 2009; Thomas & Johal, 2014; Campisi vd, 2015; Lecce vd, 2015; Rezek & Kosloff, 2006; Wang vd, 2007; Feldmann & Kosloff, 2000; Kosloff & Feldmann, 2002; Feldmann & Kosloff, 2003; Feldmann & Kosloff, 2004; Allahverdyan & Nieuwenhuizen, 2005; Feldmann & Kosloff, 2006; Kosloff & Feldmann, 2010; Wang vd, 2012b; Feldmann & Kosloff, 2012; Wang vd, 2013; Torrontegui & Kosloff, 2013; Ahn & Mohanty, 2003; Deffner & Lutz, 2010; Wu vd, 2006; Plastina vd, 2014; del Campo vd, 2014; Zheng vd, 2015; Zheng vd, 2016; Ribeiro vd, 2016). Isı rezervleri klasik veya kuantum olabilirken, kuantum ısı motorunun i kaynaėı kuantum nesnesidir. Kuantum ısı motorlarının evrim ilemi, Otto, Carnot, Brayton ve Diesel (Quan vd, 2007a; Quan, 2009) yada otonom evrim (Tonner & Mahler, 2005) gibi termodinamik evrimlerin kuantum genellemeleri

tarafından yönetilir. Kuantum ısı motorlarının makroskobik dinamiklere uyduğu ve ısı rezervleri klasik olduğunda, klasik Carnot verimliliğinin kuantum ısı motorlarının verimliliğini sınırlandırdığı gösterilmiştir (Quan vd, 2007a; Quan, 2009). Isı rezervlerinin kuantum özellikleri içermesi bazı avantajları beraberinde getirir. Kuantum ısı motoru tek ısı rezervinden iş çıkarabilir ve sıcak ısı rezervi üzerinden kuantum eş-evrelilik üreterek klasik Carnot limiti aşılabilir (Turkpençe & Müstecaplıoğlu, 2016; Dillenschneider & Lutz, 2009; Scully vd, 2003; Hardal & Müstecaplıoğlu, 2015). Bunun yanında maksimum entropy prensibini (Misra vd, 2015) izleyerek kuantum ısı rezervlerinin (Gardas & Deffner, 2015) Carnot limiti genellemesi için son zamanlarda açıklamalar vardır. Tek iyon (Roßnagel vd, 2014; Abah vd, 2012), aşırı-soğuk atomlar (Fialko & Hallwood, 2012), optomekaniksel sistemler (Zhang vd, 2014), kuantum noktalar (Sothmann & Büttiker, 2012), devre ve kovuk kuantum elektrodinamik sistemler (Quan vd, 2006; Altintas vd, 2015) gibi bazı fiziksel sistemler, kuantum ısı motorlarının uygulamaları için test ekipmanı olarak önerilmiştir. Öte yandan, kuantum termal aygırlar için sıvı NMR platformunda deneysel kurgular mevcuttur (Batalhao vd, 2014; Raitz vd, 2015). Temel keşiflere ve özel uygulamalara yakın olarak, kuantum ısı motorları, kuantum tabanında tersinmezlik ve enerji-dağıtmanın termodinamik yorumlarını anlamayı da sağlar (Geva & Kosloff, 1992; Rezek, 2010; Kosloff, 2013; Rezek vd, 2009; Thomas & Johal, 2014; Campisi vd, 2015; Alecce vd, 2015; Rezek & Kosloff, 2006; Wang vd, 2007; Feldmann & Kosloff, 2000; Kosloff & Feldmann, 2002; Feldmann & Kosloff, 2003; Feldmann & Kosloff, 2004; Allahverdyan & Nieuwenhuizen, 2005; Feldmann & Kosloff, 2006; Kosloff & Feldmann, 2010; Wang vd, 2012b; Feldmann & Kosloff, 2012; Wang vd, 2013; Torrontegui & Kosloff, 2013; Ahn & Mohanty, 2003; Deffner & Lutz, 2010; Wu vd, 2006; Plastina vd, 2014; del Campo vd, 2014; Zheng vd, 2015; Zheng vd, 2016; Ribeiro vd, 2016; Çakmak vd, 2016; Acconcia vd, 2015; Acconcia & Bonanca, 2015).

Adyabatik (izentropik) süreçler sırasında enerji seviyelerinin hızlı değişimleri içsel sürtünme olarak adlandırılan adyabatik olmayan kayıplara neden olur (Feldmann & Kosloff, 2000; Kosloff, 2013; Kosloff & Feldmann, 2010; Rezek, 2010). Bu tip bir etkinin kaynağı tamamıyla kuantum mekanikselidir.

Sistemin Hamiltonyeni farklı zamanlarda komute etmediğinde içsel sürtünme etkileri ortaya çıkar $[H(t_1), H(t_2)] \neq 0$. Sezgisel olarak, adyabatik kollarında sürtünme; iş-kaynağı sıkışırken-genişlerken enerji seviyelerinin hızlı hareketine içsel direnme olarak düşünülebilir. Enerji temsilinde başlangıçta köşegen olan bir kuantum durumu sistem Hamiltonyenindeki zamana-bağlı değişimleri adyabatik olarak izleyemez. Bundan dolayı sistemin durumu enerji temsilinde (çerçevesinde) eş-evresizlik geliştirir. Böyle bir durumda, enerji entropi (Shannon) artar ve fazla parazit enerji iş kaynağında birikir. Bu ek enerji çevrimin süreçlerinde ısı-rezervlerine gönderilen atık ısı ile temsil edilir. İçsel sürtünmenin termal ısı aygıtlarının performanslarını limitlediği de bulunmuştur. Son çalışmalar detaylı örnekler üzerinde, içsel sürtünmenin birkaç kuantum ısı motorunun iş üretimini, operasyonel verimliliğini ve gücünü düşürdüğünü göstermiştir (Thomas & Johal, 2014; Wang vd, 2012b; Wang vd, 2007; Alece vd, 2015). Soğuk ısı-küvetinin minimum sıcaklığı mutlak sıfır üzerindeki kuantum soğutucu ısı formunda iş çıkarabilir (Kosloff & Feldmann, 2010).

Keşfedildiği andan bugüne Nükleer Manyetik Rozanans (NMR) hem mühendislik hem de temel bilimlerde yaygın olarak kullanılmaktadır. Özellikle temel bilimlerde bir çok gelişme NMR ile modellenmiş ve simule edilmiştir. Kuantum bilgi teorisinde tasarlanan çoğu kuantum mantık kapıları ve algoritmalar hem sıvı hemde katı NMR'da başarıyla uygulanmıştır (Mangold vd, 2004; Oliveira vd, 2007; Hou vd, 2014). NMR'ın bu bilinirliği ve teknolojik erişimi, kuantum ısı motorlarının deneysel olarak uygulanabilirliğini göstermek için ilgiyi üzerine çekmektedir. NMR kullanarak kuantum termodinamik süreçte iş dağılımı üzerine bazı çalışmalar yapılmıştır (Batalhao vd, 2014). Öte yandan algoritmik soğutma NMR'da etkileşmeye sahip spinden gelen sinyalin dedekte edilebilir seviyeye yükseltilmesini sağlayan ve temelinde kuantum bilgi teorisi süreçlerini kullanan yeni bir tekniktir (Moussa, 2005; Elias vd, 2011; Briones, 2015). Ayrıca algoritmik soğutmayı uygulamak için değişik yöntemler kullanılmıştır. Bunlar arasında ısı-küveti-algoritmik soğutma tekniği, partter paylaşma algoritması (PPA) ile uygulanan önemli tekniklerdendir (Atia vd, 2016).

Bu çalışmada ilk olarak LMG modeli, iki kuantum izokorik ve iki kuantum adyabatik süreç içeren kuantum Otto çevrimine (Quan vd, 2007a; Quan, 2009) iş-kaynağı olarak varsayılmıştır. İzokorik süreçlerde, LMG sistemi ya $T = T_1$ sıcaklığındaki sıcak ısı-rezerviyle yada $T = T_2$ soğuk ısı-rezerviyle birleştirilmiştir ve ısı değişimi sadece ısı-rezerviyle gerçekleşir. Adyabatik süreçler sırasında LMG modeldeki parametreler değiştirilerek sistemin pozitif iş yapması beklenir. Göz önüne alınan çalışmada kuantum termodinamiksel tanımlamalar kullanılarak (Quan vd, 2007a; Quan, 2009), adyabatik süreçlerin üç farklı durumu için iş ve verimlilik hesaplanmıştır. İlk iki durumda dış manyetik alan veya spinler arasındaki çiftlenimin büyüklüğü değişirken; üçüncü durumda ise manyetik alan ve çiftlenim büyüklüğü aynı anda değiştirilir. Son deneysel şemalara göre, LMG model parametrelerinin bağımsız varyasyonu (değiştirilmesi) Bose-Einstein yoğunlaşması örneği için mümkündür (Chen vd, 2009).

Öte yandan izleyen çalışmada, kuantum sistemlerinde adyabatik (sanki-adyabatik) süreçlerde içsel sürtünme etkileri çalışılmıştır. Ancak kuantum sistemlerinde içsel sürtünmeyi minimize etme stratejileri değerlendirilmemiştir. Aksine, ana hedefler içsel sürtünme konusunu ve sürülen kuantum sistemlerinde içsel sürtünmenin nasıl ortaya çıktığını tartışmaktır. Bunun için (Plastina vd, 2014; Alece vd, 2015) referanslarında sunulan fikirler ve matematiksel araçlar, zamana bağlı transfer manyetik alan içerisinde bulunan iki seviyeli basit ve NMR'da deneysel olarak ulaşılabilir bir kuantum sistemi için kullanılmıştır. Sistem Hamiltonyeni üniter süreçte parametrik değişime maruz kalarak başlangıç değerinden, H_i , final değerine, H_f değişir (ileri protokol). Ardından ters üniter dönüşümle son değerinden H_f , başlangıç değerine H_i getirilir (geri protokol). Sistemin manyetik alanı içerisindeki yanlış yerleşimlerden dolayı, doğal olarak içsel sürtünme (kapalı sistem içerisinde olan sürtünme) ortaya çıkar. İleri protokolün başlangıç yoğunluk matrisi ile geri protokolün son yoğunluk matrisi arasındaki kuantum bağıl entropiyi kullanarak, adyabatiklikten sapma kantitatif olarak çalışılmıştır. Bunun yanında içsel sürtünmenin, parametrik dönüşüm sırasında dönüş zamanıyla ve dönüşümün izlediği yolla ilişkisi incelenmiştir.

Bir başka çalışmada ise içsel sürtünme içsel boylamsal manyetik alan ile dış manyetik alan arasındaki yanlış hizalanma nedeniyle olur (Rezek, 2010; Kosloff, 2013; Alecce vd, 2015; Rezek & Kosloff, 2006). İki ana öge üzerinde durulmuştur. İlk olarak iş üretiminin ve termal verimliliğin içsel sürtünmeden nasıl etkilendiği analiz edilmiştir. Diğer taraftan ise içsel sürtünme sayısal olarak analiz edilmiş ve çevrimdeki rolü açık olarak gösterilmiştir. Çalışmada, adyabatik dönüşümü sağlayan dört farklı formda kontrol pulsları göz önüne alınmıştır. Çünkü her sürücü puls sistem Hamiltonyenini zamanla farklı oranda dönüştürür böylece kuantum Otto çevriminin performans karakterleri her puls için farklı olur.

Son olarak ise kuantum Otto motorunun gerçek bir model üzerinde nasıl uygulanabileceği tartışıldı. Bunun için NMR teknikleri kullanılarak, spin bazlı kuantum Otto çevrimi göz önüne alındı. Bilindiği üzere NMR'da tek bir çevre ve dolayısıyla tek ısı kaynağı mevcuttur. Ancak kuantum Otto çevriminin sağlanması için sıcaklıkları farklı olan iki ısı-rezervi gereklidir. Bundan dolayı NMR kuantum bilgi işleme teknikleri kullanılarak örnek alınan molekül içerisindeki hedef spin diğer spinler yardımıyla algoritmik olarak soğutuldu. Böylece hedef spinin iki farklı sıcaklık arasında dışarıdan uygulanan kontrol pulsları ile Otto çevrimi gerçekleştirmesi sağlandı. Öte yandan algoritmik soğutma için partner paylaşma algoritması (PPA) kullanıldı. Bu sayede hedef spinin polarizasyonu arttırılarak Shannon limitinin üzerine çıkması sağlandı.

Sonuç olarak bu tezde klasik termodinamik süreçlerinin ve ısı motorlarının, kuantum mekaniksel karşılığı olan kuantum termodinamik süreçler ve kuantum ısı motorları üzerinde durulmuştur. Kuantum Otto çevrimi kullanılarak spin sistemleri üzerinde iş ve verimlilik hesaplamalar yapılmış ve alınan modeldeki parametrelerin çevrim üzerindeki etkileri açıklanmıştır. Bunun yanında kuantum adyabatik kollarda üniter dönüşüm sürecinin analizi yapılarak sistem içerisinde oluşan içsel sürtünme etkileri analiz edilmiş ve nicel olarak belirlenmiştir. Ayrıca bir başka çalışmada ise kuantum Otto motorunu fiziksel bir sistem olan NMR üzerinde uygulanabilir bir molekül göz önüne alınarak algoritmik soğutma tekniği yardımıyla simüle edildi ve gerekli protokeller açıklandı.

2. KURAMSAL TEMELLER

Bu bölümde, tez sırasında kullanılan kuantum mekaniksel temeller, kuantum bilgi işleme ve kuantum termodinamik hakkında teorik bilgiler verilmiştir.

2.1. Kuantum Bilgi İşleme

İki seviyeli sistem, kuantum mekaniğinde en basit sistemdir. Elektron, nötron, foton gibi bir çok fiziksel sistemi temsil eder. Bunun yanında iki seviyeli sistem, ikili-bilgiyi taşıyan en temel kuantum sistemidir. Klasik bilgi teorisiyle kuantum bilgi teorisi arasındaki benzerlik düşünüldüğünde, iki seviyeli sistem "kuantum-bit" (kübit) olarak adlandırılır. Dirac temsili kullanılarak sistemin baz-durumları $|0\rangle$ ve $|1\rangle$ ile gösterilir. Vektör temsilleri ise

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (2.1)$$

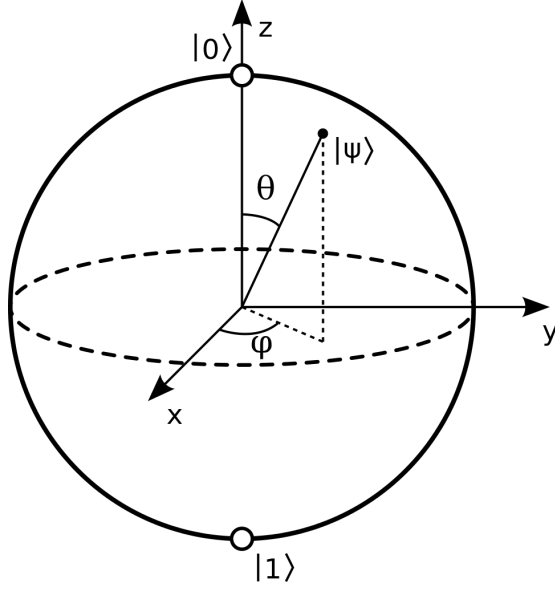
şeklinde yazılır.

Normalize edilmiş ($\alpha^2 + \beta^2 = 1$) genel bir kuantum durumu (karışık durum) $|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle$ olarak yazılır (Cappellaro, 2012). Bu durum θ ve ϕ iki açı olmak üzere, Bloch geometrik ifadesi kullanılarak,

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

şeklinde de yazılabilir.

İki seviyeli bir sistemi θ ve ϕ açılarıyla temsil etmek için Şekil 2.1'de gösterilen basit geometrik bir uzay düşünülebilir. Açılar yarıçapı 1 olan küre yüzeyindeki bir noktayı temsil eder. Bu küre Bloch küresi olarak anlandırılır. Küre üzerindeki bir noktadan diğer bir noktaya geçiş üniter dönüşümle sağlanır. Böyle bir sistemde üniter dönüşümler durum vektörünün döndürülmesiyle temsil edilir. Bu işlemciler döndürme işlemcileri denir.



Şekil 2.1. Bloch küresi, iki seviyeli kuantum sisteminin geometrik temsili

2.1.1. Spin-1/2 döndürme

Spin-1/2 parçacığını döndürmek için $R_\alpha(\theta) = e^{-iS_\alpha\theta}$ döndürme işlemi uygulanır. Bu ifade $\sigma_\alpha^2 = 1$ özelliğide göz önüne alınarak Taylor serisine açıldığında basitçe;

$$e^{-iS_\alpha\theta} = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\mathbb{1} - i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)S_\alpha \quad (2.3)$$

şeklinde yazılır ($\alpha = x, y, z$).

2.1.2. Bazı kuantum mantık kapıları

Klasik bilgi teorisinde olduğu gibi kuantum bilgi işlemede de mantıksal işlemciler vardır. Ancak kuantum bilgi teorisinde işlemciler üniter gelişimler olduğundan mantık kapıları geri alınabilir (tersinir) operasyonlardır. Tek veya çok kübitli olmak üzere bir çok mantık kapısı bulunmaktadır. Bunlara en basit örnek Pauli kapıları;

$$X = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad Y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad Z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (2.4)$$

şeklinde verilir.

$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ kuantum durumuna Pauli-X kapısı uygulandığında; $X|\psi\rangle = \beta|0\rangle + \alpha|1\rangle$, Pauli-Y kapısı uygulandığında; $Y|\psi\rangle = -i\beta|0\rangle + i\alpha|1\rangle$, Pauli-Z kapısı uygulandığında ise; $Z|\psi\rangle = \alpha|0\rangle - \beta|1\rangle$ durumları elde edilir. Öte yandan diğer bir tek kübitlik kapı da uygulandığı kuantum durumunu

süperpozisyon durumuna dönüştüren Hadamard dönüşümüdür. Pauli matrisleri yardımıyla;

$$H = \frac{X+Y}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \quad (2.5)$$

olarak elde edilir. $|0\rangle$ ve $|1\rangle$ bazlarına uygulandığında;

$$H|0\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}, \quad H|1\rangle = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \quad (2.6)$$

süperpozisyon durumlarını oluşturur (Oliveira vd, 2007).

Kontrollü-Değil (CNOT) kapısı ise iki kübitlik temel kapılardandır. $|AB\rangle$ iki kübitlik kuantum durumu olmak üzere $|A\rangle$ kontrol kübiti, $|B\rangle$ hedef kübit olarak alındığında; $CNOT_A|AB\rangle = |A, A \oplus B\rangle$ olarak uygulanır (\oplus sembolü mod 2'ye göre toplama işlemini temsil eder). Kontrollü-Değil kapısı matris temsiliyle;

$$CNOT_A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{array}{c} \bullet \\ | \\ \oplus \end{array}, \quad CNOT_B = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{array}{c} \oplus \\ | \\ \bullet \end{array} \quad (2.7)$$

şeklinde yazılır. Örneğin; $|01\rangle$ kuantum durumuna yukarıda verilen matrisler uygulandığında sırasıyla, $CNOT_A|01\rangle = |01\rangle$ ve $CNOT_B|01\rangle = |11\rangle$ elde edilir.

Bir diğer iki kübitlik kapı ise Değiş-Tokuş (SWAP) kapısıdır. Uygulandığı $|AB\rangle$ durumunda kübitlerin yerini değiştirerek $|BA\rangle$ oluşturur ($SWAP|AB\rangle = |BA\rangle$). Matris temsiliyle;

$$SWAP = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{array}{c} \times \\ | \\ \times \end{array} \quad (2.8)$$

olarak verilir. Bunun yanında Kontrollü-Değil kapılarıyla Değiş-Tokuş (SWAP) kapısı elde edilebilir ($SWAP = CNOT_A CNOT_B CNOT_A$).

Toffoli kapısı üç kübitlik kuantum mantık kapılarından biridir. Bir diğer adı da kontrol-kontrol-değil (CCNOT) kapısıdır. Uygulandığı kuantum durumunu $TOFFOLI|ABC\rangle = |AB, C \oplus AB\rangle$ şeklinde değiştirir. Toffoli kapısı matris

temsiliyle;

$$\text{TOFFOLI} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{array}{c} \bullet \\ | \\ \bullet \\ | \\ \oplus \end{array} \quad (2.9)$$

şeklde yazılır. Bunun yanında Fredkin yada diğer adıyla Kontrollü-Değiş-Tokuş (CSWAP) kapısı da diğer bir üç kubitlik kuantum mantık kapısıdır.

2.2. Kuantum Mekaniksel Bilgiler

Kuantum mekaniğinde sistemin metrik uzayına "Hilbert uzayı" H denir. Sistemi temsil eden dalga fonksiyonunun, ψ , tüm öz-durumları Hilbert uzayının elemanlarıdır. Gözlenebilirler (momentum, konum gibi) ise ölçüm işlemcisinin, A , beklenen değerinin, $\langle \psi | A | \psi \rangle$, gerçek lineer fonksiyonlarıdır. Ayrıca ölçüm işlemi sistemin dalga fonksiyonunu çökertir, diğer bir deyişle dalga fonksiyonu artık sistemi temsil edemez duruma gelmiştir. Alt sistemlerin uzayları çarpımı ise sistemin uzayını oluşturur, $\mathcal{H} = H_1 \otimes H_2 \otimes \dots \otimes H_n$.

2.2.1. Yoğunluk işlemcisi

İki seviyeli kauntum sisteminin saf bir durumu, $|n\rangle$, için yoğunluk matrisi (ρ)

$$\rho = |n\rangle \langle n| = \frac{\mathbb{1} + n\hat{\sigma}}{2} \quad (2.10)$$

formunda yazılır. Burada sigma, $\sigma = \sigma_x + \sigma_y + \sigma_z$, Pauli spin işlemcisi, n ise birim-yönelim vektörünün uzunluğudur ve $Tr(\rho) = 1$. Spin-Yukarı, $|\uparrow\rangle$ durumu için yoğunluk matrisi $(\mathbb{1} + \sigma_z)/2$ 'dir. Denklem (2.10) saf durumları ifade ederken geçerlidir. Ancak kuantum mekaniğinde sistem Hilbert uzayında tanımlı tüm durumların doğrusal kombinasyonu halinde de bulunabilir. Karışık durum olarak adlandırılan böyle bir sistem için yoğunluk matrisi, kutuplanma vektörü,

$s = \langle \sigma \rangle = Tr(\sigma \rho)$, kullanılarak, $\rho_m = (\mathbb{1} + s\sigma)/2$ ($|s| \leq 1$) ifadesinden

$$\rho_m = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 + s_z & s_x - \mathbb{i}s_y \\ s_x + \mathbb{i}s_y & 1 - s_z \end{bmatrix} \quad (2.11)$$

olarak elde edilir (Diosi, 2007). Ayrıca, ρ , yoğunluk matrisi $Tr(\rho^2) = 1$ sağlıyorsa saf durumu veya $Tr(\rho^2) < Tr(\rho)$ ise karışık durumu temsil etmektedir.

2.2.2. Dirac gösterimi

$\psi_n(x)$ fonksiyonları, n tamsayısının değerleriyle bir birinden ayrılır. Dirac, bu tip ortonormal fonksiyonlar için yeni bir notasyon kullanmıştır. Bu sayede kuantum mekaniksel işlemlerin gösterimi çok daha basit olmuştur. Dalga fonksiyonu Dirac notasyonu kullanılarak,

$$\psi_n(x) \equiv |n\rangle, \quad \psi_n(x)^* \equiv \langle n| \quad (2.12)$$

şeklinde yazılır. Burada $|n\rangle$ ket- n ve $\langle n|$ bra- n olarak isimlendirilir. Ayrıca dalga fonksiyonları hermityen eşlenik (adjoint, $A = A^*$) olduğundan $|n\rangle = (\langle n|)^\dagger$ ve $\langle n| = (|n\rangle)^\dagger$ 'dir. Kuantum mekaniğinde dalga fonksiyonu üzerinden alınan integral ifadesi, Dirac gösterimiyle;

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m(x)^* \psi_n(x) dx = \langle m|n\rangle \quad (2.13)$$

şeklinde yazılır (Levitt, 2008). Ortonormalizasyon ifadesi $\langle m|n\rangle = \delta_{m,n}$ 'dir. Eğer $m = n$ ise iki fonksiyon bir birine diktir ($\delta_{m,n} = 1$). A sistemin bir gözlenebilirliği ise beklenen değeri, Dirac gösterimi ile $\langle n|A|n\rangle = \langle A \rangle$ şeklinde temsil edilir. Bunun yanında izdüşüm işlemcisi ise $P_n = |n\rangle \langle n|$ olarak yazılır.

2.2.3. Kuantum bit termodinamiği

Termodinamiğin genel prensiplerine göre, T sıcaklığındaki ısı rezervine temas eden sistem, yeteri kadar beklenirse rezervuar ile termal dengeye ulaşır. Bu etki kuantum sistemi içinde geçerlidir. Termalize olmuş kuantum sistemi Gibbs durumu, $\exp(-H/k_B T)/Z$, (Z partitasyon fonksiyonu, k_B Boltzmann sabiti) ile ifade edilir. Dikey dış manyetik alan içerisinde bulunan elektron göz önünde alındığında, enerji seviyeleri spin manyetik kuantum numarası ($m_s = 1/2$)

etkisiyle, taban ($|\uparrow\rangle$) ve uyarılmış ($|\downarrow\rangle$) durumlar olarak ikiye yarılr. Bu seviyeler arasındaki enerji farkı $\epsilon = |0\rangle - |1\rangle$ olmak üzere tek kübitlik kuantum sisteminin Hamiltonyeni, $H = -\frac{1}{2}\epsilon\hat{\sigma}_z$ formunda yazılabilir. Böyle bir sistem için Gibbs durumu

$$\rho_\beta = \frac{\exp(\beta\epsilon\hat{\sigma}_z/2)}{2 \cosh(\beta\epsilon/2)} = \frac{1}{1 + \exp(-\beta\epsilon)} (|0\rangle\langle 0| + e^{-\beta\epsilon} |1\rangle\langle 1|) \quad (2.14)$$

şeklde yazılır. Burada $\beta = 1/k_B T$, ters sıcaklık olarak da bilinir.

2.2.4. Termal kübit ile iş ve ısı

Hamiltonyeni H ile temsil edilen ve yoğunluk matrisi ρ olan bir kuantum sisteminin iç enerjisi, U , enerjinin beklenen değeri,

$$U = \langle E \rangle = \text{Tr}(H\rho) \quad (2.15)$$

ile verilir. Zamanla enerjideki değişimi hesaplamak için her iki tarafın türevi alındığında,

$$\frac{d}{dt} \langle E \rangle = \text{Tr} \left(\frac{d}{dt} H\rho \right) + \text{Tr} \left(H \frac{d}{dt} \rho \right) \quad (2.16)$$

elde edilir. Eşitliğin sağındaki ilk terim, dW , ile sistemin enerji spektrumu değişir. Bu değişim yapılan işle ilgilidir. İkinci terimde ise, dQ , sistemin öz-durumları, dolayısıyla entropisi değişir. Bu sistemin dokunduğu rezervuar ile sistem arasındaki ısı değişiminin göstergesidir (Rempp, 2007). Bu ifadeler göz önüne alındığında sistemin iç enerjisindeki değişim,

$$dU = dW + dQ \quad (2.17)$$

şeklde yazılır.

Benzer şekilde sonlu, N , seviyeli bir model göz önüne alındığında, sistemin iç enerjisi $U = \sum_n P_n E_n$ ifadesiyle bulunur. Burada P_n ve E_n terimleri sistemin n . öz-durumunun ($|n\rangle$) sırasıyla olasılığı ve enerjisidir. Öyleyse denklem (2.16) kullanılarak yapılan iş, $dW = \sum_n P_n dE_n$, ve ısı $dQ = \sum_n E_n dP_n$, olarak elde edilir (Quan vd, 2007a).

2.2.5. Zamana bağılı Schrödinger denklemi

Kuantum mekaniğinde sistemin enerji işlemcisi (Hamiltonyeni), H , zamanla geri döndürülebilir gelişim gösterir. Kapalı bir kuantum sisteminin gelişimi zaman-bağılı Schrödinger dalga denklemi

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = H |\psi\rangle \quad (2.18)$$

ile verilir. Belirli bir t zamanı sonra sistemi dalga fonksiyonu $|\psi(t)\rangle = U(t)\psi(0)$ ile elde edilir, bir başka deyişle eğer sistemin ilk durumdaki dalga fonksiyonu biliniyorsa t zaman sonraki dalga fonksiyonu bulunabilir. Burada $U(t)$ üniter gelişim işlemcisi ve $U(0) = \mathbb{1}$ 'dir. Bir işlemcinin üniter olması için, $U^\dagger = (U^*)^T$, kompleks eşleniğinin transpozu ile tersi birbirine eşit olmalıdır ($U^\dagger = U^{-1}$).

2.2.6. İşlemcilerin gelişimi ve beklenen değer

Bir kuantum sistemi üzerinde bir işlemcinin etkisi gözlemlenirken Heisenberg denklemi (2.19) kullanılır. A işlemci olmak üzere sistemin Hamiltonyeni üzerindeki etkisi

$$\frac{dA}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, A] + \frac{\partial A}{\partial t} \quad (2.19)$$

ifadesi ile hesaplanır. Eğer A işlemcisi zamandan bağımsız ise ve H ile komüte ediyorsa, işlemci korunur. Bu durumda işlemci hareket değişmezi olarak da tanımlanır. $|\psi\rangle$ durumunda olan bir sistem için bir gözlenebilirin beklenen yada ortalama değeri Dirac gösterimiyle

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle \quad (2.20)$$

şeklinde ifade edilir.

2.3. Kuantum Termodinamik

Kuantum termodinamik, birbirinden bağımsız iki teori olan termodinamik ve kuantum mekanik arasındaki ilişkiyi açıklamaya çalışan bilim dalı olarak tanımlanabilir. Sunumları ve kökenleri yazardan yazara değişiklik göstermesine rağmen mekanik ile denge termodinamiği teorilerinin pratik sonuçları ve matematiksel formalizimleri hakkında hiçbir anlaşmazlık yoktur. Ancak özellikle

son yüzyılda mekanik ve denge termodinamiği uyumsuz sonuçlar vermeye başlamıştır. Mekanikteki dinamiğin ve kinematiğin genel özellikleri, denge termodinamiği tarafından kastedilen dinamiğin ve kinematiğin genel özellikleriyle karşı karşıya geldiğinde problem ortaya çıkmaktadır. Geri alınabilirlik, denge durumlarının varlığı ve adyabatik üretme için enerjinin kullanılabilirliği, üzerinde tartışılan problemlere örnek olarak verilebilir (Beretta, 1984).

Kuantum termodinamikte, adyabatik kollar zamana-bağlı Hamiltonyenler ile modellenir. Tipik olarak, sistemi kontrol eden dış-kontrol Hamiltonyeni ile sistemin iç Hamiltonyeni komute etmez. Sonsuz yavaş operasyon, kuantum ve termodinamik adyabatik koşullar için ön gerekliliktir. Bu koşullar altında ısı-motorunu sıfır güce sahip olacaktır. Sonlu bir güç üretmek için, operasyonun hızı arttırılmalıdır. Deneysel olarak bilinir ki hızlı hareketler sürtünmeden dolayı kayıplara neden olur. Kuantum ise sürtünmenin kaynağını, sistemin, ani enerji değişimlerinde yoğunluk matrisinin köşegen kalmasındaki yetersizliği olarak açıklar (Kosloff, 2013).

Kuantum termodinamiğinde ısı transfer bölümleri açık kuantum sistemi teknikleri tarafından modellenen sistem-rezerv etkileşmesiyle temsil edilir. LGKS (Lindblad ve Gorini-Kossakowski-Sudarshan) üretici tarafından öncülük edilen Markovian master eşitliği bu iş için kuantum termodinamiğinin anahtar elemanlarından biridir (Lindblad, 1976; Gorini vd, 1976). Sonlu güç operasyonları, sonsuz miktarda zaman alacağından termal transfer sürecinin asla ısı-rezervi ile dengeye ulaşmasına izin verilmez. Böylece maksimum güç üretimi, çevrimin her bölümü için ayrılan zamanın optimize edilmesi ile elde edilir.

2.3.1. Kuantum entropi ve sıcaklık

Entropi basitce, düzensizliğin ölçüsü olarak yorumlanabilir. ρ yoğunluk matrisi ile temsil edilen bir kuantum sistemi için entropi tanımı ilk olarak von-Neumann tarafından

$$S(\rho) = -Tr(\rho \log \rho) \quad (2.21)$$

şeklinde yapılmıştır.

Kuantum mekaniğinde bir gözlenebilirin, A , entropisi A 'nın projeksiyon ölçmeleriyle ilgilidir. A gözlenebilirini spektral ayrıştıma sahiptir, (spectral decomposition) $A = \sum_i \alpha_i P_i$ ve $P_i = |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i|$. Dolayısıyla $|\alpha_i\rangle$ öz-durumu için olasılık $p_i = \text{tr}(\rho P_i)$ olarak elde edilir. Böylece, A gözlenebilirini ile ilgili entropi Shannon (enerji) entropi olarak

$$S(\rho) = - \sum_i p_i \log p_i \quad (2.22)$$

şeklinde ifade edilir ($k_B = 1$) (Kosloff, 2013). Bunun yanında eğer sistem çevresiyle termal denge halinde ise von-Neumann entropi ile Shannon entropi eşit olur (Ohya & Watanabe, 2010). Tüm olasılık dağılımlarının toplamı;

$$\sum_i p_i = 1, \quad p_i \geq 0 \quad (2.23)$$

dir.

Sıcaklık ise sadece termal dengede bulunan sistemler için tanımlanabilen bir niceliktir. Boltzmann dağılımı, entropi (S) değişimi başına enerji (E) değişiminin sıcaklığa eşit olduğunu garanti eder. Bu durumda parçacığın ortalama kinetik enerjisi, $k_B T$ 'dir. Basit haliyle sıcaklık termodinamik olarak,

$$\frac{1}{k_B T} = \frac{\partial S}{\partial E} \quad (2.24)$$

ifadesiyle hesaplanır.

Kuantum mekaniğinde sıcaklık iyi tanımlanamamıştır. Sıcaklıkla ilişkili bir işlemci yoktur. Kuantum durumunu temsil eden yoğunluk matrisi sadece köşegen elemanlarından oluşuyorsa ve her enerji seviyeleri aynı sıcaklığı tanımlıyorsa, bu durumda kuantum sistemi için sıcaklık tanımlıdır.

2.3.2. Kuantum termodinamik süreçler

Bu bölümde klasik termodinamik süreçlerin kuantum termodinamik yorumları, kuantum mekaniği yardımıyla açıklanacaktır.

2.3.2.1 Kuantum izotermal süreç

Sabit sıcaklıktaki bir küvette tutulan ve potansiyel duvarları arasında sınırlandırılmış bir parçacık, üzerinde çalışılan sistem olarak ele alındığında, parçacık dışarıdan ısı soğurabilir ve dışarıya pozitif iş yapabilir. Hem enerji seviyeleri hem de iş olasılıkları aynı anda değişir. Böylece sistem bulunduğu küvette termal denge halinde kalır. İki seviyeli bir sistem göz önüne alınırsa $|g\rangle$, taban durumu, $|e\rangle$ uyarılmış durum ve $\Delta E = E_{|g\rangle} - E_{|e\rangle}$ bu iki seviye arasındaki enerji farkı olmak üzere, sistemin Boltzmann dağılımı;

$$r = \frac{P_{|e\rangle}}{P_{|g\rangle}} = \exp[-\beta\Delta E(t)] \quad (2.25)$$

şeklindedir. Burada $\beta = 1/k_B T$ ters sıcaklık ve k_B Boltzmann sabitidir ve $P_{|g\rangle} + P_{|e\rangle} = 1$. $\Delta E(t)$ normalizasyon şartı sağlanır. $\Delta E(t)$, t zamanıyla yavaşça değişirse, ifade $r(t) = \exp[-\beta\Delta E(t)]$ olarak yazılabilir. Yani yeterince yavaş bir süreçte, sistem her an bulunduğu küvette termodinamik dengede kalır. Böyle bit sistemde etkin sıcaklık ifadesi henüz sistem denge durumunda olmasa bile $r(t)$ ve $\Delta E(t)$ göz önüne alınarak, sistemin anlık dengede olduğu düşünülürse, sistemin etkin sıcaklığı

$$T_{eff} = \frac{1}{k_B \beta_{eff}} = \frac{\Delta E(t)}{k_B} \left(\ln \frac{P_{|e\rangle}}{P_{|g\rangle}} \right)^{-1} \quad (2.26)$$

ifadesiyle temsil edilir (Quan vd, 2007a).

2.3.2.2 Kuantum izokorik süreç

Kuantum izokorik süreçte öncelikle üzerinde çalışılan model ile ısı küveti arasında temas sağlanır. Bu temas sırasındaki ısı alışverişi, kuantum termodinamikte sistem-rezerv etkileşimiyle, açık kuantum sistem dinamikleri göz önüne alınarak sağlanır. Böylece model ile ısı-küveti arasında termal ısı alışverişi gelişimi analiz edilebilir. Bunun yanında yeterli bir zaman sonra model ile ısı küveti termal dengeye ulaşır. Ancak model ile ısı rezervi arasında ısı alışverişi olsada, izokorik süreçte iş yapılmaz. Bunun yanında kuantum izokorik süreçte iş olasılıkları, P_n ve von-Neumann entropi S_{vn} , sistem ısı küvetiyle termal dengeye ulaşana kadar değişecektir (Quan vd, 2007a). Ancak modelin sahip olduğu enerji seviyeleri arasındaki fark, ΔE , bu süreçte sabit kalır.

Diğer taraftan, kuantum izokorik süreçte sistem iş yapmasa da, eğer izokorik süreç kuantum ısı çevriminin bir alt süreci ise termalizasyon süresinin çok uzun olması döngünün ürettiği gücü azaltacağından, kısa süreli termalizasyonlar sağlanmalıdır.

2.3.2.3 Kuantum adyabatik süreç

Kuantum termodinamikte adyabatik süreçler zamana bağlı Hamiltonyenler kullanılarak uygulanır. Sistem üzerine dışarıdan uygulanan kontrol işlemleri sistemin adyabatik olarak gelişmesini sağlar. Tipik olarak modelin Hamiltonyeni ile dışardan uygulanan kontrol Hamiltonyeni komüte etmez (Kosloff, 2013). Kuantum adiabatik şartların sağlanması için sistem üzerine uygulanan kontrol işlemi sonsuz yavaş ilerlemelerle sağlanmalıdır. Ancak bu sistemin ürettiği gücü sıfır yapmaktadır. Sistemin güç üretmesi için operasyonların hızı arttırılmalıdır. Bu kez de sistemdeki hızlı değişimler içsel sürtünmeden kaynaklanan kayıplara yol açacaktır. Adyabatik kollarda sürtünmeden kaynaklanan ve kontrol işleminin hızına bağlı olan içsel sürtünme kayıpları, Bölüm 4.3'te keyfi spin sistemi için hesaplanmıştır.

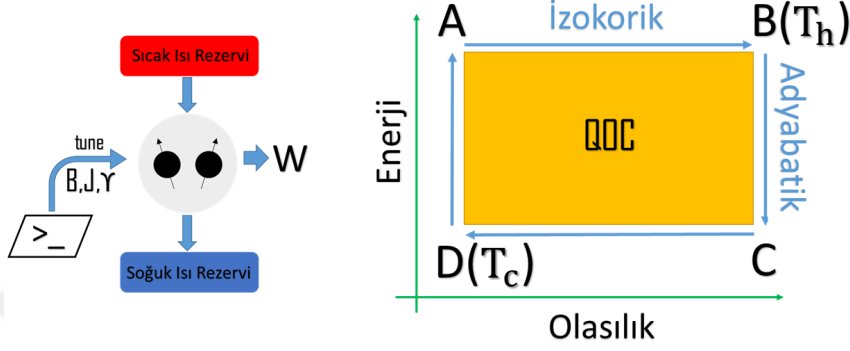
Kuantum adyabatik süreçler çok yavaş ilerlediğinden olasılık dağılımları değişmeyecektir, $dP_n = 0$. Ayrıca kuantum adyabatik süreçlerde sistemle ısı-rezervuarı arasında ısı alışverişi olmaz, $\dot{d}Q = 0$ (Quan vd, 2007a). Ancak adyabadik süreçlerde enerji seviyeleri arasındaki fark değiştiğinden sistem iş yapacaktır (Quan vd, 2007a).

Kuantum doğası, sistemdeki sürtünmenin kaynağını; enerji seviyelerindeki ani değişimlere sistemin köşegen elemanlarını korumadaki yetersizliği olarak tanımlar (Kosloff, 2013).

2.3.3. Kuantum otto çevrimi

Isı motorları, ısı değişimini işe çeviren döngülerdir. Kuantum termodinamikte son yıllarda ilgisi artan çalışmalardan birisi de klasik olarak iyi bilinen Stirling, Otto, Carnot gibi ısı motorlarının kuantum karşılıklarının araştırılmasıdır. Bunlardan kuantum Otto çevrimi, dört kuantum sürecinden (dört zamanlı)

meydana gelir. Bu süreçlerden ikisi kuantum izokorik, diğer ikisi ise kuantum adyabatik süreçlerdir. Biri sıcak diğeri soğuk iki ısı-rezervi arasında çalışan ve dışarıdan uygulanan pulslar ile kontrol edilebilen bir kuantum Otto çevrimi, Şekil 2.2’de olduğu gibi temsil edilir. Sistemin Hamiltonyenine bağlı olarak spin



Şekil 2.2. Kuantum Otto döngüsü, enerji ve olasılık değişimleri

etkileşme terimi, J , anizotropi terimi, γ , manyetik alan, B , gibi parametreler dışarıdan kontrol edilerek değiştirilebilir. Böylece sistemin kuantum adyabatik süreçlere girmesi sağlanır.

Kuantum Otto Çevrimi, üzerinde çalışılan modelin (iş-kaynağının) sıcak ısı-rezervine temas ettirilmesiyle ilk izokorik sürece başlar. Ardından modelin Hamiltonyeni, H_1 dışarıdan kontrollü bir şekilde değiştirilerek $H_1 \rightarrow H_2$ (dış manyetik alanın değiştirilmesi ile bu değişim sağlanabilir) modelin ilk adyabatik sürece girmesi sağlanır. Bir sonraki adımda ise ikinci izokorik süreci gerçekleştirmek için üzerinde çalışılan model bu kez soğuk ısı-rezervine temas ettirilir. Son adımda ise yine dışarıdan kontrol yöntemleriyle modelin son Hamiltonyeni, H_2 , başlangıç anındaki Hamiltonyenine geri döndürülerek, $H_2 \rightarrow H_1$, ikinci adyabatik süreç tamamlanır. Kuantum Otto çevriminde sistemin enerji-olasılık diyagramı Şekil 2.2’de gösterilmiştir.

Kuantum izokorik ısıtma sürecinde sistem $A \rightarrow B$ 'ye değişirken (Şekil 2.2), üzerinde çalışılan model (iş-kaynağı) tarafından soğurulan ısı;

$$Q_{in} = \sum_n \int_A^B E_n dP_n = \sum_n E_n^h [P_n(B) - P_n(A)] \quad (2.27)$$

olarak yazılır. Bu ifadede E_n^h n . seviyenin enerjisi ve $P_n(A)$ ve $P_n(B)$, sistemin

A ve B noktasında, n . seviyedeki bulunma olasılıklarıdır. Benzer şekilde, sistem ikinci izokorik süreçte $C \rightarrow D$ giderken soğuk ısı rezervine verdiği ısı;

$$Q_{out} = \sum_n \int_C^D E_n dP_n = \sum_n E_n^l [P_n(C) - P_n(D)] \quad (2.28)$$

şeklinde elde edilir. Bu ifadede ise E_n^l izokorik soğutma sürecindeki sistemin n . seviyesinin enerjisidir. Kuantum izokorik süreçte, üzerinde çalışılan model ile ısı-rezervi her zaman termal dengede değildir.

Kuantum adyabatik süreçlerde ise ($B \rightarrow C$ ve $D \rightarrow A$) sistemin tüm enerji seviyeleri aynı oranda değişir. Yani, n ve m farklı iki enerji seviyesi olmak üzere $E_n^h - E_m^h = \alpha(E_n^l - E_m^l)$ 'dir. Bunun yanında her iki kuantum adyabatik süreçte enerji seviyelerinin olasılık dağılımları değişmemektedir, $P_n(B) = P_n(C)$ ve $P_n(D) = P_n(A)$. Ayrıca adyabatik süreçlerde von-Neumann entropi de değişmez ($S(B) = S(C)$ ve $S(D) = S(A)$).

Bu bilgiler ışığında kuantum Otto çevriminde dışarıya üretilen iş, izokorik süreçlerdeki ısı değişimi göz önüne alınarak

$$W_{QOC} = Q_{in} + Q_{out} = \sum_n (E_n^h - E_n^l) [P_n(B) - P_n(A)] \quad (2.29)$$

eşitliğiyle elde edilir. Diğer taraftan sistemin ürettiği iş, adyabatik süreçlerdeki iç enerji değişimlerini kullanılarak

$$W_{QOC} = Tr[\rho_{T_h}(H_B - H_C)] + Tr[\rho_{T_l}(H_A - H_D)] \quad (2.30)$$

şeklinde yazılabilir. Burada ρ_{T_h} ve ρ_{T_l} sistemin sırasıyla B ve D noktalarındaki termal denge yoğunluk matrisleridir. Sistemin kuantum Otto çevriminde ürettiği işin verimliliği ise

$$\eta_{QOC} = \frac{W_{QOC}}{Q_{in}} = 1 - \frac{E_n^l - E_m^l}{E_n^h - E_m^h} \quad (2.31)$$

ifadesi ile hesaplanır. Ayrıca kuantum Otto çevriminde sistemin pozitif iş üretmesi için gerekli koşul denklem (2.29) kullanılarak $T_h > \alpha T_l$ olarak elde edilir.

2.3.4. İki seviyeli sistemlerde kuantum Otto çevrimi: kübit işi

Sistemin Hamiltonyeni dışarıdan kontrol edilebildiği sürece, termodinamik sistemdeki ısı değişimi işe çevirebilir. z yönünde uygulanan dış manyetik alandaki, B_0 , çekirdek spini için Hamiltonyen (Zeemann Terimi),

$H = -(1/2)\hbar\omega\hat{\sigma}_z = -\hbar\omega(|\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow|)$ şeklindedir. Burada, γ_n jromanyetik oran olmak üzere, $\omega = -\gamma_n B_0$ Larmor presesyon frekansıdır. Sistemin iki seviyesi arasındaki enerji farkı ise; $\epsilon = \hbar\omega$ 'dir. Sistem $\beta = 1/k_B T$ ters sıcaklığında termal dengede ise, yoğunluk matrisi

$$\rho_{\beta,\omega} = \frac{1}{2 \cosh(\beta\hbar\omega/2)} \exp(\beta\hbar\omega\hat{\sigma}_z/2) \quad (2.32)$$

olarak elde edilir. Sistemin ortalama enerjisi ise, $U = Tr(H\rho_{\beta,\omega})$ denkleminde,

$$U = -\frac{\hbar\omega}{2} \sinh(\beta\hbar\omega/2) \quad (2.33)$$

'dir. Kuantum adyabatik süreci başlatmak için sistem ısı-rezervinden ayrılır ve dış manyetik alan zamanla değiştirilir. Sistemi temsil eden Hamiltonyen,

$$H(t) = -\frac{1}{2}\hbar\omega(t)\hat{\sigma}_z \quad (2.34)$$

şeklinde yazılır. Bu durumda ortalama enerjinin değişiminde iki katkı vardır. Bunlardan ilki; ısı-rezervinden kübite doğru olan ısı akışı, Q , ikincisi ise; kübit üzerinde dış manyetik alan değişiminin yaptığı iş W 'dir.

$$\frac{dU}{dt} = tr\left(\frac{dH}{dt}\rho\right) + tr\left(H\frac{d\rho}{dt}\right) \equiv \frac{dW}{dt} + \frac{dQ}{dt} \quad (2.35)$$

burada dW/dt güç, dQ/dt ise ısı akış oranıdır (Diosi, 2007). Kuantum adyabatik süreçte, termal rezervinden ayrılan kübit, çok yavaş değiştirilen manyetik alan ($\omega(t)$) altında, her t için $[H(t), \hat{\rho}_{\beta,\omega}] = 0$ komutasyon bağıntısını sağladığından $\hat{\rho}(t)$ başlangıçtaki denge durumunda kalacaktır. Kübit ile ısı-rezervi arasında ısı alışverişi olmadığından $dQ/dt = 0$ 'dır. Sistemde enerji değişimi (adyabatik süreçte yapılan iş);

$$\frac{dW}{dt} = tr\left(\frac{dH}{dt}\rho(0)\right) = -\frac{\hbar}{2} \frac{d\omega}{dt} \sinh(\beta\hbar\omega(0)/2) \quad (2.36)$$

olarak elde edilir.

Diğer taraftan kuantum Otto çevriminde kübit'in yaptığı işi hesaplamak için, kübit ω_h manyetik alanda T_h ısı-rezervine temas ettirilir ve 1. izokorik süreç başlar. Bu durumda kübit Hamiltonyeni; $H = -(1/2)\hbar\omega_h\sigma_z$ olur. Kübit sıcak ısı-rezervi ile T_h sıcaklığında termalize olduğunda kübit'in yoğunluk matrisi,

$$\rho_{\beta_h,\omega_h}^h = \frac{1}{2 \cosh(\beta_h\hbar\omega_h/2)} \exp(\beta_h\hbar\omega_h\sigma_z/2) \quad (2.37)$$

şeklindedir. Termal dengedeki kübit ısı-rezervinden ayrılarak izole edilir ve manyetik alan sonsuz-yavaş adımlarla $\omega_h \rightarrow \omega_l$ 'ye değiştirilerek 1. adyabatik süreç gerçekleştirilir. Bu durumda kübit Hamiltonyeni; $H = -(1/2)\hbar\omega_l\sigma_z$ olur. 2. izokorik süreçte ise kübit T_l sıcaklığındaki ısı-rezervine temas ettirilerek termal dengeye ulaştırılır. Bu durumda termal denge yoğunluk matrisi;

$$\rho_{\beta_l, \omega_l}^l = \frac{1}{2 \cosh(\beta_l \hbar \omega_l / 2)} \exp(\beta_l \hbar \omega_l \sigma_z / 2) \quad (2.38)$$

olarak elde edilir. Son adyabatik süreçte ise kübit ısı rezervinden ayrılır ve manyetik alan sonsuz-yavaş adımlarla, $\omega_l \rightarrow \omega_h$ 'ye değiştirilerek ilk değerine geri döndürülür. Böylece kuantum Otto çevrimi tamamlanmış olur. Bu çevrim sonucunda kübitin yaptığı iş denklem (2.29) kullanılarak,

$$W_{kubit} = (\epsilon_h - \epsilon_l) \left(\frac{1}{1 + \exp(\beta_h \epsilon_h)} - \frac{1}{1 + \exp(\beta_l \epsilon_l)} \right) \quad (2.39)$$

olarak elde edilir (Quan vd, 2007a).

2.4. Sistem İçi Sürtünme Etkileri

Bu bölümde kuantum sistemi üzerinde gerçekleştirilen gelişimlerin sistemde meydana getirdiği sürtünme tarzı etkiler verilmiştir.

2.4.1. Kuantum ve termodinamik adyabatik şartlar ve kuantum sürtünme

Termodinamik adyabatik süreçlerde entropi (S) değişimi olmaz. Tipik olarak dışarıdan uygulanan kontrol işlemi, sistem durumunu modifiye eder. Adyabatik süreçlerin kuantum versiyonu dışarıdan kontrol edilen zamana-bağlı Hamilton $H(t)$ tarafından modellenebilir. Eğer sistem çevreden izole edilmişse, dinamikler (değişimler) üniterdir, dolayısıyla S_{vn} entropisi sabittir. Bu neden göz önüne alındığında, enerji entropi S_E kuantum adyabatik süreçlerde uygun entropi ölçümüdür (denklem (2.22)). Bir kuantum adyabatik süreç S_E sabiti tarafından tanımlanabilir. Enerji entropinin zamana göre türevi

$$\frac{dS_E}{dt} = - \sum_j \dot{p}_j \log p_j \quad (2.40)$$

şeklinde yazılır. Burada p_j , ani enerji seviyesinin $\epsilon_j(t)$ olasılığıdır. Denklem (2.40)'de görüldüğü üzere adyabatik koşul, ani enerji seviyelerinin olasılıklarında net bir değişim olmamasıdır. Bu sistem Hamiltonyeninin farklı zamanlarda kendisiyle komute ettiği anlamına gelir: $[H(t), H(t')] = 0$.

Sistemi başlangıç durumundan son durumuna değiştirmek için dışarıdan kontrol Hamiltonyeni kullanılır. Genel olarak sistem, sabit bir Hamiltonyen (H_0) ve zamana bağlı kontrol kısmından ($H_C(t)$) inşa edilir;

$$H(t) = H_0 + H_C(t). \quad (2.41)$$

Tipik olarak $[H_0, H_C(t)] \neq 0$ olduğundan $[H(t), H(t')] \neq 0$ olur ve zaman sıralama düzelmeleri adyabatik süreçlerin kesinlikle imkansız olduğunu gösterir. Yaklaşık adyabatik dinamikler bu yüzden kontrol Hamiltonyeninin $H_C(t)$ yavaş değiştirilmesini gerektirir. Bu koşullar adyabatik parametreler, $w_{ij} = \hbar(\epsilon_i - \epsilon_j)$ ani Bohr frekansları olmak üzere $\mu = \sum_{ij}(w_{ij}/w_{ij}^2) \ll 1$ tarafından tanımlanır (Comparat, 2009).

Adyabatik koşul termodinamikte idealleştirme için önemlidir. Eğer başlangıç durumu taban durumu ise, ardından adyabatik koşullar final durumuna ulaşmak için minimum iş gerektiren yolu tanımlayabilir. Bu açıklama iki seviyeli sistemin başlangıç durumu için genelleştirilebilir. Durağan Hamiltonyen, $H(t)$ ile komute edecektir ve sistem üniter gelişim boyunca termal denge durumunu koruyacaktır (köşegen kalacaktır) (Kosloff, 2013).

Adyabatik koşullar tam olarak sağlanmadığında, son duruma ulaşmak için ek bir iş gereklidir. İzole sistemler için, dinamikler üniter olduğu ve geri çevrilebildiği sürece bu iş geri döndürülebilir. Eş-evrelilik yoğunluk matrisinin köşegen dışı elemanlarında tutulur ve eksta enerji maliyetini ve ters dinamikleri geri dönüştürmek için gerekli bilgiyi taşır. Tipik olarak bu enerji, enerji faz bozulmasına neden olan; ısı-rezervi ile etkileşmeden dolayı geri dönüştürülebilir değildir. Isı-rezervi bu durumda enerjii ölçen aparat gibi davranır. Bu kayıp enerji sistemdeki sürtünmenin kuantum versiyonudur (Rezek & Kosloff, 2006). Adyabatik davranıştan sapma enerji entropi ile von Neumann entropi arasındaki farkla ilişkili olabilir (Feldmann & Kosloff, 2012).

Kuantum sürtünme etkisini en aza indirmek için bir çok strateji mevcuttur. Bir tanesi kuantum yağlama adıyla bilinen sistemin durumunu ani Hamiltonyen ile komutasyon etmeye zorlamadır $[\rho(t), H(t)]=0$. Bu sisteme dış bir faz-gürültüsü ekleme ile sağlanabilir (Feldmann & Kosloff, 2006).

Bir diğer yolda, enerji temsilinde köşegen olan başlangıç ve son durumları $[\rho_i, H(0)] = [\rho_f, H(t_f)] = 0$ ile adyabatik olmayan kontrol çözümleri bulmaktır. Bu fikir de kısadevre adyabatikliği olarak bilinir. Arkasındaki temel ise kontrol Hamiltonyeninin $H_C(t)$ zamanlama fonksiyonunu $f(t)$ optimize etmektir ($H_C(t) = V_C f(t)$). Bu yolla, kontrol fonksiyonunun başlangıç durumundan final durumunda kısa zamanda sürtünmesiz dönüşümler elde edilir (Feldmann & Kosloff, 2006).

2.4.2. Zamanla gelişim ve üniter dinamik

Kuantum mekaniğinde sistemin zamanla gelişimi üniter(geri alınabilir) dönüşümlerle sağlanır. Sistemi temsil eden yoğunluk matrisi zamanla,

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(t) = \mathcal{L}\rho(t) = -\frac{\hbar}{i}[H(t), \rho(t)] \quad (2.42)$$

Liouville ifadesiyle gelişir. Burada $[H(t), \rho(t)] = H\rho - \rho H'$ dir. Bu üniter gelişim altında, Von-Neumann entropi, $S_{vn}(\rho) = -k_b Tr(\rho \ln \rho)$, korunur (Parrondo vd, 2009). Zamandan bağımsız Hamiltonyen , H , için $U(t) = \exp(-itH/\hbar)$ zamanla gelişim işlemcisi ve ρ_0 kuantum sisteminin $t = 0$ anındaki yoğunluk matrisi olmak üzere denklem (2.42)'nin çözümünden

$$\rho(t) = U(t)\rho_0 U(t)^\dagger \quad (2.43)$$

ifadesi elde edilir.

2.4.3. Kapalı kuantum sistemlerinde zamanla gelişim

Kuantum mekaniğinde sistem eğer başka bir sistem veya etrafıyla etkileşmiyorsa izole sistem olarak tanımlanır. Hilbert uzayında, \mathcal{H} , izole veya kapalı kuantum sistemi t zamanında eğer saf durumda $|\psi(t)\rangle$ bulunuyorsa, bu durumun zamanla

gelişimi

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad (2.44)$$

Schrödinger denklemiyle sağlanır. Burada $H(t)$ sistemin Hamiltonyeni enerji işlemcisidir. Karışık durumlarda ise $\rho(t)$ yoğunluk matrisiyle temsil edilen sistem Liouville-von Neumann denklemi ile zamanla

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [H(t), \rho(t)] \quad (2.45)$$

şeklinde gelişir. Bu ifadede $[H(t), \rho(t)] = H(t)\rho(t) - \rho(t)H(t)$ komutaston bağıntısı olarak bilinir. Öte yandan, Schrödinger eşitliğinin kuantum durumlarının normlarını değiştirmemesi önemli bir özelliktir.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \psi(t), \psi(t) \rangle &= \left(\frac{d \langle \psi(t) |}{dt} \right) |\psi\rangle + \langle \psi | \left(\frac{d |\psi(t)\rangle}{dt} \right) \\ &= i \langle \psi(t) | H^\dagger(t) |\psi(t)\rangle - i \langle \psi(t) | H^\dagger(t) |\psi(t)\rangle = 0 \end{aligned} \quad (2.46)$$

eşitliği sağlandığından ($\hbar = 1$) Hamiltonyen hermityendir, $H(t) = H^\dagger(t)$. Aslında Schrödinger eşitliği doğrusaldır. Eşitliğin çözümü ise üniter işlemcilerin çarpımından oluşan ve üniter olan $U(t, t_0)$ ($U(t, t_0)U(t, t_0)^\dagger = \mathbb{1}$) işlemcisi kullanılarak,

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (2.47)$$

şeklinde yazılır. Saf durumlar ($Tr(\rho^2) = 1$) için yoğunluk matrisinin zamanla gelişimi,

$$\rho(t_1) = U(t_1, t_0)\rho(t_0)U^\dagger(t_1, t_0) \quad (2.48)$$

eşitliğiyle bulunur ($U^{-1} = U^\dagger$). Bu eşitlik

$$U_{(t_1, t_0)}[\cdot] = U(t_1, t_0)[\cdot]U^\dagger(t_1, t_0) \quad (2.49)$$

işlemi olmak üzere, basitçe $\rho(t_1) = U_{(t_1, t_0)}[\rho(t_0)]$ gösterimiyle de kullanılabilir. Eğer sistemin Hamiltonyeni zamandan bağımsız ise Schrödinger denkleminin çözümünden elde edilen zaman gelişim işlemcisi (üreteç), U en basit haliyle,

$$U_{(t, t_0)} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H(t - t_0)\right) \quad (2.50)$$

şeklinde elde edilir. Enerji işlemcisinin zamana bağlı olduğu durumda ise gelişim işlemcisi için iki durum söz konusudur.

Hamiltonyen farklı zamanlarda komute ediyorsa; $[H(t_1), H(t_2)] = 0 \forall (t_1, t_2)$,

gelişim işlemcisi

$$U_{(t,t_0)} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') dt'\right) \quad (2.51)$$

şeklinde tanımlanır.

Hamiltonyen farklı zamanlarda komute etmiyorsa; $[H(t_1), H(t_2)] \neq 0$, örnek olarak spin üzerine uygulanan manyetik alanın yönü değiştiğinde, $t = t_1 \rightarrow t = t_2$ değişirken $\hat{B} = B_0 \hat{x} \rightarrow \hat{B} = B_0 \hat{y}$ olarak değiştirilirse, $[\sigma_x, \sigma_y] \neq 0$ olduğundan, gelişim işlemcisi Dyson seri açılımıyla,

$$U_{(t,t_0)} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1) H(t_2) \cdots H(t_n) \quad (2.52)$$

olarak yazılır (Sakurai, 1994). Dyson genellemesiyle,

$$U_{(t,t_0)} = \mathcal{T} e^{\int_{t_0}^t H(t') dt'} \quad (2.53)$$

olarak ifade edilir ($\hbar = 1$). Burada \mathcal{T} Dyson zaman-sıralama operatörüdür. Süper operatör, $\mathcal{L}(t) = -i[H(t)^* \otimes \mathbb{1} - \mathbb{1} \otimes H(t)]$ olmak üzere denklem (2.53)'ün genel çözümü

$$\rho(t) = \mathcal{T} e^{\int_{t_0}^t \mathcal{L}(t') dt'} \rho(t_0) \quad (2.54)$$

şeklinde yazılır.

2.4.4. Açık kuantum sistemlerinde zamanla gelişim

Açık kuantum sistemler, sistem, S , ve çevre, E , olmak üzere iki parçadan meydana gelir. Böyle bir sistemin Hilbert uzayı, $\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E$ ve bu uzayda tanımlı öz-durumları ise $|\psi\rangle = |\psi_S\rangle + |\psi_E\rangle$ şeklinde tanımlanır. Sistemin Hamiltonyeni ise

$$H = H_S \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes H_E + H_I \quad (2.55)$$

şeklinde yazılır. Burada $H_I = \sum_{\alpha} A_{\alpha} \otimes B_{\alpha}$, sistemle çevre arasındaki etkileşimi temsil eder.

Açık kuantum sistemlerde zamanla gelişim için çeşitli yaklaşımlar vardır (Attal vd, 2006; Ingarden vd, 1997). Bu tezin ilerleyen bölümünde kullanılacağından dolayı master denklemi olarak Born-Markov yaklaşım teorisi göz önüne alınmıştır. Markovyan master denklemi, sistemin hafızasız (geçmişsiz) bir çevreye bağlandığı (temas ettiği) durumlarda kullanılır. $\rho(t)$ yoğunluk

matrisi ile verilen bir sistem için master denklemini Lindblad formu ile

$$\dot{\rho}(t) = \mathcal{L}[\rho] \quad (2.56)$$

verilir. Burada, $\mathcal{L}[\rho]$, Lindblad üretici,

$$\mathcal{L}[\rho] = -i[H, \rho(t)] + \sum_{k=1}^M \left(\Gamma_k \rho(t) \Gamma_k^\dagger - \frac{1}{2} \Gamma_k^\dagger \Gamma_k \rho(t) - \frac{1}{2} \rho(t) \Gamma_k^\dagger \Gamma_k \right) \quad (2.57)$$

şeklinde yazılır (Schaller, 2014). Bu ifadede H hermityen ve Γ_k ise keyfi bir işlemcidir (Lindblad işlemcisi). Ayrıca eşitliğin sağındaki ilk terim, $-i[H, \rho(t)]$, üniter gelişimi sağlayan Schrödinger terimi, toplam sembolü ile verilen terimler ise, sistemle çevre arasındaki etkileşimi temsil eden bölümdür.

Lindblad eşitliğini açıklamak için diğer bir yol da vektörize edilmiş yoğunluk matrisi, $\dot{\rho} = (H + \mathcal{G})\rho$, kullanmaktır. Burada \mathcal{G} üretici;

$$\mathcal{G} = \sum_{m=0}^M \left(\Gamma_m \otimes \Gamma_m - \frac{1}{2} \mathbb{1} \otimes (\Gamma_m^\dagger \Gamma_m) - \frac{1}{2} (\Gamma_m^\dagger \Gamma_m) \otimes \mathbb{1} \right) \quad (2.58)$$

şeklinde ve Hamiltonyen terimi ise $H = -i(H \otimes \mathbb{1} - \mathbb{1} \otimes H)$ ' dir (Cappellaro, 2012). Bu formda Lindblad denklemini lineer eşitliğe dönüştürür ve bu yeni formda denklemin çözümü daha kolaylaşır. Bu sayede Denklem (2.57)'in çözümü,

$$\rho(t) = \exp[(H + \mathcal{G})(t)]\rho(0) \quad (2.59)$$

olarak elde edilir. Bu ifadede süper operatör, $S = \exp[(H + \mathcal{G})(t)]$ 'dir. Açık kuantum sistemlerinde süper operatör tanımını daha detaylı olarak literatürde bulunabilir (Havel, 2003).

Bu iki bölümde tezin ilerleyen bölümleri için gerekli araçlar verildi. Bunlar kapalı sistemlerde adyabatik kuantum formalizmi ve açık sistemlerde izokorik kuantum formalizmidir.

2.5. Nükleer Manyetik Rezonans

Molekül içerisindeki kubitler (spin-1/2), molekülün kimyasal yapısı nedeniyle kaynaklanan yerel manyetik alanlarındaki farklılıklarından dolayı farklı rezonans frekanslarına sahiptirler (Ladd, 2005). Bu olay kimyasal kayma olarak isimlendirilir. Ayrıca kubitler arası etkileşimler sistemin enerji diagramında

yarılmalara neden olur. Bunun yanında spin-boyutları da göz önüne alındığında sistemde dipolar ve kuadrapolar etkileşmeler de gözlenebilir. Tüm bu özellikler nükleer manyetik rezonans (NMR) teknikleri kullanılarak incelenebilir.

Konvensiyonel bir NMR aygıtı temelde bir yönde (genelde z -yönü) kuvvetli homojen manyetik alan (süperiletken mıknatıs) içerir. Bu alan içerisine koyulan örnek sahip olduğu spin manyetik momentinden dolayı kuvvetli manyetik alanda küçük bir sapma ile dizilir. Oluşan torkun etkisiyle spin manyetik moment vektörü alan etrafında belirli bir rezonans frekansında (Larmor frekansı) dolanmaya başlar. Bunun yanında xy düzleminde hem RF pulsu üretebilen hemde puls kaldırıldığında ortaya çıkan sinyali indükleyen bobinler mevcuttur. Aynı bobin NMR'da hem yazma hemde okuma için kullanılabilir. Ayrıca gelişmiş bir puls programlayıcı ve oldukça zayıf olan sinyalleri yükselten hassas devreler de aygıtın elektroniksel donanımını tamamlayan önemli bölümlerdir (Levitt, 2008).

2.5.1. Nükleer spinlerin durağan manyetik alanla etkileşmesi

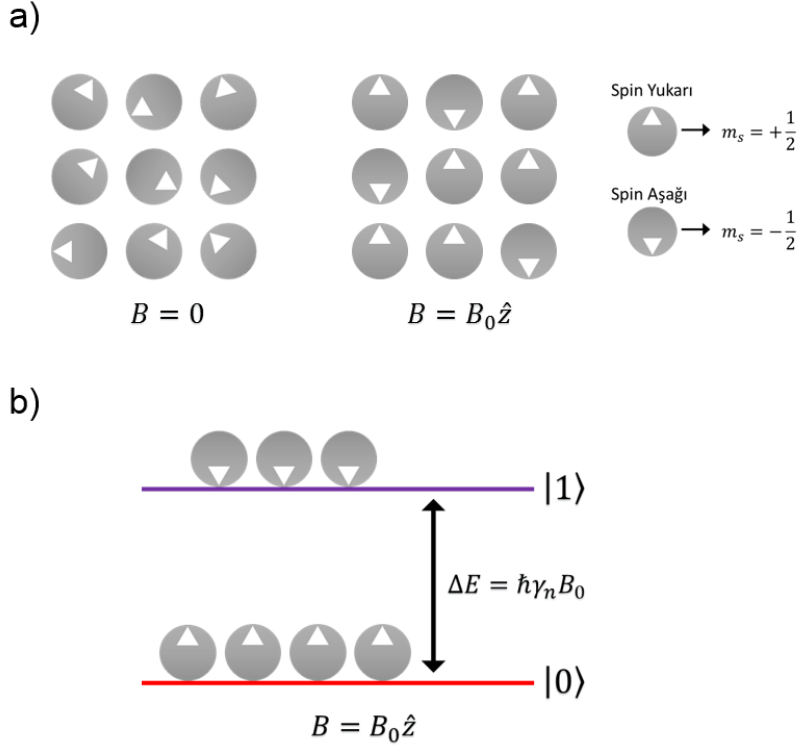
Diyamanyetik çekirdekler manyetik momentlerinden dolayı, uygulanan manyetik alanla etkileşirler. Atomik spektroskopide bu etkileşme Zeeman olayı olarak bilinir. Manyetik moment vektörü μ ve spin açısai momentum işlemcisi I (boyutsuz) olmak üzere bu iki vektör arasındaki ilişki; $\mu = \gamma_n \hbar I = g \mu_N I$ 'dır. γ_n çekirdeğin jromanyetik oranı, $\mu_N = e \hbar / 2 m_p c$ nükleer magnetonu ve g ise g -faktörüdür.

z -yönünde uygulanan durgun manyetik alan $B_0 \hat{z}$ olduğunda, çekirdek için yazılan Hamiltonyen ifadesi,

$$H = -\gamma_n B_0 I_z = \hbar \omega_0 I_z \quad (2.60)$$

şeklindedir. Burada ω_0 Larmor frekansı ($\omega_0 = -\gamma_n B_0$) ve I_z spin açısai momentum işlemcisinin z -bileşenidir. Böyle bir sistemin enerji seviyeleri arasındaki fark spin açısai kuantum sayısı $m_s = \pm 1/2$ olduğundan $\Delta E = \gamma_n \hbar B_0$ 'dır. Spinler üzerine dışarıdan bir manyetik alan uygulanmıyorsa, geliş güzel yönlendirirler. Ancak dışarıdan manyetik alan uygulandığında spin manyetik kuantum numaralarına göre manyetik alan etrafında dizilirler.

Şekil 2.3'de $I = 1/2$ için manyetik alanla spinlerin etkileşmesi gösterilmiştir.



Şekil 2.3. a) Dışarıdan manyetik alan uygulanmazken ($B = 0$) ve uygulanırken ($B = B_0 \hat{z}$) spinlerin (proton) yönelimleri. b) Belirli bir durağan manyetik alan altında spinlerin enerji seviyelerine ($|0\rangle$ taban seviyesini, $|1\rangle$ ise uyarılmış seviyeyi temsil eder) dağılımları

2.5.2. Nükleer spinlerin değişen manyetik alanla etkileşmesi

Spinlerin sabit dış manyetik alan altında (NMR için bir kaç Tesla) enerji seviyelerine dağılması Boltzmann dağılımı ile olur. Çekirdek spinleri bu alan etrafında yukarı veya aşağı yönelerek MHz mertebesindeki frekanslarda dönerler. Bu yönelimler enerji seviyelerini temsil etmektedir (Şekil 2.3).

xy -düzleminde uygulanan ve sistemi Larmor frekansında rezonansa getirecek dalgalanan zayıf bir manyetik alan $B_1(t)$ sayesinde enerji sevieleri arasında geçiş sağlanabilir. t puls süresi olmak üzere; x -ekseninde $B_1(t) = 2B_1 \cos(\Omega t + \phi) i$ (Ω uygulanan manyetik alanın frekansı (RF), ϕ ise faz açısıdır) manyetik alanı uygulandığında RF Hamiltonyen,

$$H_{\text{RF}} = -\mu_n B_1(t) = -\gamma_n \hbar I_x [2B_1 \cos(\Omega t + \phi)] \quad (2.61)$$

şeklinde yazılır (Oliveira vd, 2007). Deneysel olarak NMR’da uygulanan kontrol manyetik alanı bir kaç Gauss ($10^{-4}T$) mertebesindedir.

2.5.3. Yapısal etkiler

Yapı içerisindeki spinler dış manyetik alanın spin sistemi içerisinde homojen dağılmasına engel olarak herhangi bir spinin dış manyetik alanı perdelenmiş olarak görmesine neden olur. Bu etki sonucunda spinlerin Larmor frekanslarında değişme olur. Buna Kimsayal kayma efekti denir. σ perdeleme sabiti olmak üzere Kimyasal kayma Hamiltoniyeni,

$$H_{CS} = -\mu_n B_0(1 - \sigma) = \omega'_0 I_z \quad (2.62)$$

olarak verilir. Bu efekt sayesinde molekül yapı çözümleri kolaylaşır.

Diğer bir etki ise iki spin veya spinler birbirlerine yeterince yakınsa gözlemlenir. Spinler sahip oldukları nükleer dipol momentler üzerinden etkileşir. J -etkileşmesi olarak da bilinene spin-spin etkileşmesi,

$$H_J = 2\pi\hbar J I_1 \cdot I_2 \quad (2.63)$$

Hamiltoniyeni ile ifade edilir. Bu ifade heteronükleer sıvılar için $H_J = 2\pi\hbar J I_z^{(1)} I_z^{(2)}$ olarak basitleştirilir (Oliveira vd, 2007).

Bunun yanında, NMR da dipolar çiftlenim ve kuadrupolar çiftlenim etkileri de mevcuttur (Levitt, 2008). Ancak bu etkiler tezde ihmal edildiğinden genel bilgilerde yer verilmemiştir.

2.5.4. Başlangıç durumu

NMR’da uzun bir süre dışarıdan radyo frekans (RF) pulsu uygulanmadığında, örnek termal denge durumuna geri dönecektir. Ardından sistemin yoğunluk matrisi tekrar Boltzmann dağılımı ($e^{-H/k_B T}$) ile orantılı olur. Normalde, çevrenin sıcaklığı, taban durumu ve uyarılmış durum arasındaki enerji farkından çok daha fazladır $\hbar\omega \ll k_B T$ ($H/k_B T \approx 10^{-4}$). Zayıf çiftlenim büyüklüğü rezonansı frekans ile kıyaslandığında ihmal edilebilir. Böylece

n -spinli bir sistem için termal denge durumu genel olarak,

$$\rho_{\text{eq}} = \frac{e^{-H/k_B T}}{\text{Tr}(e^{-H/k_B T})} \approx \mathbb{1} - \frac{1}{k_B T} (\epsilon_1 \sigma_z^1 + \epsilon_2 \sigma_z^2 + \cdots + \epsilon_n \sigma_z^n) \quad (2.64)$$

şeklinde ifade edilebilir (Zhang vd, 2016).



3. MATERYAL VE YÖNTEM

Bu bölümde farklı iki kuantum durumu arasındaki uzaklık gibi ilişkilerin nicel olarak nasıl ölçülebildiği hakkında yöntemler verilmiştir. Bunun yanında ısı-küveti algoritmik soğutma yöntemi anlatılmıştır.

3.1. Kuantum Durumları Arasında İlişki-Ölçüm Yöntemleri

3.1.1. İki kuantum durumu arasında fidelity ölçümü

Kuantum bilgi teorisinde iki durum arasında metrik olmayan bir uzaklık Fidelity(Transition Probability) yöntemi ile ölçülebilir. ρ_1 ve ρ_2 iki kuantum durumunu temsil eden yoğunluk matrisleri olmak üzere; bu iki durum arasındaki Fidelity,

$$F(\rho_1, \rho_2) = \left(\text{Tr} \sqrt{\sqrt{\rho_1} \rho_2 \sqrt{\rho_1}} \right)^2 \quad (3.1)$$

bağıntısı ile hesaplanır (Uhlmann, 2011). Eğer kuantum durumları, $|\psi_1\rangle$ ve $|\psi_2\rangle$, saf durum ise $F = |\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle|^2 = \text{tr}(\rho_1 \rho_2)$ 'dir. Bu şartlarda Fidelity maksimum geçiş olasılığına eşittir (Miszczyk, 2009). Ayrıca Fidelity bazı işlevsel özelliklere sahiptir. Bunlar;

- Normalizasyon, $0 \leq F(\rho_1, \rho_2) \leq 1$
- Simetri, $F(\rho_1, \rho_2) = F(\rho_2, \rho_1)$
- Çok kavitelilik, $F(\rho_1 \otimes \rho_2, \rho_3 \otimes \rho_4) = F(\rho_1, \rho_3)F(\rho_2, \rho_4)$
- Üniter değişmezlik, $F(\rho_1, \rho_2) = F(U\rho_1U^\dagger, U\rho_2U^\dagger)$

3.1.2. Kuantum bağıl entropi

Kuantum bağıl entropi, kuantum durumlarının istatistiksel ayırt edebilirliği açısından doğal yoruma sahiptir. Bu yorum, iki yoğunluk matrisi arasındaki uzaklık ölçümünün (metrik olmayan) bir göstergesidir. Hilbert, \mathcal{H} , uzayında tanımlanan \mathcal{Q} sisteminin saf durumu normalize edilmiş $|\psi\rangle$ vektörü ile ifade edilebilir. Ancak genel bir durumu (karışık durum) ifade etmek için Hilbert

uzayında tanımlanan yoğunluk işlemcisi, ρ , gereklidir. Saf durum $|\psi\rangle$ için yoğunluk matrisi basitçe $|\psi\rangle\langle\psi|$ projeksiyon işlemi ile elde edilir. Karışık durumlar ise ($|\psi\rangle = a_0|\psi_0\rangle + a_1|\psi_1\rangle$) ise, ρ projeksiyonların konveks kombinasyonlarıdır. Böyle bir sistemin entropisi,

$$S_{vn}(\rho) = -Tr(\rho \ln \rho), \quad (3.2)$$

ile hesaplanır ve *von Neumann entropi* olarak adlandırılır. ρ ile temsil edilen bir durumun entropisi negatif değerde olamaz ve sadece saf durumlar için entropi sıfır olabilir ($S_{vn}(\rho) \geq 0$). Aynı Hilbert uzayındaki bir durumun entropisi ile iki durum arasındaki bağıl entropi yakından ilişkilidir. ρ_A ve ρ_B iki farklı yoğunluk işlemcisi olmak üzere kuantum bağıl entropi,

$$S(\rho_A||\rho_B) = Tr(\rho_A \ln \rho_A) - Tr(\rho_A \ln \rho_B), \quad (3.3)$$

şeklde yazılır (Schumacher & Westmoreland, 2000). Bu ifade ρ_A 'nın ρ_B 'ye göre kuantum bağıl entropisini gösterir ($S(\rho_A||\rho_B) \neq S(\rho_B||\rho_A)$). Bağıl entropinin diğer bazı özellikleri,

- Pozitiflik, $S(\rho_A||\rho_B) \geq 0$, ve $\rho_A = \rho_B$ ise $S(\rho_A||\rho_B) = 0$,
- Toplanabilirlik, $S(\rho_A \otimes \rho_C||\rho_B \otimes \rho_D) = S(\rho_A||\rho_B) + S(\rho_C||\rho_D)$,
- Alt Sınır, $\|\rho_A - \rho_B\|^2/2 \leq S(\rho_A||\rho_B)$

olarak verilebilir.

3.2. Algoritmik Soğutma

Polarizasyon eşitliğine, $\epsilon_b = \tanh(\Delta E/2k_B T)$, bakıldığında sistemi saflaştırmak (polarizasyonu arttırmak) için iki açık yöntem kolayca görülebilir. Bunlardan ilki sistemin sıcaklığını, T , düşürmektir. Bu çevresiyle temas halinde olan sistemin (açık sistem) çevresinin sıcaklığının düşürülmesiyle mümkündür. Bu sayede sistem çevresiyle tekrar termal dengeye gelerek polarizasyonunu arttıracaktır. Bunu sağlamak için deneysel olarak sıcaklığın oldukça düşük noktalara ($< mK$) çekilmesi gereklidir. Bu işlem oldukça zor ve pahalıdır. Diğer yöntem ise enerji seviyeleri arasındaki farkı, ΔE , arttırmaktır. NMR gibi manyetik rezonans tekniklerinde uygulanan dış manyetik alan göz önüne

alındığında polarizasyon $\approx 10^{-5}$ mertebelerindedir. Polarizasyonu önemli ölçüde arttırmak için uygulanan dış manyetik alanın büyüklüğü oldukça yüksek değerlere çıkartılmalıdır ki bu da teknolojiye büyük gelişmeleri gerektirmektedir.

Öte yandan diğer bir yöntem ise; entropinin, sistemdeki tüm kubitler üzerinden, kuantum bilgi işleme teknikleri kullanılarak, sistem içinde yeniden dağıtılarak sistem içerisindeki düşük polarizasyona sahip kubitlerin polarizasyonlarının artırılmasıdır. Geri alınabilir bu entropi sıkıştırma işlemi sonucunda sistem içerisinde soğuk ve sıcak bölgeler oluşur. Ancak bu teknik kapalı sistemlerde entropi sıkıştırma sürecini kısıtlayan *Shannon sınırı* ile limitlidir (Moussa, 2005). Shannon sınırını aşmak için entropinin sistemden dışarı pompalanması amacıyla sistem bir ısı rezervine temas ettirilebilir. Bu sayede sistemdeki entropi ısı rezervine aktarılarak uzaklaştırılmış olur. Bu teknik *Isı-Küveti Algoritmik Soğutma* olarak adlandırılır (Atia vd, 2016). Bu prosedür teknolojiye büyük gereksinimler ihtiva etmediğinden oldukça hesaplı, uygulanabilir ve etkilidir.

3.2.1. Polarizasyon ve termal denge

İki seviyeli bir spin-1/2 sistemi, T sıcaklığındaki bir çevre ile termal dengeye ulaştığında sistemin yoğunluk matrisi Gibbs dağılımıyla elde edilir. Sistemin $|i\rangle$ enerji seviyesindeki iş olasılığı $n(E_i) = \exp[-E_i/k_B T]/Z$ 'dir. Burada $Z = \exp[-E_0/k_B T] + \exp[-E_1/k_B T]$ bölme (partition) fonksiyonudur. Polarizasyon (ϵ_b) sapma(bias) olarakta bilinir, iki enerji seviyesi arasındaki olasılık farkı olarak tanımlanır ve

$$\epsilon_b = n(E_0) - n(E_1) = \tanh\left(\frac{\Delta E}{2k_B T}\right). \quad (3.4)$$

denklemleriyle hesaplanır. Polarizasyonun mutlak değeri, $|\epsilon_b|$, 0 ile 1 arasında değişir. Oda sıcaklığında çalışan NMR sistemleri için $\Delta E \ll k_B T$ olduğundan polarizasyon, $\epsilon_b \approx \Delta E/2k_B T$ olarak yazılabilir. Burada ardışık iki enerji seviyesi arasındaki fark, $\Delta E = E_0 - E_1$ 'dir. Konvansiyonel NMR sistemlerinde proton polarizasyonu yaklaşık 10^{-5} mertebesinde (Park vd, 2015).

NMR sistemleri için termal denge durumu $\epsilon_b \approx \Delta E/2k_B T$ yaklaşımı göz

önüne alındığında Gibbs eşitliği,

$$\rho_0 = \frac{1}{Z} e^{-H/k_B T} \approx \frac{1}{2} \mathbb{1} + \frac{1}{2} \epsilon_b \sigma_z. \quad (3.5)$$

şeklinde basitleştirilir.

I_1 ve I_2 iki J -çiftlenmiş (bağlanmış) nükleer spinler olmak üzere bu iki spin arasında heteronükleer etkileşim olduğu durumda J çiftleniminin büyüklüğü, spinlerin rezonans frekanslarının farkı yanında oldukça küçüktür $J \ll |\omega_1 - \omega_2|$ bu duruma zayıf çiftlenim denir. Böyle bir sistemin Hamiltonyeni,

$$H = -\hbar\omega_1 I_{z1} - \hbar\omega_2 I_{z2} + 2\pi\hbar J I_{z1} I_{z2} \quad (3.6)$$

olarak yazılır. Rezonant frekanslar ω_1 ve ω_2 izotropik kimyasal kayma etkilerini içermektedir. Öyleyse T sıcaklığında termal dengedeki sistemin yoğunluk işlemcisi, yüksek sıcaklık yaklaşımı göz önüne alınarak denklem (3.5) den;

$$\rho_0 = \frac{1}{4} \mathbb{1} + \frac{1}{4} \frac{\hbar\omega_1}{k_B T} I_{z1} + \frac{1}{4} \frac{\hbar\omega_2}{k_B T} I_{z2} \quad (3.7)$$

olarak elde edilir.

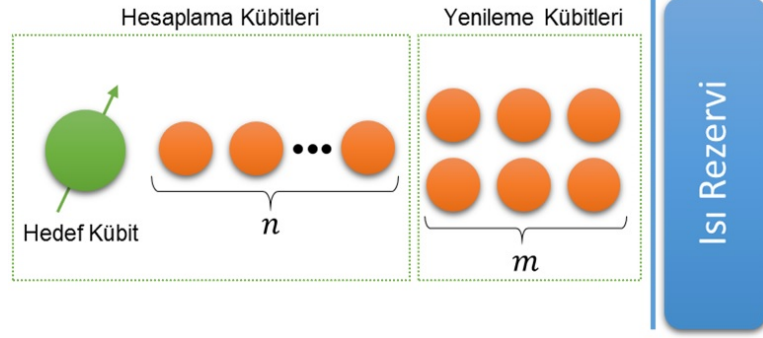
3.2.2. Partner paylaşma algoritması

Partner paylaşma algoritma (PPA) protokolü, entropinin sistemden atılması için optimum fiziksel uygulamaları içerir. Şekil 3.1'de görülebileceği üzere entropi sıkıştırma (hesaplama kubitleri) ve yenileme olmak üzere iki ana adımdan oluşmaktadır .

Entropi sıkıştırma işlemcisi (U) uygulandığı sistemi temsil eden yoğunluk matrisinin, ρ , köşegen elemanlarını (iş olasılıklarını) büyükten küçüğe doğru azalan şekilde sıralar. Böylece *hedef* kubitin polarizasyonunun artması sağlanır. Bu adım,

$$\rho \xrightarrow{\text{Sıkıştırma}} \rho' = U \rho U^\dagger \quad (3.8)$$

ifadesiyle temsil edilir. Bunun yanında entropi sıkıştırma işlemi sayesinde yenileme kubitlerinin sıcaklığı da artmaktadır. Yenileme adımında, m yenileme kubitleri, ısı rezervi ile temas ettirilerek termal dengeye ulaşması sağlanır. Böylece bu kubitler yenilenmiş olur. Bu adım fiziksel olarak yeniden-kurma



Şekil 3.1. PPA tekniği için önce hesaplama kübitleri üzerine entropi sıkıştırma işlemi kuantum bilgi işleme teknikleriyle uygulanır. Yenileme (Yeniden Kurma) kübitlerine doğru yönlendirilen entropi bu kübitler aracılığıyla ısı-rezervine atılır

kübitleri üzerinden alınan İz (trace) işlemi ardından elde edilen kübitlerin ısı küvetindeki kübitlerle yerdeğiřtirmesi olarak özetlenebilir. Bu işlem sonrasında, maksimum polarizasyona sahip yeniden-kurma kübitlerinin polarizasyonları ısı küvetinin polarizasyonuna eşit olacaktır. Bu süreçte ısı-küvetinin çok büyük ısı kapasitesine sahip olduđu ve yenileme kübitleri ile ısı-küveti arasındaki etkileşmenin ısı-rezervinin sıcaklığını deđiřtirmedeđi kabul edilmektedir. Bu adımda sistemin yoğunluk matrisindeki deđişim;

$$\rho' \xrightarrow{\text{Yenileme}} \rho'' = Tr_{m_{\text{kübitleri}}}(\rho') \otimes \rho_{\epsilon_b}^{\otimes m} \quad (3.9)$$

ifadesiyle hesaplanır. Bu ifadede,

$$\rho_{\epsilon_b} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \epsilon_b & 0 \\ 0 & 1 - \epsilon_b \end{pmatrix}, \quad (3.10)$$

ısı-rezervindeki bir kübitin yoğunluk matrisi ve ϵ_b ise ısı-küvetinin polarizasyonudur. Bu iki adımın sistemin yoğunluk matrisi üzerindeki etkisi,

$$\rho \rightarrow \rho'' = Tr_{m_{\text{kübitleri}}}(U\rho U^\dagger) \otimes \rho_{\epsilon_b}^{\otimes m} \quad (3.11)$$

şeklinde verilir.

Geri alınabilir sıkıştırma ve yenileme adımları, hedef kübitin sıcaklığı, (polarizasyonu) istenilen değere yada sođutma limitine ulařana kadar arka arkaya uygulanarak tekrarlanır. PPA tekniđinde en önemli nokta yenileme ve hesaplama kübitlerinin fiziksel gereksinimlerinin birbirinden farklı olmasıdır. NMR özellikleri dikkate alındığında yenileme kübitleri ısı küvetiyle kuvvetli

temas ettirilmelidir. Bu sayede kubitlerin ısı-küvetinin sıcaklığına oldukça hızlı ulaşması sağlanmalıdır. Diğer taraftan hesaplama kubitleri, algoritmik soğutulduktan sonra polarizasyonlarını korumak (çok az kaybetmek) için uzun durulma zamanlarına sahip olmalıdırlar. Bu durum PPA tekniğinin NMR’da uygulanması için olmazsa-olmaz şartıdır.

3.3. Termal Dengelenme

Isı-rezervi ile termal dengede bulunan iş-kaynağının indirgenmiş yoğunluk matrisi,

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta H} = \sum_{n=1}^4 P_n(T) |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \quad (3.12)$$

şeklinde verilir. Burada $P_n(T) = e^{-\beta E_n}/Z$ öz-durumların iş olasılıkları, $\beta = 1/k_B T$ ($k_B = 1$), T sıcaklık ve $Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$ bölme fonksiyonudur. Denklem (3.12) ancak ısı rezervi ile sonsuz-uzun zamanda eklileşmelerde geçerlidir. Öte yandan sistemin zamanla gelişimi incelendiğinde üzerinde çalışılan modelin termalizasyonu açıkça gözlenebilir.

3.3.1. Kübit termalizasyonu

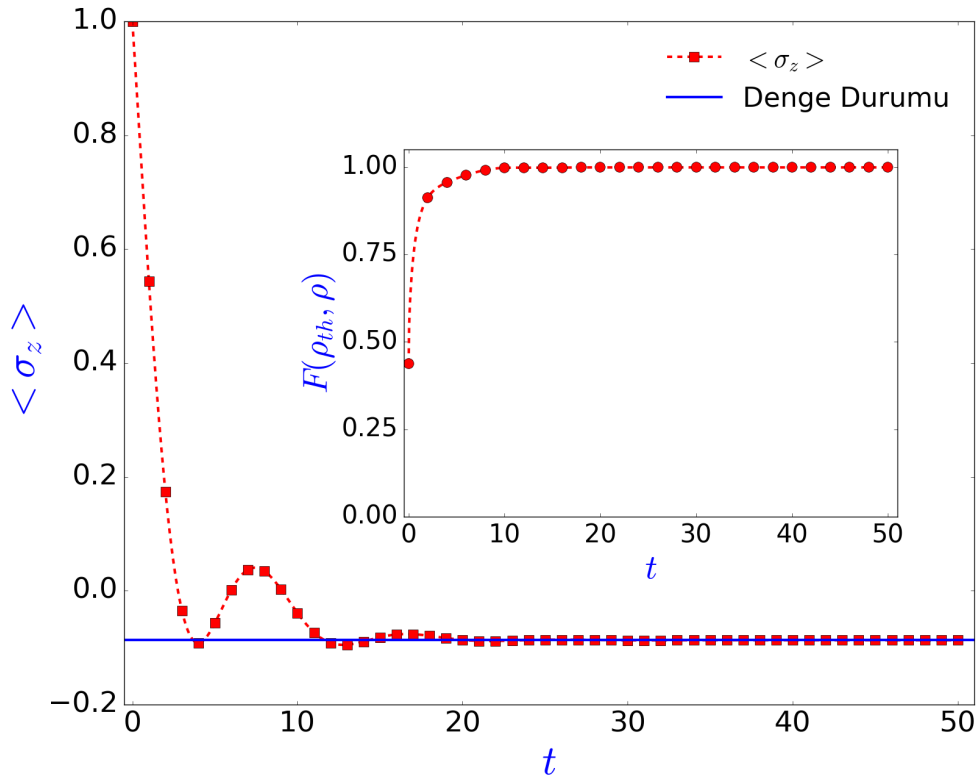
Isı-rezervi ile temas halinde olan keyfi bir spin göz önüne alındığında, $H = B_0 \sigma_z + B_1 \sigma_x$, sistemin zamana bağlı gelişimi Born ve Markov yaklaşımları göz önüne alınarak Lindblad master denklemleri ile

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} = & -i[H, \rho] - \frac{\gamma}{2} \left[(\bar{n} + 1) \sum_{i=1}^2 (\sigma_+^{(i)} \sigma_-^{(i)} \rho - \sigma_-^{(i)} \rho \sigma_+^{(i)}) \right. \\ & \left. + \bar{n} \sum_{i=1}^2 (\sigma_-^{(i)} \sigma_+^{(i)} \rho - \sigma_+^{(i)} \rho \sigma_-^{(i)}) + H.c. \right] \end{aligned} \quad (3.13)$$

şeklinde yazılabilir. $\bar{n} = 1/[\exp(\omega/T) - 1]$ ortalama titreşken sayısıdır. γ sistemin eş-evresizlik oranıdır (Altintas vd, 2014). Şekil 3.2’de alınan keyfi sistem için yoğunluk matrisinin zamanla termal dengeye ulaştığı görülmektedir. $B_0 = 0.5$, $B_1 = 0.5$ ve $T = 2.0$ parametrelerinde termal dengeye ulaşmış sistemin yoğunluk matrisi Gibbs eşitliği kullanılarak bulunmuştur. Ardından başlangıç durumu $|0\rangle$ olan spin için denklem (3.13) kullanılarak ($\gamma = 0.05$) yoğunluk matrisinin zamanla gelişimi nümerik olarak hesaplanmıştır. Şekil 3.2 iç grafikte termalize olmuş yoğunluk matrisi (ρ_{th}) ile master denklemden elde

edilen yoğunluk matrisi ρ arasındaki Fidelity'ye bakılmıştır. Sistem zamanla termal olarak dengeye yaklaştığında Fidelity değeri de 1'e yaklaşmaktadır.

Öte yandan termal dengede bulunan bir sistemin yoğunluk matrisi sabit olacağından sistem üzerindeki ölçülebilirin beklenen değeri de sabit olacaktır. Bu nedenle Şekil 3.2 ana grafikte zamanla değişen yoğunluk matrisi üzerinde σ_z 'nin beklenen değerine bakılmıştır. Görüldüğü üzere belirli bir zaman sonra sistem termal dengeye ulaştığından $\langle \sigma_z \rangle$ 'nin değerinde değişme olmamaktadır.



Şekil 3.2. σ_z işlemcisinin zamana bağlı beklenen değeri $\langle \sigma_z \rangle = Tr(\sigma_z \rho)$ (Ana Grafik). Zamana bağlı yoğunluk matrisinin ρ , termal denge yoğunluk matrisine ρ_{th} göre Fidelity $F(\rho_{th}, \rho)$ ölçümü (İç Grafik). ρ , başlangıç durumu $|0\rangle$ olarak alınan sistem için master eşitliğinin gelişimi ile $B_0 = 0.5$, $B_1 = 0.5$, $\gamma = 0.05$ ve $T = 2.0$ parametreleri için belirlendi

4. BULGULAR VE TARTIŞMA

Bu bölümde tezde süreci boyunca yapılan çalışmalar detaylı olarak anlatılmıştır. Dört farklı çalışmadan oluşan bu bölümde ilk olarak spin tabanlı kuantum Otto motoru üzerinde iş ve verimlilik analizleri yapılmıştır. Ardından adyabatik süreçlerdeki sürtünme kayıpları hesaplanarak Otto çevrimindeki iş ve verimlilik üzerindeki etkilerine bakılmıştır. Ayrıca NMR’da basit bir kuantum Otto çevriminin nasıl uygulanabileceği modellenmiştir.

4.1. Kuantum Otto Çevriminde Lipkin-Meshkov-Glick Modelinin İş Kaynağı Olarak İncelenmesi

Çiftlenmiş spinlerin uygulanmasında anahtar parametre olarak etkileşmelerin anizotropisi kullanılabilir. Halihazırda var olan kuantum ısı motoru modelleri, anizotropi etkilerinin, motorun iş üretimini ve verimliliği üzerindeki etkilerini şimdiye kadar göz ardı etmişlerdir. Bu çalışmada sunulan katkılar bu bakımdan referans olarak gösterilebilir.

Bu çalışmada elde edilen sonuçlar, h enerji aralığında bulunan kubit için ilk Kieu tarafından incelenen, kıyaslama koşulları ve eşitlik setleri sağlayan tek-kübit kuantum Otto motoru ile karşılaştırılmıştır (Kieu, 2004; Kieu, 2006). h_1 ve h_2 arasındaki adyabatik değişimler için verimlilik, kayıpsız Otto çevrimi için $h_1 > h_2$ olması koşuluyla $\eta = 1 - h_2/h_1$ olarak bulunur. Otto çevriminin verimliliği, $T_1 > (h_1/h_2)T_2$ ifadesi ile verilen pozitif iş şartından (PWC) dolayı Carnot verimliliği $\eta_c = 1 - T_2/T_1$ ile sınırlandırılır. Mevcut çalışmada bu şartlar Kieu’nun şartları olarak adlandırılmıştır. Çok seviyeli sistem (Quan vd, 2005), basit harmonik osilatör (Quan vd, 2007a), çiftlenmemiş spinler (Altintas vd, 2014; Thomas & Johal, 2011; Altintas & Müstecaplıoğlu, 2015) ve özel çiftlenmiş spinler (Quan vd, 2007a) tabanlı birkaç kuantum Otto motoru operasyonu, Kieu’nun koşullarıyla değerlendirilmiştir. Bu çalışmada, anizotropik durumlarda spin etkileşmeleri tarafından kuantum avantajları kazandırmak için bu koşulların hangi derecede bozulabileceği araştırılmıştır. Bunlara ek olarak

elde edilen sonuçlar Heisenberg-tipi etkileşen çiftlenmiş spinlerin benzer çalışmalarıyla karşılaştırılmıştır. Bu çalışmalar, etkileşmenin iş ve verimliliği arttırdığını göstermiştir (Altintas vd, 2014; Thomas & Johal, 2011; Huang vd, 2013a; Ivanchenko, 2015; Huang vd, 2014b; Altintas & Müstecaplıoğlu, 2015) ve etkileşmeyen iş-modelleri (Altintas vd, 2014; Thomas & Johal, 2011) tarafından ulaşılamayan rejimlerde iş çıkarmanın olasılığını açıklamıştır. Sonuçlar, ortak iş üretiminin arttırılması, yeni çalışma rejimlerinin ortaya koyulması, maksimum işin ideal verimlilikte optimizasyonu ve pratik avantajların kazandırılması için anizotropinin özgün avantajlarını ortaya çıkarmıştır.

Elde edilen sonuçlar, LMG modeli ile kuantum Otto çevriminde Carnot sınırına yaklaşılabileceğini gösterdi. Adyabatik değişimlerin ilk ve ikinci durumlarında Kieu'nun pozitif iş şartı ve verimlilik koşullarının ihlal edildiği parametreler belirlendi. Gerçekten, sistem parametrelerinin dikkatli bir şekilde kontrol edilmesiyle, LMG kuantum Otto çevrimi, klasik Carnot verimliliğine yakın, pozitif iş üretebilir. Son durumda ise, ısı motorunun kübit-Otto verimliliğinde çalıştığı bulundu. Dahası, Kieu'nun pozitif iş koşulunun, LMG Otto çevrimi operasyonu için gerekli olduğu varsayıldı (tahmin edildi). Öte yandan, üçüncü durumda çiftlenim etkilerinin iş çıkarımını, Otto çevriminde kübit tarafından üretilen işin on iki katına kadar arttırdığı bulundu.

Sonuç olarak, çiftlenmiş spinler için, iş-kaynağındaki kuantum korelasyonlar ve kuantum ısı motorlarının iş-verimliliği arasındaki etkileri aydınlatıcı çalışmalar üzerinde durulmuştur (Altintas vd, 2014; Zhang, 2008; Huang vd, 2013b; Zhang vd, 2007; Huang vd, 2012; Wang vd, 2009; Hubner vd, 2014; Azimi vd, 2014; Albayrak, 2013; He vd, 2012b).

4.1.1. Lipkin-Meshkov-Glick modeli

Lipkin-Meshkov-Glick modeli, ilk olarak nükleer fizikte N tane etkileşen fermiyon sistemlerini sistematik olarak çok-gövdeli (many-body) yaklaşımlarını araştırmak için önerilmiştir (Lipkin vd, 1965; Meshkov vd, 1965; Glick vd, 1965). Modelin Hamiltonyeni (H) pseudo-spin işlemcileri cinsinden

$$H = -\frac{J}{N}(S_x^2 + \gamma S_y^2) - hS_z. \quad (4.1)$$

şeklinde yazılır ($\hbar = 1$). Bu model N tane spin-1/2 seti için Pauli matrisleri σ_α ($\alpha = x, y, z$) olmak üzere toplam spin operatörleri $S_\alpha = \sum_{i=1}^N \sigma_\alpha^i/2$ ifadesi alınarak, kuantum spin sistemleri için de kullanılabilir. Bu model etkileşme kuvveti J ve anizotropi parametresi γ tarafından karakterize edilen Heisenberg XY -tipi etkileşmeler ile spinlerin karşılıklı-ortak çiftlenimlerini tanımlar. Ek olarak spinler dış transfer manyetik alan h 'a maruzdurlar. Bu çalışmada $h \geq 0$ ve $-1 \leq \gamma \leq 1$ alınırken J etkileşme terimi ferromagnetik yada anti-ferromagnetik sistemlerde $J > 0$ ve $J < 0$ olabilir. Parçacık başına düşen enerjiyi termodinamik limitte sonlu tutmak için J parametresi N 'e bölünerek normalizasyon işlemi yapılmıştır.

Bu çalışmada LMG modeli tarafından tanımlanan iki-spinli sistem kuantum Otto motorunun iş-kaynağı olarak göz önüne alınmıştır. Benzer birkaç spinli LMG modelleri kuantum dolanıklığını ve geometrik faz çalışmalarını modellemek için kullanılmıştır (Sjöqvist vd, 2010). $N = 2$ için Pauli işlemcileri cinsinden LMG modeli yazıldığında,

$$H = -\frac{J}{4} (\sigma_x^1 \sigma_x^2 + \gamma \sigma_y^1 \sigma_y^2) - \frac{h}{2} (\sigma_z^1 + \sigma_z^2) - \frac{J(1+\gamma)}{4}. \quad (4.2)$$

ifadesi elde edilir. Model Hamiltonyeninin (4.2) bu ifadesi, $\gamma = 1$ olduğu durumda oluşan izotropik XY modeli tarafından $x - y$ düzlemindeki çiftlenimi temsil eder. $-1 \leq \gamma < 1$ parametre aralığı $x - y$ düzlemindeki anizotropik etkileşmeyi gösterir. Özellikle $\gamma = 0$ olduğunda, Ising modeli olarak tanımlanan modelde çiftlenim tamamen x -ekseni boyunca polarize olurken, $\gamma = -1$ olduğunda ise çiftlenim bir yönde ferromanyetik olurken diğer yönde anti-ferromanyetik olur.

Eşitlik (4.2)'nin doğal bazlardaki $\{|11\rangle, |10\rangle, |01\rangle, |00\rangle\}$ özdeğer ve özvektörleri,

$$\begin{aligned} E_1 &= 0, & |\psi_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle - |01\rangle), \\ E_2 &= -\frac{1}{2}J(1+\gamma), & |\psi_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle + |01\rangle), \\ E_3 &= -\frac{1}{4}[J(1+\gamma) + \kappa], & |\psi_3\rangle &= (A_- |11\rangle + |00\rangle)/\sqrt{1 + |A_-|^2}, \\ E_4 &= -\frac{1}{4}[J(1+\gamma) - \kappa], & |\psi_4\rangle &= (A_+ |11\rangle + |00\rangle)/\sqrt{1 + |A_+|^2} \end{aligned} \quad (4.3)$$

olarak verilir. Burada $\kappa = \sqrt{16h^2 + J^2(\gamma - 1)^2}$ ve $A_\pm = (-4h \pm \kappa)/(J(\gamma - 1))$ 'dir.

4.1.2. Lipkin-Meshkov-Glick modeli üzerinde kuantum Otto çevriminin uygulanması

İki kuantum adyabatik ve iki kuantum izokorik süreç içeren kuantum Otto çevriminde Hamiltonyen H ve yoğunluk matrisi ρ ile temsil edilen iş-kaynağı (working substance) iki ısı-rezervi arasında işletilir. Adyabatik kollarda, sistemi Hamiltonyeni sonsuz yavaş süreçle değiştirilir. Bu sayede kuantum adyabatik teorem sağlanmış olur. Bundan dolayı, kuantum Otto motoru sıfır güç üretir (Ivanchenko, 2015). Aslında, kuantum sistemleri dejenere (çok katlı) enerji spektrumlarına sahip olsada, son çalışmalarda adyabatik yaklaşımın güvenli olabileceği doğrulanmıştır (Rigolin & Ortiz, 2012). Bunun yanında, sonlu-ölçüde LMG modelinin adyabatik gelişimi için etkili teknolojiler verilmiştir (Caneva vd, 2008; Caneva vd, 2009; Solinas vd, 2008; Zheng vd, 2015). Otto çevriminin izotropik evrelerinde iş-kaynağının sıcak ve soğuk ısı-rezervi ile termalizasyonu, sabit Hamiltonyenler için kabul edilmiştir. Kuantum Otto döngüsünün detayları aşağıda verilmiştir. Ayrıntılı bilgi için bölüm 2.3.3'ye bakılabilir. Bu bölümde aşağıdaki evreler Şekil 2.2'ye göre açıklanmıştır.

Evre 1: Bu evre kuantum izokorik süreçtir. Bu süreçte sonunda etkileşme kuvveti $J = J_1$ ve manyetik alan $h = h_1$ olan iş-kaynağı, $T = T_1$ sıcaklığındaki sıcak ısı-rezervi ile termal dengeye ulaşır. $H = \sum_n E_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n|$ Hamiltonyeni ile temsil edilen sistemin yoğunluk matrisi kuantum izokorik süreç sonunda Boltzmann dağılımıyla $p_n = e^{-E_n/T_1}/Z_1$ ve $Z_1 = \sum_n e^{-E_n/T_1}$ ifadeleri kullanılarak $\rho_1 = \sum_n p_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n|$ şeklinde yazılır ($k_B = 1$ olduğu birim sistemde çalışılmıştır).

Evre 2: İş-kaynağı, sıcak ısı-rezervinden izole edilip manyetik alan h_1 den h_2 'ye ve çiftlenim parametresi J_1 'den J_2 'ye değiştirilmesi ile kuantum adyabatik sürece mağruz kalır. Sistem Hamiltonyenin anlık öz durumlarında kalarak (öz durumlarını izleyerek), kuantum adyabatik teoremin tutmasını sağlar. Bu sayede her öz durumun (her enerji seviyesinin) olasılığı, p_n , adyabatik süreç sırasında korunur (Thomas & Johal, 2014). Kuantum adyabatik süreç sonunda sistemin Hamiltonyeni ve yoğunluk matrisi sırasıyla; $H' = \sum_n E'_n |\psi'_n\rangle \langle \psi'_n|$ ve

$\rho'_1 = \sum_n p_n |\psi'_n\rangle \langle \psi'_n|$ olarak verilir.

Evre 3: Sistem $T = T_2$ ($T_1 > T_2$) sıcaklığındaki soğuk ısı-rezervi ile temas ettirilerek, $h = h_2$ ve $J = J_2$ parametreleri altında, $p'_n = e^{-E'_n/T_2}/Z_2$, $Z_2 = \sum_n e^{-E'_n/T_2}$ olmak üzere yoğunluk matrisi $\rho_2 = \sum_n p'_n |\psi'_n\rangle \langle \psi'_n|$ ifadesine değiştirilir. İzokorik süreç boyunca sistemin Hamiltonyeni $H' = \sum_n E'_n |\psi'_n\rangle \langle \psi'_n|$ 'dir.

Evre 4: Soğuk ısı-rezervinden ayrılan iş-kaynağının kontrol parametrelerinin h_2 'den h_1 'e ve J_2 'den J_1 'e değiştirilmesi sonucunda ikinci adyabatik gelişime uğramasıyla, sistemin yoğunluk matrisi adyabatik süreç sonunda $\rho'_2 = \sum_n p'_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n|$ olacaktır.

İzokorik süreç sırasında iş yapılmaz. Bu nedenle, izokorik süreçlerdeki ısı-rezervi ile iş-kaynağı(ortamı) arasındaki ısı değiş tokuşu iç enerji değişimi ($U = Tr[\rho H]$) yoluyla formülize edilebilir. Evre 1'deki ve evre 3'deki ısı alışverişleri, sırasıyla Q_1 ve Q_2 olmak üzere;

$$\begin{aligned} Q_1 &= Tr[H\rho_1] - Tr[H\rho'_2], \\ &= \sum_n E_n(p_n - p'_n), \\ Q_2 &= Tr[H'\rho_2] - Tr[H'\rho'_1], \\ &= \sum_n E'_n(p'_n - p_n). \end{aligned} \quad (4.4)$$

ifadeleriyle verilir (Quan vd, 2005; Thomas & Johal, 2014). Sadece adyabatik süreçlerde iş yapılır. Enerjinin korunumundan dolayı, kuantum ısı motoru tarafından yapılan net iş,

$$\begin{aligned} W &= Q_1 + Q_2, \\ &= \sum_n (E_n - E'_n)(p_n - p'_n), \end{aligned} \quad (4.5)$$

ifadesi ile hesaplanabilir. Kuantum ısı motoru tarafından yapılan net işin $W > 0$ durumunda termal verimlilik $\eta = W/Q_1$ 'dir. Bu durum ancak termodinamiğin ikinci yasası, $Q_1 > -Q_2 > 0$, sağlandığında geçerlidir.

4.1.3. Yapılan analizler

Kuantum ısı motorundan iş çıkarmak için, LMG model göz önüne alındığında adyabatik süreçleri başlatan değişimler için üç farklı senaryo üzerinde çalışılmıştır;

i) Sabit çiftlenimde $J_1 = J_2 = J$ sadece manyetik alan seçilen iki değer arasında ($h_1 \rightarrow h_2 \rightarrow h_1$) değiştirilir; ii) sabit manyetik alan altında $h_1 = h_2 = h$, sadece çiftlenimin büyüklüğü seçilen iki değer arasında ($J_1 \rightarrow J_2 \rightarrow J_1$) değiştirilir; iii) hem çiftlenimin değeri hem de manyetik alanın değeri r sabit olmak üzere $r = J_1/h_1 = J_2/h_2$ şartı altında aynı anda değiştirilir.

Pozitif iş şartının ve verimliliğin Kieu'nun koşullarına eşit olduğu bir çok önemsiz alt durum yazılabilir (Kieu, 2004; Kieu, 2006). Eğer durum i)'de $J = 0$ ise, verimlilik ve pozitif iş şartı sırasıyla $\eta = 1 - h_2/h_1$ ve $T_1 > (h_1/h_2)T_2$ olur. Pozitif iş şartına ek olarak, kuantum ısı motorundan iş çıkarmak için $h_1 > h_2$ ifadesinin sağlanması gereklidir. Eğer durum ii)'de $h = 0$ ise, $J_1 > J_2$ olduğunda iş üreten ısı motorunun verimliliği $\eta = 1 - J_2/J_1$ olur. $\gamma = 0$ ve $\gamma = \pm 1$ olduğunda pozitif iş şartı $T_1 > (J_1/J_2)T_2$ şeklinde sadeleştirilebilir. Alt durumlarda ise Kieu'nun şartlarının kırıldığı durum i)'için $h_1 > h_2$ ve $h_1 < h_2$ ve durum ii) için ise $J_1 > J_2$ ve $J_1 < J_2$ koşulları göz önüne alınmıştır.

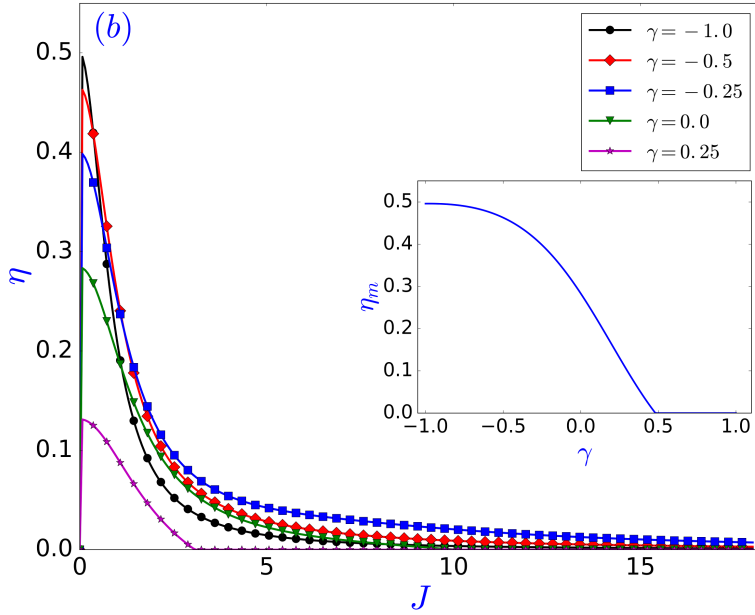
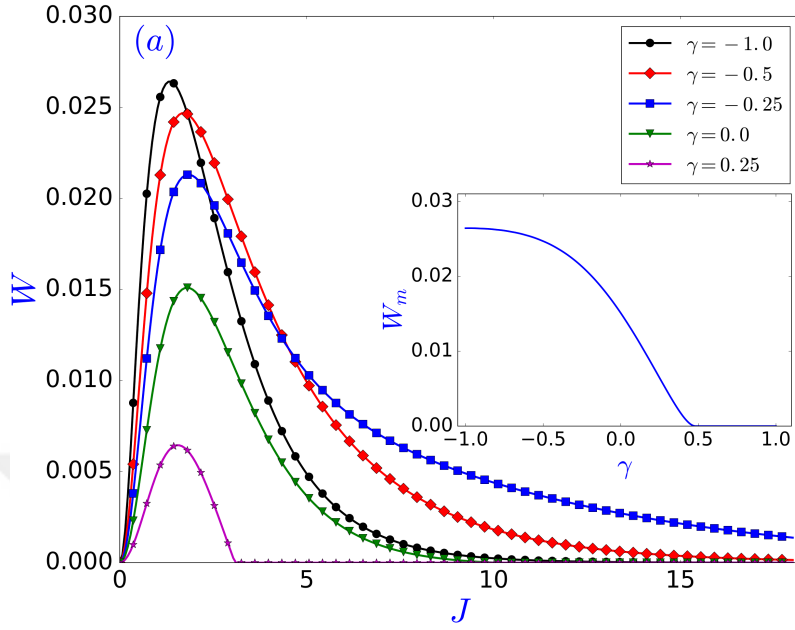
4.1.3.1 Durum i): $h_1 \rightarrow h_2 \rightarrow h_1$ ve $J_1 = J_2 = J$

Bu kısımda adyabatik kollarda sadece manyetik alan değiştirilir ve spinler arasındaki çiftlenim altında Kieu'nun eşitliklerinin bozulduğu durumlar üzerinde odaklanılmıştır. Şekil 4.1'de, iş ve termal verimlilik, çiftlenim büyüklüğüne göre çizdirilmiştir. Ayrıca, çiftlenim ve anizotropi parametrelerinin üretilen iş ile işin termal verimliliği üzerindeki etkileri $T_1/T_2 = 2$ ve $h_1/h_2 = 2$ oranları için analiz edilmiştir. Şekil 4.1'de verilen parametreler için Kieu'nun pozitif iş şartı $T_1 > (h_1/h_2)T_2$, $J = 0$ olduğunda bozular (kırılır); spinler arasındaki çiftlenim yok olduğunda, ısı motorunda pozitif iş çıkarılamaz. Şekil 4.1'de gösterildiği gibi, pozitif iş ancak çiftlenimin olduğu durumlarda çıkarılabilir. Etkileşen spinlerin kuantum ısı motoru üzerinde J 'ye bağlı yeni pozitif iş şartı tanımladığı ve kuantum ısı motorlarının çalışma limitlerinin çiftlenmemiş yada özel çiftlenmiş spinlere göre genişletildiği bilinmektedir (Quan vd, 2007a; Altintas

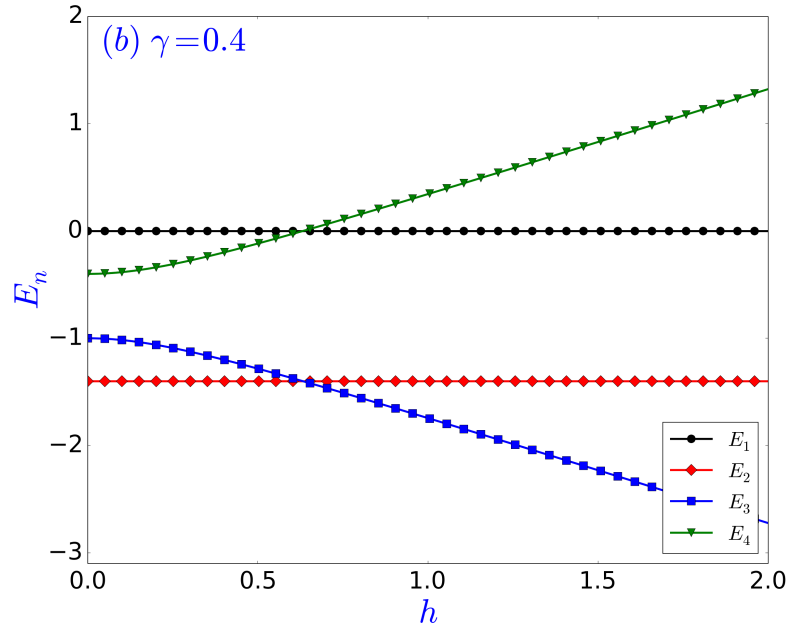
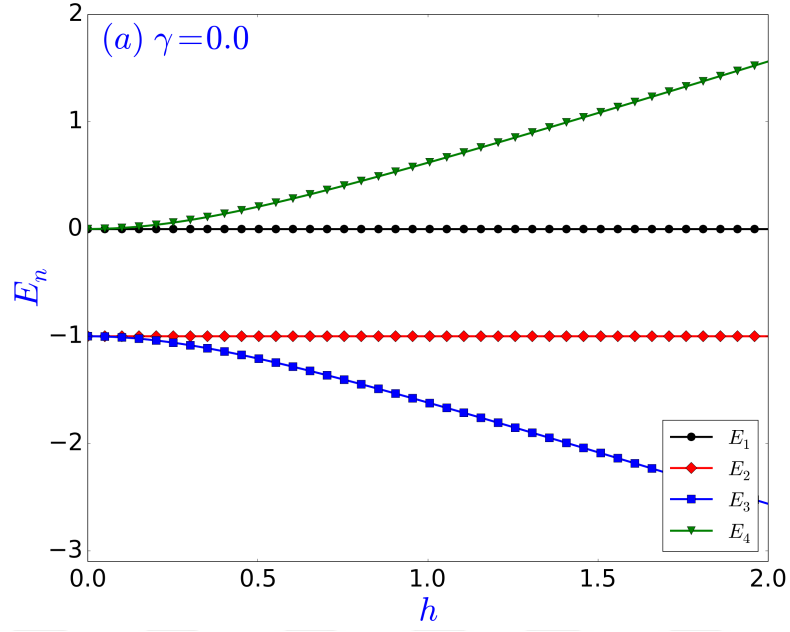
vd, 2014; Thomas & Johal, 2011; Huang vd, 2014b; Altintas & Müstecaphoğlu, 2015). Bu çalışmada ise pozitif iş şartı ve çalışma rejimlerinin, anizotropinin değişimiyle önemli ölçüde değiştiği gösterilmiştir.

Termal verimlilik $J \rightarrow 0$ 'da maksimuma ulaşırken aynı sırada çiftlenimin sıfırdan farklı olduğu bir noktada maksimum üretilen işe ulaşılır. Bu nedenle, iş üretiminin, optimum verimlilikle kesin bir çiftlenim değerinde maksimum olduğu nokta γ ile kontrol edilebilir. Anizotropinin, γ , iş ve verimlilik üzerindeki etkilerinin incelenmesi sonucunda, ısı motorunun iş çıkardığı izinli J -aralığında, γ 'nın iş üretimini kontrol edebileceği görülmüştür. Şekil 4.1'deki iç grafiklerde, anizotropinin alabileceği tüm değerler için $-1 \leq \gamma \leq 1$, γ 'nın maksimum iş üretimi ve maksimum verimlilik üzerindeki etkisi verilmiştir. İç grafiklerde, geniş bir anizotropi aralığında ($-1 \leq \gamma < 0.45$) ısı motorunun iş üretebileceği görülmektedir. Ancak $\gamma > 0.45$ olduğu durumda ısı motorunun verimliliği $\eta = 0$ 'dır. Anizotropinin değişimi maksimum iş ve verimliliği tek-düze bir şekilde artırır ve $\gamma = -1$ olduğunda, kuantum ısı motorunun performansı optimum değere ulaşır. Şekil 4.1(b) iç grafiğinde görülebileceği üzere ısı motorunun verimi, $\gamma = -1$ için Carnot sınırına yaklaşır. Göz önüne alınan termodinamiksel ölçümler $J \rightarrow -J$ ifadesine göre simetriktir. Bu nedenle sonuçlar anti-ferromanyetik rejim ($J < 0$) için de aynıdır.

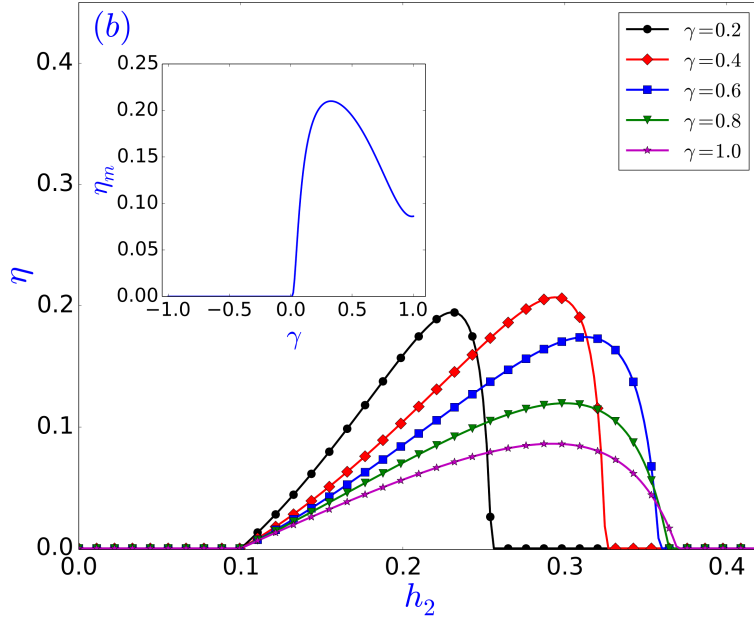
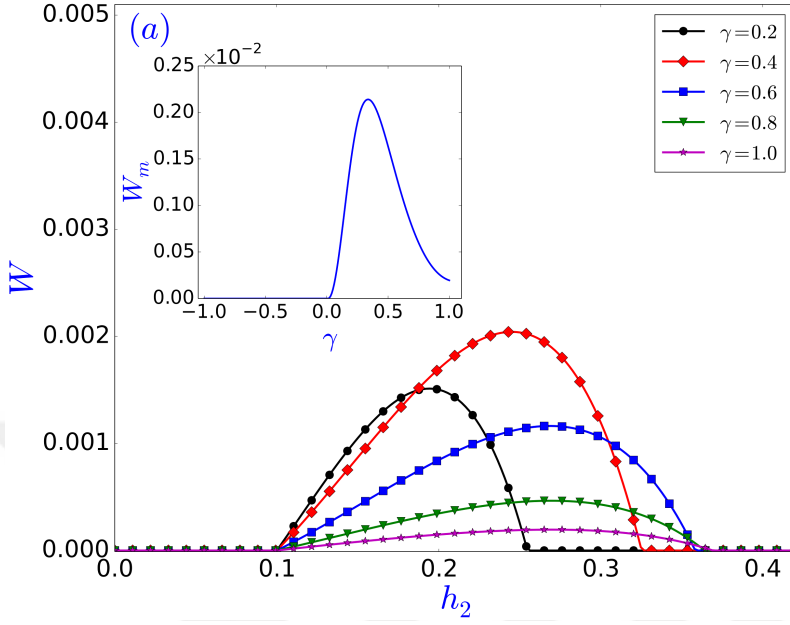
Bu bölümde kuantum ısı motorunun $h_1 < h_2$ koşulu altında, pozitif iş üretmesine odaklanılmıştır. Bu durumda etkileşmeyen spinler ($J = 0$), $\eta = 1 - h_2/h_1$ verimliliğinde çalışamaz. Adyabatik genişlemeye maruz kalan enerji seviyeleri arasındaki fark ikinci adyabatik süreçte azalır ve bu durum adyabatik sıkıştırma sürecinde beklenen davranışla tutarsızdır (Quan vd, 2007a). Sıfırdan farklı bir J değeri için, $\gamma = 0$ daki enerji seviyeleri Şekil 4.2(a)'da gösterilmiştir. Çiftlenmemiş spinler ($J = 0$) için enerji seviyeleri arasındaki fark h manyetik alanıyla artmaktadır. Bu nedenden dolayı $\gamma = 0$ anizotropide $h_1 < h_2$ koşulu göz önüne alındığında ısı motoru tarafından pozitif iş üretilmesi imkansızdır. Ancak sıfırdan farklı anizotropi değerleri için bu durum dramatik bir şekilde değişir. Bunun ana nedeni Şekil 4.2(b)'de görülen enerji



Şekil 4.1. (a) Üretilen işin W ve (b) verimliliğin η çiftlenim büyüklüğünün fonksiyonu olarak J , $T_1 = 1.0$, $T_2 = 0.5$, $h_1 = 0.50$, $h_2 = 0.25$ ve $\gamma = -1.0, -0.5, -0.25, 0.0, 0.25$ parametreleri altında değişimi. İçteki grafikler (a) maksimum iş çıkışının ve (b) maksimum verimliliğin γ 'ya bağımlılığını tüm γ aralığı γ ($-1 \leq \gamma \leq 1$) için göstermektedir. Yukarıda alınan parametreler için Carnot verimliliği $\eta_c = 1 - T_2/T_1 = 0.5$ 'dir



Şekil 4.2. Enerji seviyelerinin E_n (Denklem (4.3)) manyetik alanın h fonksiyonu olarak değişimi. $J = 2$ için (a) $\gamma = 0$ ve (b) $\gamma = 0.4$



Şekil 4.3. (a) Manyetik alanının h_2 fonksiyonu olarak iş üretimi W ve (b) η 'nin değişimi. Sistemin parametreleri $T_1 = 0.15$, $T_2 = 0.1$, $h_1 = 0.1$, $J = 2.0$ ve $\gamma = 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$ olarak alınmıştır. İçteki grafikler $h_2 > h_1$ olduğu bölgede (a) maksimum iş üretimi W_m ve (b) maksimum verimliliğin η_m γ 'ya göre değişimini göstermektedir. Yukarıda alınan parametreler için Carnot verimliliği $\eta_c = 1 - T_2/T_1 = 1/3$ 'dir

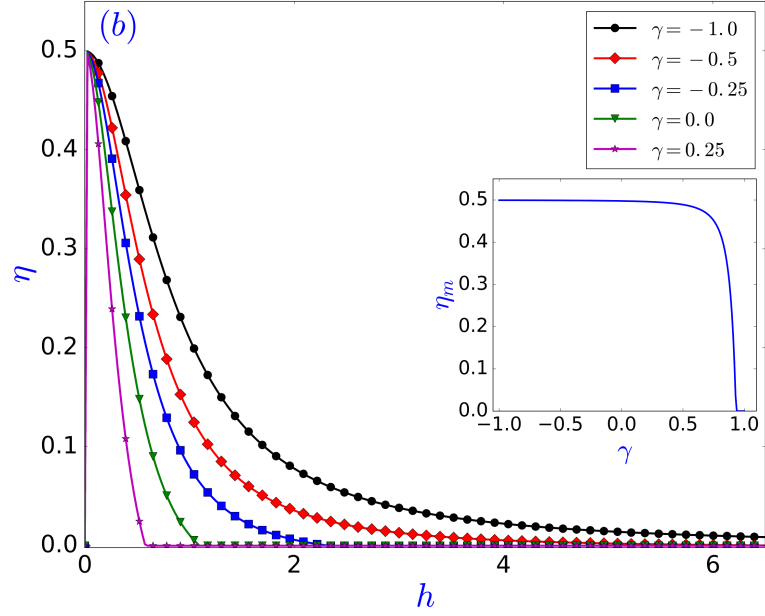
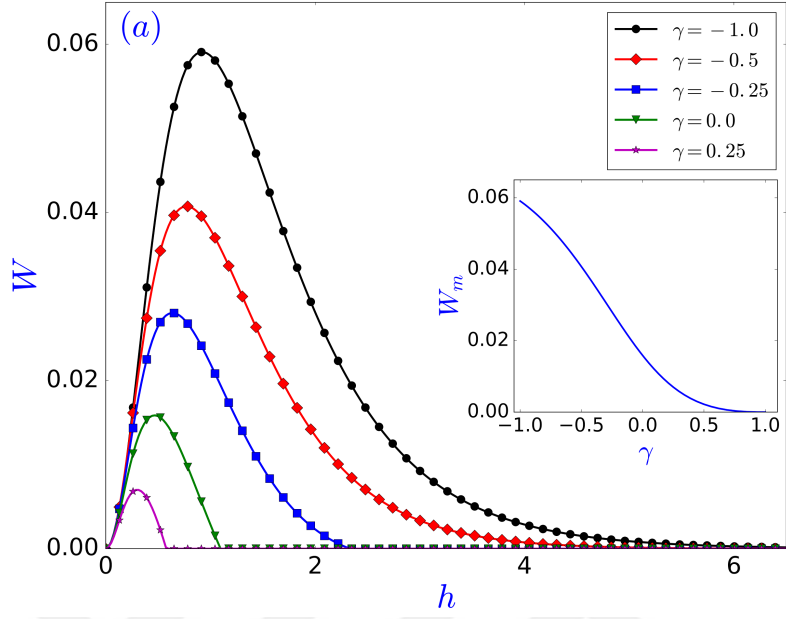
seviyelerindeki çakışmalardır. Sonuçta ortaya çıkan bu yeni durumda $h_1 < h_2$, çiftlenmemiş veya çiftlenmiş spinler üzerinden $\gamma = 0$ için iş üretilemezken, $\gamma \neq 0$ olduğunda kuantum Otto motoru tarafından pozitif iş üretimi söz konusu olur. Şekil 4.3 (a)'da iş üretimi ve Şekil 4.3 (b) verimlilik, $h_1 = 0.1$ için h_2 'nin fonksiyonu olarak verilmiştir. Şekil 4.3'e göre pozitif iş üretimi $\gamma > 0$ için $h_2 > h_1$ sağlandığında gerçekleşir. Klasik Carnot verimliliği, $\eta_c = 1/3$, ile kıyaslandığında, kuantum Otto motoru önemli sayılabilecek verimlilikte, $\eta_m \approx 0.22$, iş üretebilir. Düşük sıcaklıklarda, sadece düşük enerji seviyelerinin olasılıkları iş üretimine baskın olarak katkıda bulunur. Bu yüzden, $h_2 > h_1$ değişimleri için adyabatik süreçlerde adyabatik sıkışmaya, genişlemeden daha fazla maruz kalan ilk enerji aralığı, Şekil 4.3'deki pozitif iş üretiminden sorumlu olur. Anizotropinin $\gamma (> 0)$ ısı motorunun performansı üzerindeki etkilerine bakıldığında ise, anizotropinin artmasının pozitif iş üretilebilecek izinli h_2 aralığını daralttığı görülür. γ ile kontrol edilebilen belirli bir h_2 değeri için W ve η maksimumdur. γ 'nın maksimum iş ve verimlilik üzerindeki rolü Şekil 4.3'de verilen iç grafiklerde analiz edilmiştir. W_m ve η_m için Şekil 4.1'de verilenin aksine, Şekil 4.3'de bu davranışın tek-yöne olmadığı görülür ve $\gamma \approx 0.4$ için ısı motoru en optimum performansta çalışmaktadır.

4.1.3.2 Durum ii): $J_1 \rightarrow J_2 \rightarrow J_1$ ve $h_1 = h_2 = h$

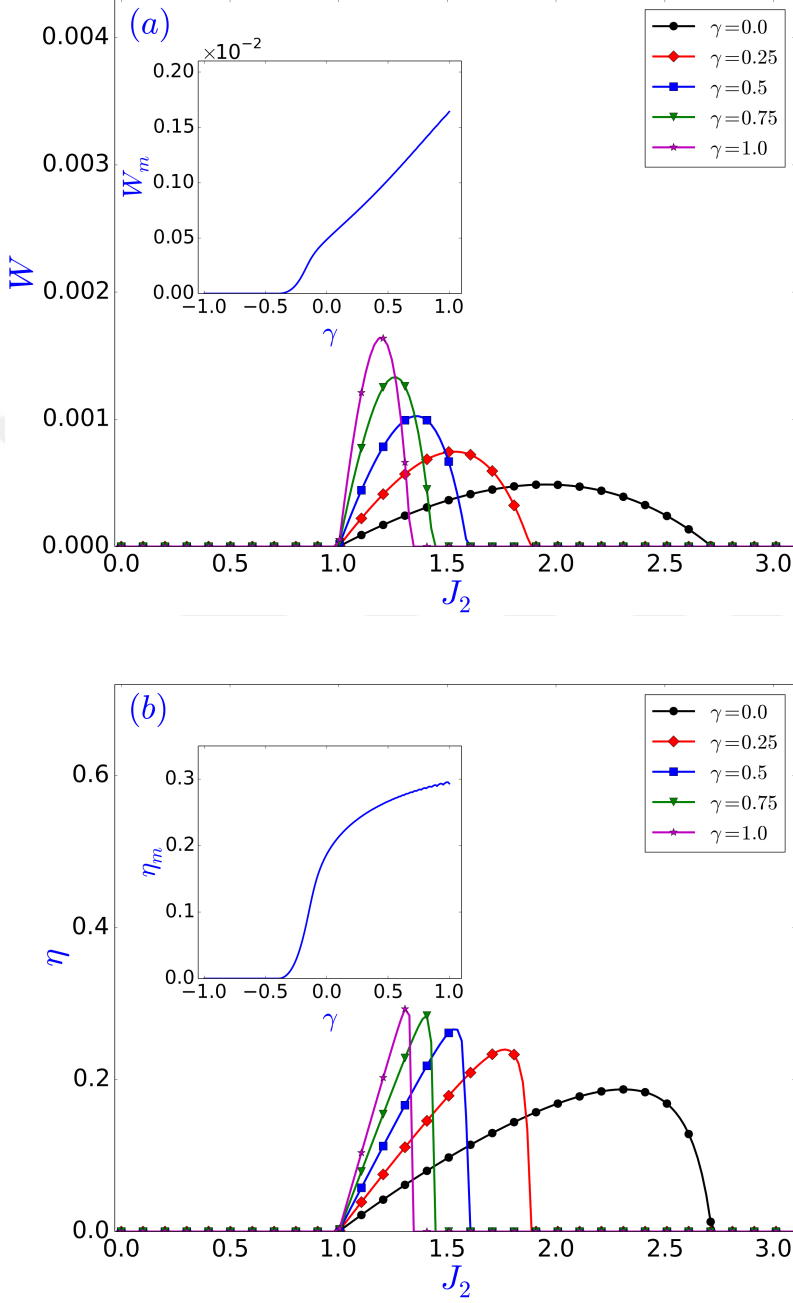
Bu bölümde ise adyabatik süreçlerin sabit manyetik alan altında $h_1 = h_2 = h$, spin etkileşme büyüklüğünün kontrolü ile sağlandığı ($J_1 \rightarrow J_2 \rightarrow J_1$) duruma odaklanılmıştır. Şekil 4.4'te ferromanyetik bölgede $T_1/T_2 = 2$ ve $J_1/J_2 = 2$ oranları için kuantum ısı motorundan elde edilen iş ve işin verimliliği, manyetik alan büyüklüğünün fonksiyonu olarak çizdirilmiştir. Verilen termodinamiksel sonuçlar, $J_1 \rightarrow -J_1$ ve $J_2 \rightarrow -J_2$ eşzamanlı yer değiştirmeleri için değişmez. Dolayısıyla, sonuçlar anti-ferromanyetik bölgelerdeki adyabatik değişimler içinde aynıdır. $h = 0$ olduğunda, $\gamma = 0$ ve $\gamma = \pm 1$ için verimlilik $\eta = 1 - J_2/J_1$ ve pozitif iş koşulu $T_1 > (J_1/J_2)T_2$ olduğu Kieu tipi eşitlikler elde edilir. Ancak keyfi bir γ değeri için basit eşitlikler yoktur. Keyfi bir γ için pozitif iş şartı, iş üretiminin $W = 0$ olduğu $h = 0$ daki pozitif iş şartı ile uyumlu olduğu Şekil 4.4'te görülür. Manyetik alanın sıfırdan farklı olduğu durumlarda ise,

kuantum ısı motoru Carnot sınırına yakın verimliliklerde pozitif iş üretebilir. Şekil 4.4 verilen iş üretimi ve verimliliğin anizotropi ve manyetik alana bağımlılığı, durum i) Şekil 4.1’de incelenen davranışlarla benzerlik gösterir. Verimlilik, manyetik alanın h fonksiyonu olarak, monotonik azalırken, yaklaşık sıfırda maksimum değerini alır. Öte yandan belirli bir manyetik alan değerinde iş üretimi maksimum değere ulaşır. Maksimum iş üretimi ve verimliliğin γ ya bağımlılığı Şekil 4.4’de iç grafiklerde verilmiştir. γ ’nın kuantum ısı motoru üzerindeki etkileri incelendiğinde; anizotropinin pozitif iş üretilen izinli h aralığını arttırdığı görülür. Bunun yanında anizotropi ulaşılabilecek maksimum işi de artırır. Şekil 4.4 (a) iç grafiğinde $\gamma > 0.97$ olduğunda kuantum ısı motoru iş üretemez ($W = 0$). Diğer taraftan, Şekil 4.4 (b) iç grafiğinde ise ısı motorununun γ ($-1 \leq \gamma < 0.97$) aralığında klasik Carnot sınırına yakın verimlilikte iş ürettiği görülür.

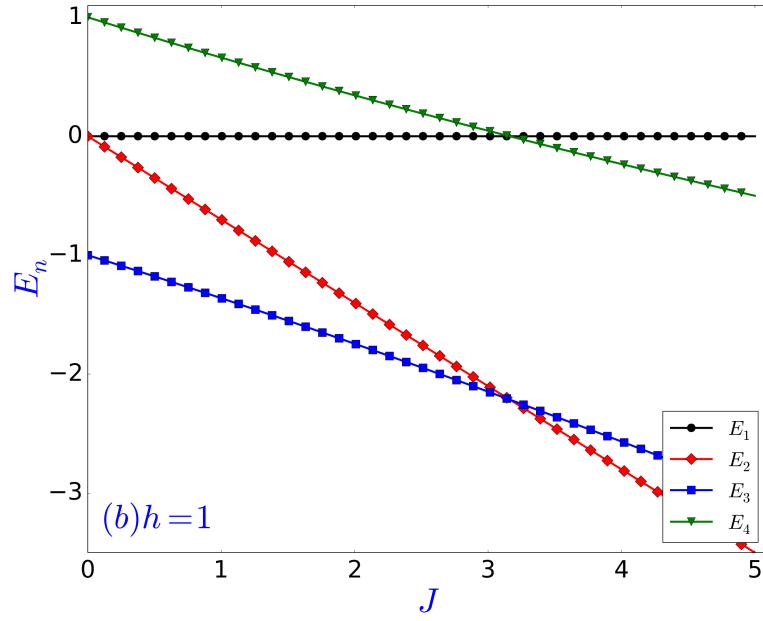
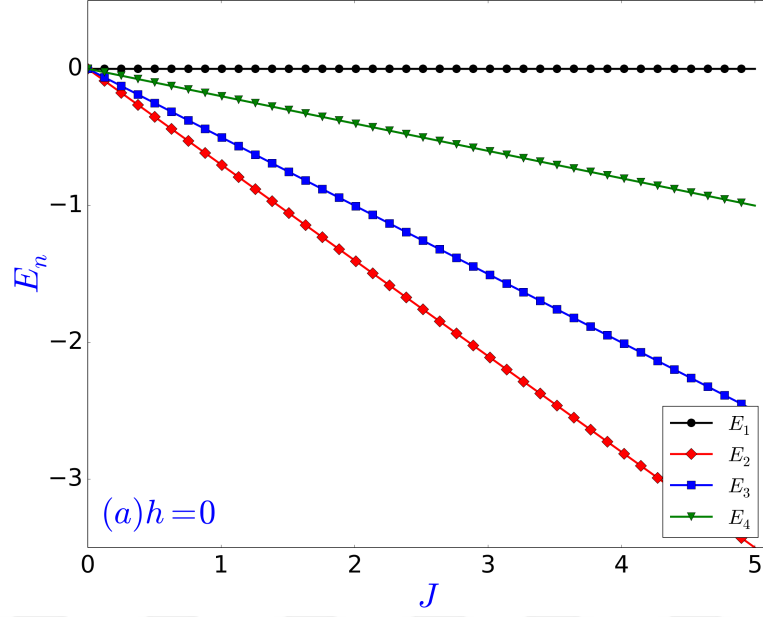
Kuantum ısı motorunun kapasitesini $J_2 > J_1$ koşulu altında göstermek için, $T_1 = 0.15$, $T_2 = 0.1$, $h = 1$ ve $J_1 = 1$ parametreleri altında iş üretimi ve termal verimlilik, J_2 ’nin fonksiyonu olarak, Şekil 4.5’de çizdirilmiştir. $h = 0$ olduğunda $J_1 > J_2$ koşulunu gerektiren ısı motorunun verimliliği $\eta = 1 - J_2/J_1$ ’dir. $h = 0$ için enerji seviyeleri (Şekil. 4.6(a)) ikinci adyabatik süreçte adyabatik sıkışma davranışı için $J_1 > J_2$ koşulunu göstermektedir. Buna ek olarak, manyetik alanın varlığında, enerji seviyelerinde kesişme olur ve alınan sıcaklık parametreleri için iş üretiminde baskın olan ilk enerji aralığı ikinci adyabatik süreçte genişleyerek, adyabatik sıkışma sürecine maruz kalır (Quantum, 2007a). Böylece kuantum ısı motoru $J_2 > J_1$ olduğunda pozitif iş üretebilir. Klasik Carnot sınırı ($\eta_c = 1/3$) ile kıyaslandığında kuantum ısı motoru kabul edilebilir verimlilikte $J_1 > J_2$ koşulu altında pozitif iş üretebilir. Şekil. 4.5(b)’de $\gamma = 1$ için $\eta_m \approx 0.3$ ’dir. Anizotropinin iş üretimi ve verimlilik üzerindeki rolü incelendiğinde ise izotropik çiftlenime yaklaşıldığında ($\gamma \rightarrow 1$) verimlilik ve iş üretiminin maksimum değeri artarken, pozitif iş üretimine izin verilen etkili J_2 aralığı azalmaktadır. $J_2 > J_1$ bölgesinde $\gamma < -0.4$ olduğunda verimlilik sıfır olur. Ising modeli ($\gamma = 0$) ile kıyaslandığında, anizotropi $\gamma > 0$, önemli ölçüde iş



Şekil 4.4. (a) Manyetik alanının h fonksiyonu olarak iş üretimi W ve (b) verimliliğin η 'nın değişimi. Sistemin parametreleri $T_1 = 1.0$, $T_2 = 0.5$, $J_1 = 2.0$, $J_2 = 1.0$ ve $\gamma = -1.0, -0.5, -0.25, 0.0, 0.25$ olarak alınmıştır. İçteki grafikler anizotropinin γ tam aralığı ($-1 \leq \gamma \leq 1$) göz önüne alınarak, (a) maksimum iş üretimi W_m ve (b) maksimum verimliliğin η_m γ 'ya göre değişimini göstermektedir. Yukarıda alınan parametreler için Carnot verimliliği $\eta_c = 1 - T_2/T_1 = 0.5$ 'dir



Şekil 4.5. (a) Çiftlenim büyüklüğünün J_2 fonksiyonu olarak iş üretimi ve (b) verimliliğin değişimi. Sistemin parametreleri $T_1 = 0.15$, $T_2 = 0.1$, $h = 1.0$, $J_1 = 1.0$ ve $\gamma = 0.0, 0.25, 0.50, 0.75, 1.0$ olarak alınmıştır. İçteki grafikler $J_2 > J_1$ olduğu bölgede (a) maksimum iş üretimi W_m ve (b) maksimum verimliliğin η_m γ 'ya göre değişimini göstermektedir. Yukarıdaki parametreler için Carnot verimliliği $\eta_c = 1 - T_2/T_1 = 1/3$ 'dir



Şekil 4.6. $\gamma = 0.4$ için (a) $h = 0$ ve (b) $h = 1$ için çiftlenim büyüklüğünün J 'nin fonksiyonu olarak enerji seviyelerinin dağılımı E_n (Denklem (4.3))

üretimi ve yüksek verimliliğe öncülük etmektedir (Altintas vd, 2014).

4.1.3.3 Durum iii): $J_1/h_1 = J_2/h_2 = r$

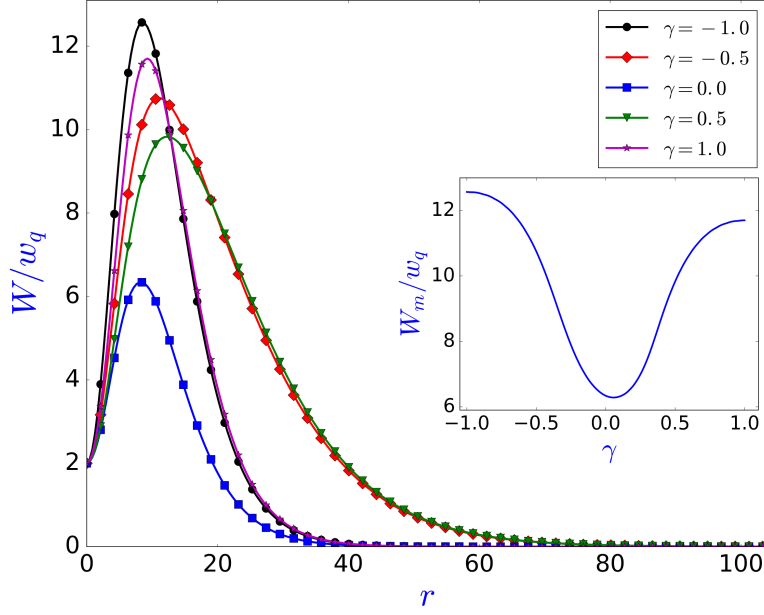
Bu bölümde, adyabatik süreçlerde, çiftlenim büyüklüğü J ve manyetik alan h , $J_1/h_1 = J_2/h_2 = r$ oranına uyacak şekilde her ikisi de değiştirilerek elde edilen özel çiftlenmiş dört seviyeli kuantum Otto motoru göz önüne alınmıştır (Huang vd, 2013b; Huang vd, 2014b). Adyabatik kollarda, manyetik alan ve çiftlenim sabiti aynı oranda $r = J/h$, eş zamanlı olarak değiştirilir. Burada Otto çevrimi süresince sabitlenen r , bağıl çiftlenim büyüklüğü olarak da görülebilir. Adyabatik süreçlerde h veya J 'nin değiştirildiği önceki tartışılan durumlarla kıyaslandığında, eş-zamanlı değişimin uygulanması, deneysel açıdan daha zahmetli ve gelişmiş görevleri gerektirmektedir.

İlk olarak kuantum Otto çevriminin pozitif iş koşulu ve termal verimliliğine odaklanıldığında; keyfi seçilen γ için $J_1 = rh_1$ ve $J_2 = rh_2$ ifadeleri kullanılarak elde edilen verimlilik

$$\eta = 1 - \frac{h_2}{h_1}, \quad (4.6)$$

olarak sadeleştirilebilir. Bu ifade $h_1 > h_2$ şartı sağlanmak koşuluyla kübit gibi çiftlenmemiş ısı motorunun verimliliğine eşittir. Özel çiftlenmiş kuantum Otto motoru verimliliği manyetik alanlar h_i ($i = 1, 2$) dışındaki tüm sistem parametrelerinden bağımsızdır. Bunun yanında nümerik hesaplamalar sonucunda, Otto çevriminin pozitif iş üretebilmesi için $T_1 > (h_1/h_2)T_2$ koşulunu sağlaması gerektiği varsayılabilir. Bu yüzden, özel çiftlenmiş Otto çevriminin çalışma koşulları, Kieu'nun eşitlikleri kullanılarak bulunabilir. Aslında, $J_1/h_1 = J_2/h_2 = r$ adyabatik değişimleri ile LMG Otto çevrimi Quan vd (2007a) tarafından önerilen özel çok-seviyeli kuantum Otto çevrimine eşdeğerdir. Bu özel motorda kuantum adyabatik süreçlerde tüm enerji aralıkları $E_n - E_m = \alpha(E'_n - E'_m)$ ifadesine uyacak şekilde aynı oranda değiştirilir. Böyle özel Otto çevrimleri için verimlilik ve pozitif iş şartı sırasıyla $\eta = 1 - 1/\alpha$ ve $T_1 > \alpha T_2$ ifadeleriyle verilir (Quan vd, 2007a). Sıcak ve soğuk ısı-rezervleri için sırasıyla $J_1 = rh_1$ ve $J_2 = rh_2$ alındığında, denklem (4.3) kullanılarak enerji farkları oranının sabit ve $\alpha = h_1/h_2$ ($\alpha > 1$) olduğu hesaplanabilir.

Tartışılan diğer durumların aksine çiftlenmiş sistem, tek kübitlik sistemin Otto motoru olarak çalıştığı koşullar altında iş üretebilir. Öte yandan, ortak çalışma nedeniyle iş üretiminde önemli artış vardır. Üretilen iş üzerindeki çiftlenimin faydasını göstermek için, $T_2/T_1 = 0.5$ ve $h_2/h_1 = 0.6$ oranları alınarak Şekil. 4.7’de motorun ürettiği iş W , aynı döngüde üretilen tek bir kübitin yaptığı işe w_q bölünerek, bağıl çiftlenim değerinin (r) fonksiyonu olarak çizdirilmiştir. Tek kübit Hamiltonyeni $H_q = -h/2\sigma_z$ ve yukardaki parametreler sabit tutularak kübitin yaptığı iş $w_q = 4.6 \times 10^{-3}$ olarak elde edilmiştir. Dahası, termodinamiksel eşitlikler $r \rightarrow -r$ değişikliği göz önüne alındığında değişmez kalır. Çiftlenmiş ısı motoru sabit verimlilikte $\eta = 0.4$ (Carnot verimliliği $\eta_c = 0.5$ ’tir) geniş bir bağıl çiftlenim aralığında iş üretebilir. $W/w_q > 2$ olduğu bölge çiftlenimin iş üretimini arttırdığını gösterir. Bu bölgede çiftlenmiş sistem, çiftlenmemiş sistemden daha fazla iş üretebilmektedir. İş üretimi anizotropiye γ etkin bir biçimde bağlı belirli bir r değerinde maksimumdur. Şekil 4.7 de iç grafikte maksimum işin W_m anizotropiye γ bağıllığı gösterilmiştir. W_m/w_q oranı daima 2 den büyüktür ve göz önüne alınan tüm γ aralığında özel çiftlenmiş kuantum ısı motoru pozitif iş üretebilir. $\gamma = -1$ ise özel çiftlenmiş ısı motorunun performansı için optimum değerdir. Bu değerde W_m/w_q oranı 12’yi geçmektedir.



Şekil 4.7. Bağlı çiftlenim büyüklüğüne karşı W/w_q oranının $T_1 = 1.0$, $T_2 = 0.50$, $h_1 = 0.50$, $h_2 = 0.30$, $J_1 = rh_1$, $J_2 = rh_2$ ve $\gamma = -1.0, -0.5, 0.0, 0.5, 1.0$ parametrelerine göre değişimi. İçteki grafik, w_q ya bölünmüş maksimum iş çıkışı üzerindeki anizotropi γ etkilerini gösterir. Yukarıda alınan parametreler için ısı motorunun termal verimliliği ve klasik Carnot verimliliği sırasıyla $\eta = 1 - h_2/h_1 = 0.4$ ve $\eta_c = 1 - T_2/T_1 = 0.5$ 'dir

4.2. Sonlu-Zamanlı Üniter Bir Protokolde Tersinmezlik ve İşsel Sürtünme Kavramının İncelenmesi

Bu bölümde, kapalı kuantum sistemlerinde tersinmezlikle ve kuantum sisteminin ideal olmayan sonlu-zamanlı parametrik adyabatik dönüşüme uğramasıyla ortaya çıkan işsel sürtünme kavramı incelendi (Feldmann & Kosloff, 2004; Feldmann & Kosloff, 2006; Kosloff & Feldmann, 2010; Rezek & Kosloff, 2006; Rezek, 2010). $H(t)$, zamana-bağlı Hamiltonyeni olmak üzere parametrik olarak ilerleyen kuantum sistemi (iş-kaynağı) göz önüne alınsın. Başlangıç olarak ısı-rezervi ile iş-kaynağı termal dengede olsun. Ardından iş-kaynağının ısı-küveti ile teması kesilsin ve parametrik üniter değişime uğrayarak sistemin Hamiltonyeninin τ sürede başlangıçtan H_i son değerine H_f ulaşmasına izin verilsin. Eğer sistem üzerinde sonlu-zamanda yapılan iş, $\langle w_\tau \rangle$, ve sonsuz-yavaş yapılan iş, $\langle w_{\tau \rightarrow \infty} \rangle$, arasındaki fark alınrsa, bu fark negatif olmayan ve kontrol parametresi tarafından sistem üzerinde adyabatik olmayan dönüşümle uygulanan işi ortaya koyacaktır $\langle w_{fric} \rangle = \langle w_\tau \rangle - \langle w_{\tau \rightarrow \infty} \rangle \geq 0$ (Plastina vd,

2014). Bu gerçekten sistemdeki içsel sürtünmeyi tanımlar. Sistem durumu, sonsuz-uzun süreçte adyabatik olarak denge durumunun yolunu izler. Bu nedenle, $\langle w_{fric} \rangle$ adyabatiklikten sapmanın kantitatif ölçümü olarak değerlendirilebilir. Eğer tersinir adyabatik süreç ($\tau \rightarrow \infty$) için son yoğunluk matrisi iyi tanımlanmış sıcaklığa sahip ise, örneğin β^{-1} , tersinir olamayan iş direkt olarak ilgili durumlar arasındaki kuantum bağıl entropi ile $\langle w_{fric} \rangle = \beta^{-1} S(\rho_\tau || \rho_{\tau \rightarrow \infty})$ eşitliği yoluyla ilişkilidir (Plastina vd, 2014).

İçsel sürtünme efektinin kaynağı tamamen kuantum mekanikselidir. Sistem Hamiltonyeni farklı zamanlarda komüte etmediğinde ortaya çıkar $[H(t_1), H(t_2)] \neq 0$. İçsel sürtünme, sistem Hamiltonyenin enerji özvektörleri arasında adyabatik olmayan geçişler ile ilgili olabilir. Geçiş sonlu-zamanda sonlandığında, sistem durumunun Hamiltonyenteki geçici değişimleri izlemesi olanaksızdır. Bunun sonucunda enerji çerçevesinde eş-evrelilik gelişir. Bu sistemde "atık enerji" ile temsil edilen, parazit bir ek iç enerji birikmesine öncülük eder. Eğer sistem β^{-1} sıcaklığındaki bir ısı-küveti ile termalize edilmek istenirse, sistemdeki atık enerjinin ısı-küvetine gönderilmesi gerekir (Plastina vd, 2014).

Parametrik adyabatik dönüşümler, kuantum Otto ve Carnot çevrimlerinin bileşenleridir. Bu nedenle, kuantum termal aygıtlarda içsel sürtünmenin rolü son günlerde önemli ölçüde incelenmektedir (Plastina vd, 2014; Alecce vd, 2015; Thomas & Johal, 2014; Feldmann & Kosloff, 2004; Feldmann & Kosloff, 2006; Kosloff & Feldmann, 2010; Rezek & Kosloff, 2006; Rezek, 2010; Allahverdyan & Nieuwenhuizen, 2005; Allahverdyan vd, 2008; Deffner & Lutz, 2010; Deffner & Lutz, 2011; Deng vd, 2013; del Campo vd, 2014). Beklendiği gibi, kuantum sürtünmenin, kuantum ısı/soğutma aygıtlarının performansını sınırladığı bulunmuştur. İçsel sürtünmenin enerji tüketen efektlerine karşı koymak için stratejiler kuantum termal motorları kurgulanarak incelenmiştir. Bu stratejiler "kısa-devre adyabatikliği" (Deng vd, 2013; del Campo vd, 2014) ve "kuantum yağlama" (Feldmann & Kosloff, 2006) ortak adları altında toplanabilir.

Bu bölümde elde edilen sonuçlar, mikroskobik ile makroskobik tersinmezlik (Loschmidt paradoksu) (Lucia, 2015a) arasındaki ilişkiyle ve zaman simetrisi

görüŖüyle alakalı olabilir (Lucia, 2016a). Nano-mühendislik sistemlerindeki geliŖmeler, nano-ölçek termodinamiğinde tersinmezlik sorusunu gündeme getirir (Lucia, 2015b; Lucia, 2015c). Dahası bu geliŖmeler, mekaniğin ve termodinamiğin birleŖtirilmiŖ kuantum formülasyonu gibi, kuantum termodinamiğin yeni bakıŖ açıları arasındaki tartiŖmalar üzerine ıŖık tutabilir (Beretta, 1986; Maddox, 1985; Hatsopoulos & Gyftopoulos, 1976). Ek olarak, verilen yaklaŖımların denge durumunda olmayan termodinamik sistemlere geniŖletilmesi ilgi çekici uygulamaları getirebilir (Lucia, 2016b; Nicolis & Prigogine, 1979; Beretta, 2006). Ayrıca enerji tüketen kuantum dinamikleri, entropi üretimi ve tersinmezlik gibi farklı bakıŖ açılarıyla geniŖçe tartiŖılmıŖtır (Korsch & Steffen, 1987; Hensel & Korsch, 1992; Prigogine vd, 1977; Misra vd, 1979; Thoedopulu vd, 1978; Courbage & Prigogine, 1983). Doğrusal olmayan sistemleri (Svirshevski, 2001) içeren ve stokastik master denklemleri ile kuantum mekaniğindeki sürtünmenin genel tanımı da literatürde bulunabilir (Caldirola & Lugiato, 1982). Bu çalıŖmada alınan özel durum, adyabatik kontrol süreci serbest geliŖimle uyumsuz olduėunda, kuantum içsel sürtüme efektinin kaynaėı olan sonlu zamanlı adyabatik dönüşümlerle iliŖkili tersinmezlik ile sınırlıdır.

4.2.1. Tersinmezlik ve içsel sürtünmenin analizi

Parametrik zamana baėlı Hamiltonyen tarafından geliŖtirilen üniter geliŖime uğrayarak deėiŖen kuantum sistemi göz önüne alındıėında, Hamiltonyen

$$H(t) = B_0 I_z + B(t) I_x, \quad (4.7)$$

'dir. Burada B_0 , z -yönündeki durgun manyetik alan iken $B(t)$, x -ekseni boyunca uygulanan zamana baėlı manyetik alandır. I_α ($\alpha = x, y, z$) ise komütasyon baėlıntısına uyan, $[I_\alpha, I_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} I_\gamma$, spin açısal momentum işlemcisinin bileŖenleridir. Hesaplamaların basit olması için spin-1/2 parçacıėı göz önüne alınmıŖtır ($I_\alpha = \sigma_\alpha/2$ ve σ_α Pauli matrisleridir). Bu çalıŖma boyunca, Plank sabiti \hbar , gyromanyetik oran γ_n ve Boltzmann sabiti $k_B = 1$ olarak kullanılmıŖtır.

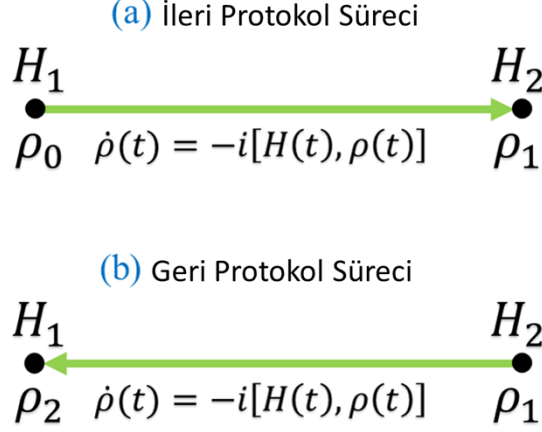
Hamiltonyen eŖitliėi (4.11) için önerilen üniter parametrik dönüşüm baėlımsız iki bölüme sahiptir. İlk üniter dönüşüm ileri protokol olarak

adlandırılır ve sonlu-zamanda Hamiltonyenin, H_i 'den H_f 'a dönüşümünü içerir. Diğeri ise Hamiltonyeni H_f 'dan H_i 'a geri dönüştüren geri protokoldür. Böyle bir protokolün ana sonucu, aynı Hamiltonyene H_i , sahip olan ileri protokolün başlangıç yoğunluk matrisini ve geri protokolün son yoğunluk matrisini kullanarak iç sürtünmenin kantitatif ölçülmesidir.

Önerilen üniter ileri-geri protokolün şematik temsili Şekil 4.8'da verilmiştir. Detaylı bilgi ve matematiksel formülasyon aşağıdaki gibidir.

(a) *İleri Protokol.* Sistemin başlangıç Hamiltonyeni $H_1 = B_0 I_z + B_1 I_x$, $\beta = T^{-1}$ ters-sıcaklığındaki ısı-rezervi ile termal denge halinde olsun. Sistemin başlangıç yoğunluk matrisi $Z = tr[\exp(-\beta H_1)]$ olmak üzere Boltzmann-Gibbs dağılımıyla $\rho_0 = \exp(-\beta H_1)/Z$ şeklinde verilebilir. Sistem ısı-rezervinden ayrılır ve $\tau/2$ zaman aralığı içinde $B(t)$ manyetik alanın B_1 den B_2 ye adyabatik parametrik değişime uğrar. İleri protokol, Liouville-von Neumann eşitliği $\dot{\rho}(t) = -i[H(t), \rho(t)]$ ile verilen yoğunluk matrisinin üniter gelişimi tarafından tanımlanabilir. Bu ifade de $H(t)$ denklem (4.11)'de verilmiştir ve sistemin başlangıç durumu $\rho(t=0) = \rho_0$ 'dir. $t=0$ da H_i olan Hamiltonyen ileri protokol (a) sonunda ρ_1 yoğunluk matrisiyle $H_2 = B_0 I_z + B_2 I_x$ 'e değişir. Bu dönüşümü sağlayan programlama fonksiyonu $B(t)$ için birçok mümkün seçim vardır. Bu çalışmada Hamiltonyeni değiştirmek için dört farklı puls önerilmiştir. Bunların açık formları $B(t) = B_1 + (B_2 - B_1)\sin(\pi t/\tau)$ yada $B(t) = B_1 + (B_2 - B_1)(2t/\tau)^n$ (burada $n = 1/2, 1, 2$) şeklindedir. Tüm formlarda $B(t=0) = B_1$ ve $B(t=\tau/2) = B_2$ 'dir.

(b) *Geri Protokol.* Bu üniter süreç, sistemi Hamiltonyen H_2 'den başlangıç değerine H_1 geri dönüştürme işlemi tanımlamaktadır. Yoğunluk matrisinin zamanla gelişimi tekrar $\dot{\rho}(t) = -i[H(t), \rho(t)]$ denkleminde elde edilir. Bu kez ifadedeki başlangıç yoğunluk matrisi $\rho(t=0) = \rho_1$ 'dir. Denklem (4.11)'de verilen $H(t)$ ifadesindeki zamana bağlı manyetik alanın formu $B(t) = B_2 + (B_1 - B_2)\sin(\pi t/\tau)$ yada $B(t) = B_2 + (B_1 - B_2)(2t/\tau)^n$ ($n = 1/2, 1, 2$) olarak verilir. Burada $B(t=0) = B_2$ ve $B(t=\tau/2) = B_1$ 'dir. Geri protokol sonunda ki yoğunluk matrisi ise ρ_2 ile gösterilir. Denklem (4.11) kullanılarak, komutasyon bağıntısının her zaman sıfırdan farklı olduğu



Şekil 4.8. (a) İleri üniter protokolün ve (b) ardından geri üniter protokolün şematik gösterimi. Burada ρ_α ($\alpha = 0, 1, 2$) ve H_α ($\alpha = 1, 2$) protokollerin terminal noktalarındaki yoğunluk matrisi ve Hamiltonyenidir

$[H(t_1), H(t_2)] = -iB_0 (B(t_1) - B(t_2)) I_y$ kolaylıkla gösterilebilir. Çünkü yukarıda önerilen manyetik alanlar her zaman aynı değildir ($B(t_1) \neq B(t_2)$). Bundan dolayı, sistemin yoğunluk matrisi, hızlı dönüşümler için geçici değişimleri izleyemez. Protokol süresince, yoğunluk matrisi denge durumundan ayrılır ve böylece ρ_0 ve ρ_2 olmak üzere farklı iki matris elde edilir. Başlangıç denge durumu ρ_0 ve geri protokol sonundaki mevcut son durum ρ_2 arasındaki miktar, sistem içerisindeki tersinmezliğin kantatif ölçümü olarak kullanılabilir (Plastina vd, 2014; Alecce vd, 2015). ρ_2 'nin ρ_0 'a olan "yakınlığı", entropi-tarzı uzaklık ölçümü olan kuantum bağlı entropi

$$S(\rho_2||\rho_0) = \text{tr}[\rho_2 \ln \rho_2 - \rho_2 \ln \rho_0] \geq 0. \quad (4.8)$$

kullanılarak incelenmiştir (Nielsen & Chuang, 2010). Klein'nin eşitsizliğine göre, kuantum bağlı entropi negatif olamaz ve ancak $\rho_2 = \rho_0$ olduğunda sıfır değerini alır. Bu uzaklık ölçümü teknik olarak metrik olmamakla beraber genellikle simetrik de değildir $S(\rho||\sigma) \neq S(\sigma||\rho)$. Kuantum bağlı entropinin, kuantum bilgi ve hesaplama teorisinde bir çok yorumu vardır. Bu konuyla ilgili son gelişmeler hakkında daha detaylı bilgiler literatürde bulunabilir (Vedral, 2002). Eğer eşitliğin (4.8) sağ tarafındaki ikinci teriminde ρ_2 yerine ρ_0 yazılırsa, kuantum bağlı entropi ifadesi, ρ_2 ve ρ_0 'ın von-Neumann entropileri ($S(\rho) = -\text{tr}(\rho \ln \rho)$) arasındaki farka eşit olacaktır. Üniter süreçlerde ise von-Neumann entropisi sabit kalacağından, bu durumda kuantum bağlı entropi sıfır olacaktır.

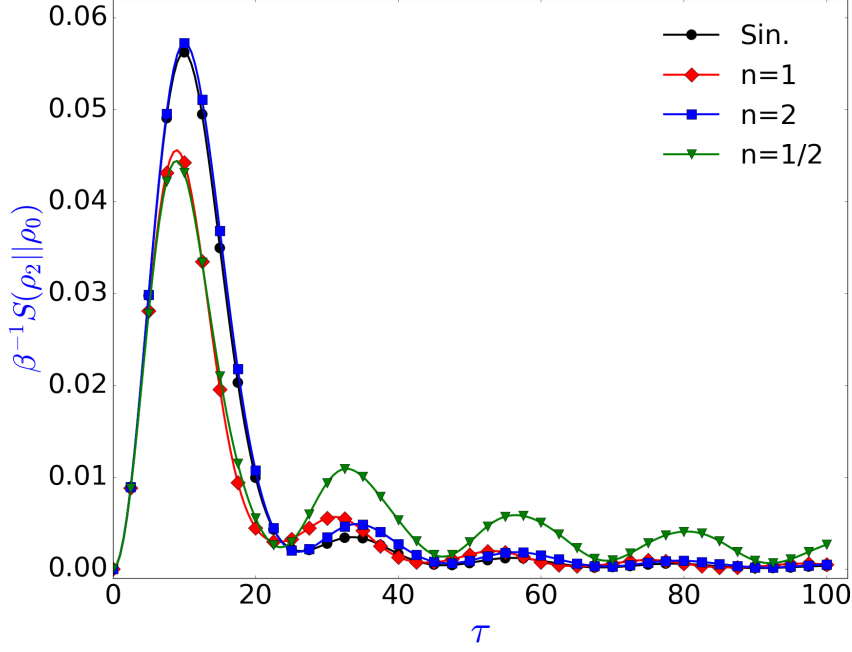
Bunun yanında, çalışmada kuantum bağıl entropinin hesaplama prosedürü de tartışılmıştır. Denklem (4.8) matris logaritmasını işleyebilen uygun bir bilgisayar yazılımı direk olarak hesaplanabilir. Diğer bir hesaplama yöntemi ise yoğunluk matrislerinin ortonormal ayrıştırma yöntemi kullanılarak hesaplanmasıdır. İfade edilen $\rho_2 = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$ ve $\rho_0 = \sum_j q_j |\phi_j\rangle \langle \phi_j|$ yoğunluk matrislerinin logaritması (\ln) alındığında $\ln \rho_2 = \sum_i (\ln p_i) |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$ ve $\ln \rho_0 = \sum_j (\ln q_j) |\phi_j\rangle \langle \phi_j|$ ifadeleri elde edilir. Bu ifadeler kullanılarak denklem (4.8) ile kolay hesaplanabilir formu olan,

$$S(\rho_2||\rho_0) = \sum_i p_i \ln p_i - \sum_{i,j} p_i \ln q_j |\langle \psi_i | \phi_j \rangle|^2. \quad (4.9)$$

şeklinde yazılır.

Diğer taraftan, denklem (4.8)'nin önemli termodinamiksel yorumu, içsel sürtünme ile yakından ilgilidir (Plastina vd, 2014; Alecce vd, 2015). İlk olarak Şekil 4.8 de ileri-geri protokollerde iş yapıldığını varsayalım. Tersinir adyabatik süreçler ($\tau \rightarrow \infty$) için, ileri-geri protokoller sonunda başlangıç durumuna ρ_0 geri dönüldüğünden ve sistemin iç enerjisinde değişim olmadığından sistem üzerinde yapılan iş sıfırdır. Bu durumda, sistem üzerinde, sürücü ajan tarafından sonlu-zamanda τ yapılan iş, tersinmez işe eşit olmalıdır $\langle w_{fric} \rangle = tr[H_1 \rho_2] - tr[H_1 \rho_0]$. Eğer ek bir izokorik süreç ile ρ_2 durumu ρ_0 durumuna termalize edilirse, β^{-1} sıcaklığındaki ısı-rezervi tarafından sisteme verilen ortalama ısı enerjisi $\langle q_{\rho_2 \rightarrow \rho_0} \rangle = -\langle w_{fric} \rangle$ ifadesine eşit olacaktır. Denklem (4.8) ile içsel sürtünme arasındaki ilişkiye bakıldığında, von Neumann entropi uniter gelişim sürecinde değişmez olduğundan, denklem (4.8) $S(\rho_2||\rho_0) = -S(\rho_0) - tr[\rho_2 \ln \rho_0]$ olarak yazılabilir. Hamiltonyen H_1 'in öz-değerler E_j olmak üzere, $q_j = e^{-\beta E_j} / Z$ ile birlikte yoğunluk matrisi ρ_0 'ın boylamsal ayrışması kullanılarak $S(\rho_2||\rho_0) = \sum_j \ln q_j [q_j - \langle \phi_j | \rho_2 | \phi_j \rangle]$ ifadesi elde edilir. Toplam üzerinden $\ln e^{-\beta E_j} / Z = -\beta E_j - \ln Z$ ifadesin değıtılmasıyla ve iz işleminin özellikleri de kullanılarak kuantum bağıl entropi $S(\rho_2||\rho_0) = \beta (tr[H_1 \rho_2] - tr[H_1 \rho_0])$ ifadesine sadeleştirilir. Sonuç olarak kuantum bağıl entropi ile içsel sürtünme arasındaki ilişki,

$$S(\rho_2||\rho_0) = \beta \langle w_{fric} \rangle = -\beta \langle q_{\rho_2 \rightarrow \rho_0} \rangle. \quad (4.10)$$



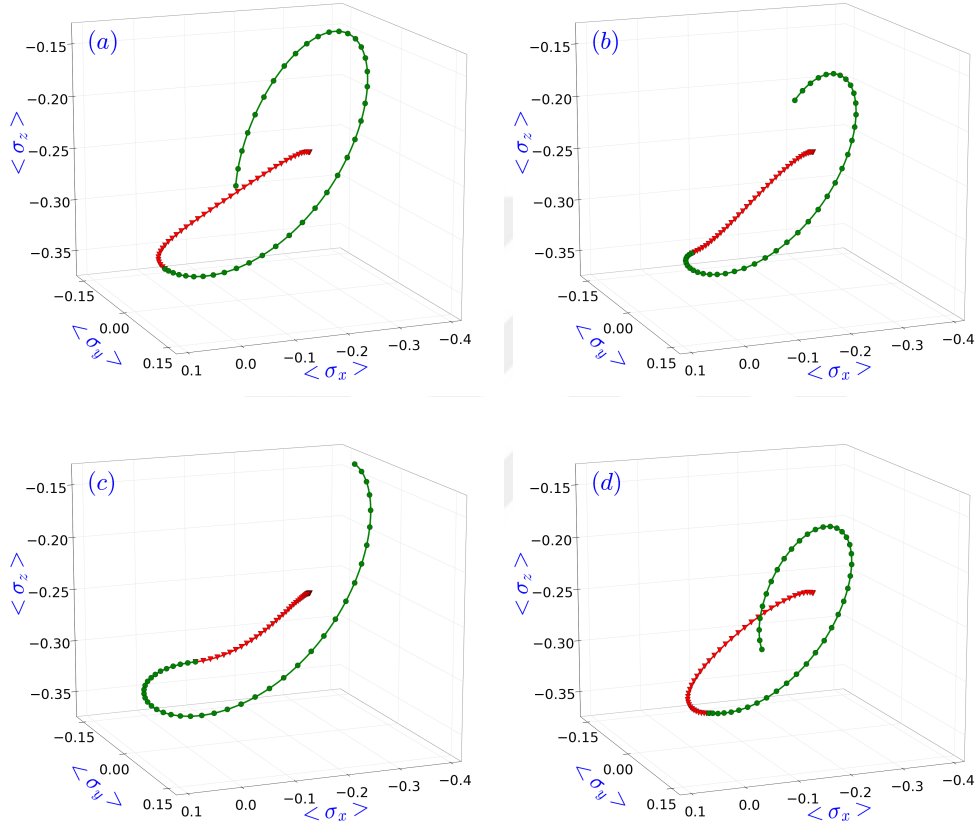
Şekil 4.9. Başlangıç termal denge durumu ρ_0 ve geri protokolün sonundaki ρ_2 yoğunluk matrisleri arasındaki Kuantum bağıl entropi $\beta^{-1}S(\rho_2||\rho_0)$ toplam izinli protokol zamanının (τ) fonksiyonu olarak $B_0 = B_1 = 0.5$, $B_2 = 0.05$ ve $\beta = 1$ parametrelili için verilmiştir. Üniter dönüşümler dört farklı sürücü pulslar tarafından üretilmiştir. Çizilen grafiğin termodinamiksel yorumu denklem (4.10)'da verilmiştir

şeklinde elde edilir. Klein'nin eşitsizliğine göre, tersinmez iş negatif olamaz ve sistemde parazit iç enerji (atık enerji) olarak tutulur (Nielsen & Chuang, 2010). Eğer sistem alt termalizasyon süreciyle β^{-1} sıcaklığına termalize etmek istenirse, parazit enerji ısı-rezervine aktarılmalıdır. Denklem (4.10)'ün doğrulanması güçlü bir varsayım gerektirir ki bu da sistemde geliştirilen eş-evrelilik mükemmel izolasyon ile sonlu-zamanlı adyabatik süreç boyunca saklanabileceği varsayımdır. Toplam dönüşüm süreci τ parametresi ile tanımlanır, bu süreç her iki protokol için iki eşit süreye bölünmüştür ($\tau/2$). Bu çalışmada ana inceleme ρ_2 durumu ile ρ_0 durumu arasındaki kuantum bağıl entropinin, toplam protokol zamanı τ ya nasıl bağlı olduğunu analiz etmektir. Şekil 4.9'de $S(\rho_2||\rho_0)$ ifadesi $B_0 = B_1 = 0.5$ ve $B_2 = 0.05$ parametreleri için τ zamanının fonksiyonu olarak çizdirilmiştir. Grafikteki her çizgi üniter gelişimi meydana getiren farklı sürücü (itme) pulslarına karşılık gelmektedir. Şekil 4.9 sonlu-zamanlı dönüşümlerde kuantum bağıl entropinin sıfır olmadığını ve tersinmezlik doğasının işaretini gösterir. $S(\rho_2||\rho_0) > 0$ olduğundan, geri-protokol sonunda

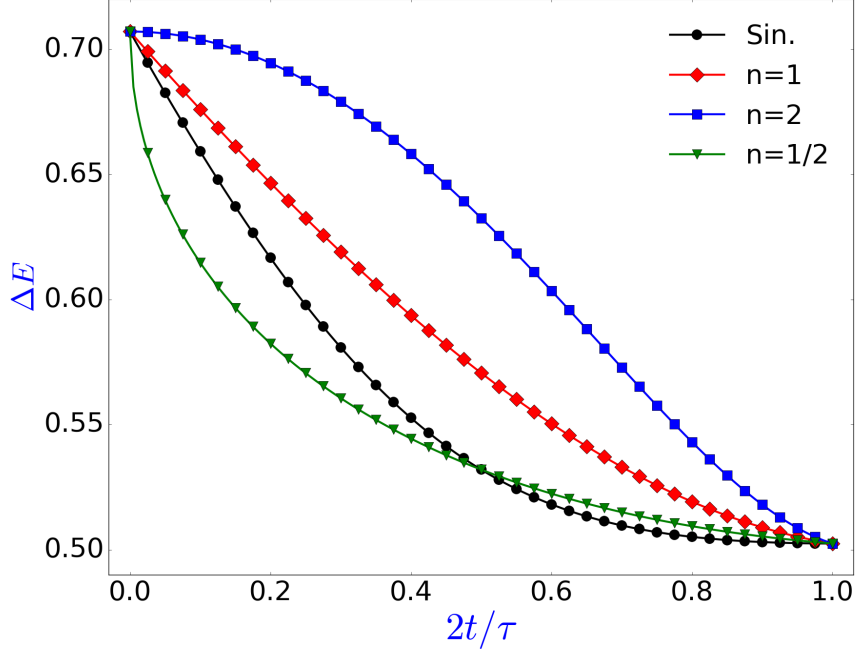
Hamiltonyen ilk haline dönse bile sistemin durumu başlangıç durumuna geri dönemez. Şekil 4.9, ideal olmayan sonlu-zamalı kuantum gelişimlerin, kuantum sistemlerinde tersinmezliklerin kaynağı olduğunu gösteren destekleyici bir örnektir.

Öte yandan toplam protokol zamanının iki uç durumunda $\rho_2 = \rho_0$ elde edilir. Birinci limit durumu (daha önce yukarıda tartıştığımız gibi) çok yavaş dönüşümlerdir ($\tau \rightarrow \infty$). Bu durumda sistemin yoğunluk matrisi Hamiltondaki anlık değişimleri ilk seviye olasılıkları değiştirmeden izler ve öz-durum gösterimi cinsinden her zaman köşegen kalır. Sonuç olarak geri protokolün sonunda, sistem durumu ρ_0 'a geri döner. Bu durum, kuantum adyabatik teoremin sistemde geçerli olması ve sürtünmesiz çözümün elde edilmesi için şarttır. Ayrıca dönüşüm zamanı skalası, sistemin iç zaman skalasından küçük olmalıdır. Aksi halde atomların spontane emisyonları nedeniyle olan eş-evreliliği bozma efektleri sistemde yer alabilir. İkinci limit ise tamamen diyabatik durumudur ($\tau \rightarrow 0$). Bu ani (bir anda) dönüşümde, Hamiltonyen dönüşse de, sistemin yoğunluk matrisi dönüştürülmek için şans bulamayacak ve değişmez kalacaktır. Bu yüzden, geri-protokol sonunda $\tau \rightarrow 0$ limitinde $\rho_2 = \rho_0$ olacaktır. Bu senaryoda, enerji-zaman belirsizliği ilişkisinden dolayı enjide büyük sapma olabilir.

İleri-geri protokolde Bloch vektörünün $\vec{r} = \langle \sigma_x \rangle \hat{i} + \langle \sigma_y \rangle \hat{j} + \langle \sigma_z \rangle \hat{k}$, izlediği yollar (yoğunluk matrisinin Bloch uzayında izlediği gibi) Şekil 4.10'de gösterilmiştir. Bloch vektörü, kuantum sürtünmesinden dolayı başladığı duruma dönemez. Şekil 4.11'de protokol süresince enerji aralıklarının (iki seviye arasındaki enerji farkı) zamanla gelişimi gösterilmiştir. Bu şekilde görüldüğü üzere her itme (değiştirme) pulsu, Hamiltonyeni değiştirmek için farklı yol izler ve farklı protokol oranları tanımlar. Aslında bu davranış Şekil 4.9'deki farklı pulslar ve Şekil 4.10'deki yollar için kuantum bağlı entropinin dinamik davranışındaki farklılığı açıklar. Bunlara ek olarak, kuantum bağlı entropinin ($S(\rho_2||\rho_0)$) dalgalanan yapısı, toplam protokol zamanına tek bir şekilde bağlı olmayacağını göstermektedir. $S(\rho_2||\rho_0)$ 'nun değerinin $\tau \approx 10$ civarında her puls için maksimuma gittiği gözlemlenir. Ayrıca Şekil 4.9'da sinüsoidal, $n = 1$ ve $n = 2$ olarak etiketlenmiş sürücü pulsların neredeyse



Şekil 4.10. $\tau = 20$ için Şekil 4.9 de verilen ileri-geri protokolde Bloch vektörünün izlediği yol. Kırmızı-üçgen çizgi ileri protokoldeki zamanla gelişimi gösterirken, yeşil-daire çizgi geri protokolde izlenen yolu gösterir. Alt figürler, (a) sinüzoidal, (b) $n = 1$ (c) 2 (d) $1/2$ olarak etiketlenen itme pulsları için çizdirilmiştir. İleri-geri üniter protokollerde Bloch vektörünün uzunluğu değişmez kalır



Şekil 4.11. Enerji seviyeleri arasındaki farkın zamanla gelişimi $\Delta E = \sqrt{B_0^2 + B(t)^2}$, ileri dönüşüm protokolünde $2t/\tau$ 'nin fonksiyonu olarak Şekil 4.13'de verilen parametreler ve göz önüne alınan sürücü pulslar için çizdirilmiştir. $t = \tau/2$ ye göre alınan ayna simetrisi ve dönme simetrisi enerji aralığının geri protokoldeki zamanla gelişimini verir

sürtünmesiz çözümlerinin çok kısa protokol zamanlarında olduğu gözlenirken, $n = 1/2$ ile etiketlenmiş itme pulsunun daha uzun dönüşüm zamanına ihtiyaç duyduğunu gösterilmektedir. Şekil 4.9'deki bir diğer ilginç gözlem ise $\tau \approx 20$ civarındaki, neredeyse sürtünmesiz çözümlerin yoldan bağımsız bir davranış sergilemesidir.

4.3. Kuantum Otto Çevriminde Keyfi Spin İçin Geri Alınmaz İş ve İçsel Sürtünmenin İncelenmesi

Mevcut çalışmada, zamana-bağlı transfer manyetik alanla etkileşen keyfi spin, kuantum Otto motorunun iş-kaynağı olarak göz önüne alınmıştır (Oliveira vd, 2007; Stolze & Suter, 2008). Çevrimin izokorik evrelerinde, sabit Hamiltonyene sahip sistem ısı-rezervi ile termal dengeye ulaşır. Adyabatik evrelerde ise sonlu-zamanlı üniter gelişim parametrik zamana-bağlı Hamiltonyen tarafından üretilir. Ana düşünce Otto çevriminde adyabatik süreçler sırasında ideal olmayan, sonlu-zamanlı kuantum dönüşümler ile kuantum tersinmezliğin rolünü ve kayıpları incelemektir.

İçsel sürtünmeyi azaltan veya tamamen ortadan kaldıran stratejiler vardır. İlk yol kuantum adyabatik teoreme bağlıdır ve sürtünmesiz adyabatik dönüşüm sağlar. Adyabatik süreçte sistemin durumu ani enerji öz-durumlarını izler ki bu da sonsuz uzun zaman gerektirir. Bunun sonucu olarak sistemde güç çıkışı mümkün olmaz. Ayrıca sistem eş-evreslilik etkilerine açık olur. Kuantum yağlama ve kısa-devre adyabatikliği olarak adlandırılan, sürtünme etkilerini azaltan stratejiler vardır. Kuantum yağlamada (Feldmann & Kosloff, 2006; Rezek, 2010), kontrol parametreleri üzerine dış gürültü eklenerek sürtünme etkileri bastırılır. Kısa-devre adyabatikliği ise adyabatik süreç sonunda sürtünme etkilerini minimize eden kontrol pulsları tasarımı gerektirir.

Elde edilen sonuçlar, sürücü pulslar için farklı olasılıkların göz önüne alınması, kuantum Otto çevriminin performansını geliştirmeye izin verdiğini ve kuantum sürtünmenin yeni özelliklerini keşfetmeye ve sonlu-zamanlı adyabatik dönüşümlerde neredeyse sürtünmesiz durumların çözümünün bulunabileceğini ortaya çıkarmıştır. Ayrıca göz önüne alınan model NMR sistemlerinde uygulanabilir ve sürtünmenin temel kaynağını netleştirir.

4.3.1. Üzerinde çalışılan spin modeli

Bu çalışmada zamana bağlı manyetik alan içerisinde tek spin kuantum Otto motorunun iş kaynağı olarak göz önüne alınmıştır. Çevrimin adyabatik

kollarının zamana bağılı Hamiltonyeni;

$$H(t) = B_0 I_z + B(t) I_x. \quad (4.11)$$

tarafından üretildiği kabul edilmiştir. Burada B_0 z -ekseni boyunca uygulanan durağan manyetik alan, $B(t)$ ise x -ekseni boyunca uygulanan ve Hamiltonyeni adyabatlarda değiştiren zamana bağılı manyetik alandır. I_z ve I_x standard komutasyon bağıntısına uyan $[I_x, I_z] = -iI_y$, spin açısal momentumun bileşenleridir. Burada spin- I değerleri, $I = 1/2, 1, 3/2, 2$ ile sınırlandırılmıştır. Bu çalışma boyunca $\hbar = 1$ ve jromanyetik oran $\gamma = 1$ olarak ayarlanmıştır. Ayrıca seçilen model Hamiltonyenin keyfi olmadığını vurgulamak gerekir. Çünkü çalışmada sürtünmenin temel nedenlerini içeren ve Hamiltonyende komutasyonu sağlayan terim ve kontrol terimini barındıran basitleştirilmiş bir modeli işlemek istenilmektedir. Dahası göz önüne alınan Hamiltonyen (4.11), sıvı NMR deneylerinde kullanılan, tek spinin genel formudur (Oliveira vd, 2007; Stolze & Suter, 2008).

4.3.2. Kuantum Otto çevriminin uygulanması

Kuantum Otto çevrimi iki izokorik ve iki adyabatik süreçlerden oluşur (Şekil 2.2). Adyabatik evrelerde iş-kaynağı ile ısı-rezervleri arasında ısı akışı olmaz, sadece iş yapılır. İzokorik evrelerde ise sadece ısı transferi olur. Çevrimin evrelerinde yapılan iş veya ısı değişimi, iç enerji değişimi yoluyla formüle edilebilir. Termodinamiğin birinci yasasının (Quan vd, 2007a) kuantum termodinamiksel versiyona göre, iç enerjideki değişim $dU = dQ - dW$ dir. Bu ifadede $U = Tr(\rho H)$ iç enerji, W iş-kaynağı tarafından yapılan iş ve Q ise sisteme verilen ısı enerjisidir. Çevrimin detayları ve fomülüzasyonu şu şekilde verilir.

İzokorik Isıtma: $H^{(1)} = B_0 I_z + B_1 I_x$ Hamiltonyeni ile verilen iş kaynağı sıcak ısı rezervi ile $T = T_1$ sıcaklığında temas ettirilir. Sürecin sonunda iş-kaynağının yoğunluk matrisi $\rho_T^{(1)} = \exp(-\beta_1 H^{(1)})/Z_1$ ile verilir. Bu ifadede $Z_1 = Tr[\exp(-\beta_1 H^{(1)})]$ ve $\beta_1 = 1/T_1$ ($k_B = 1$).

Adyabatik Genişleme: İş-kaynağı sıcak ısı-rezervinden ayrılır ve sonlu-zamanlı adyabatik sürece girer. $t = 0$ da $H^{(1)}$ olan Hamiltonyen ifadesi,

$t = \tau/2$ da $H^{(2)} = B_0 I_z + B_2 I_x$ olur. Yoğunluk matrisinin zamanla gelişimi Liouville-von Neumann denklemi $\dot{\rho}(t) = -i[H(t), \rho(t)]$ tarafından sürdürülür. $H(t)$ denklem (4.11) de verilmiştir. Başlangıç durumu ise $\rho(t = 0) = \rho_T^{(1)}$ 'dir. Adyabatik dönüşüm farklı biçimdeki kontrol alanları ile elde edilebilir. Çalışmada $B(t) = B_1 + (B_2 - B_1) \sin(\pi t/\tau)$ yada $n = 1/2, 1, 2$ olmak üzere $B(t) = B_1 + (B_2 - B_1)(2t/\tau)^n$ puls biçimleri olarak alınmıştır. Burada her durum için $B(t = 0) = B_1$ ve $B(t = \tau/2) = B_2$ olur. İş-kaynağı tarafından süreçte yapılan iş $W_I = Tr[H^{(1)}\rho_T^{(1)}] - Tr[H^{(2)}\rho^{(2)}]$ ifadesiyle yazılabilir. Bu ifadede $\rho^{(2)} = \rho(t = \tau/2)$ üniter gelişimde elde edilen sistemin ulaştığı son yoğunluk matrisidir.

Üniter gelişim kapalı sistemi temsil eder, bu yüzden gelişim adyabatiktir yani süreç sırasında etrafla ısı alışverişi yoktur. Diğer taraftan, kuantum adyabatik teorem, adyabatik gelişimin sonlu-zamanlı doğasından ve Hamiltonyen (4.11) ifadesindeki serbest ve kontrol terimlerinin komüte etmemesinden dolayı, beklendiği gibi sistemde geçerli olmaz. Sonuç olarak, içsel kuantum sürtünme olarak adlandırılan olay meydana gelir (Feldmann & Kosloff, 2000; Kosloff, 2013; Kosloff & Feldmann, 2010; Rezek, 2010). Çalışmanın ilerleyen kısımlarında gösterileceği gibi, bu etki kuantum Otto çevriminin performansını derinden etkiler.

İzokorik Soğutma: İş-kaynağı $T = T_2$ sıcaklığındaki soğuk ısı-rezervine temas ettirilir. Sürecin sonunda yoğunluk matrisi $\rho_T^{(2)} = \exp(-\beta_2 H^{(2)})/Z_2$ olarak elde edilir. Bu ifadede $Z_2 = Tr[\exp(-\beta_2 H^{(2)})]$, $\beta_2 = 1/T_2$ ve Hamiltonyen $H^{(2)} = B_0 I_z + B_2 I_x$ süreç sırasında sabittir. Soğuk ısı-rezervine salınan ısı miktarı $Q_2 = Tr[H^{(2)}(\rho_T^{(2)} - \rho^{(2)})]$ eşitliği ile hesaplanabilir. Bu ifadede $\rho^{(2)}$ adyabatik genişleme süreci sonunda ulaşılan yoğunluk matrisidir.

Adyabatik Sıkıştırma: Sürecin zamanla gelişimi $\dot{\rho}(t) = -i[H(t), \rho(t)]$ ifadesiyle verilir. Burada $\rho(t = 0) = \rho_T^{(2)}$ ve $B(t) = B_2 + (B_1 - B_2) \sin(\pi t/\tau)$ yada $B(t) = B_2 + (B_1 - B_2)(2t/\tau)^n$ ($n = 1/2, 1, 2$) olmak üzere $H(t)$ denklem (4.11) ile verilir. $t = 0$ da $H^{(2)}$ olan Hamiltonyeni, $t = \tau/2$ da tekrar başlangıç Hamiltonyenine $H^{(1)}$ geri döndürülür. Bu süreçte iş-kaynağı tarafından yapılan iş $\rho^{(1)} = \rho(t = \tau/2)$ zamanla gelişim sonunda ulaşılan yoğunluk matrisi

olmak üzere $W_{II} = Tr[H^{(2)}\rho_T^{(2)}] - Tr[H^{(1)}\rho^{(1)}]$ ifadesi ile hesaplanır.

Sistem sıcak ısı-rezervine temas ettirilerek başlangıç durumuna geri döndürülür. Sıcak ısı-rezervinden soğrulan ısı enerjisinin miktarı $Q_1 = Tr[H^{(1)}(\rho_T^{(1)} - \rho^{(1)})]$ eşitliği ile hesaplanabilir. Çevrim tamamlandığında sistemin iç enerji değişimi sıfır olur. Bu nedenle iş-kaynağı tarafından yağılan iş $W = W_I + W_{II} = Q_1 + Q_2$ olarak verilir. Çevrimin verimliliği ise $\eta = W/Q_1 = 1 - Q_2/Q_1$ 'dir.

Bu aşamada sistem üzerinde iki kabul yapılmıştır. Bunlardan ilki iş-kaynağı ile ısı-rezervleri arasında mükemmel bir termalizasyon sağlandığı ve izokorik süreçler sonunda iş-kaynağının ısı-rezervinin sıcaklığında termal dengeye ulaştığıdır. Gerçekte tam Lindbladian seçim, Boltzmann dağılımını üretmektir (Oliveira vd, 2007; Stolze & Suter, 2008). Bunun uygulanabilirliği NMR sistemlerinde gösterilebilir (Batalhao vd, 2014; Raitz vd, 2015; Oliveira vd, 2007; Stolze & Suter, 2008). Diğer kabul ise yumuşak alan-değişimi protokollerinin, adyabatik enerji seviyeleri arasında kesişmeye neden olmadığıdır. Enerji seviyelerinde kesişme-çakışma olduğunda quasi-static geri alınabilir değişimlerin optimum süreçler olmadığı gösterilmiştir (Allahverdyan & Nieuwenhuizen, 2005).

4.3.3. Adyabatik kollarda entropi üretimi

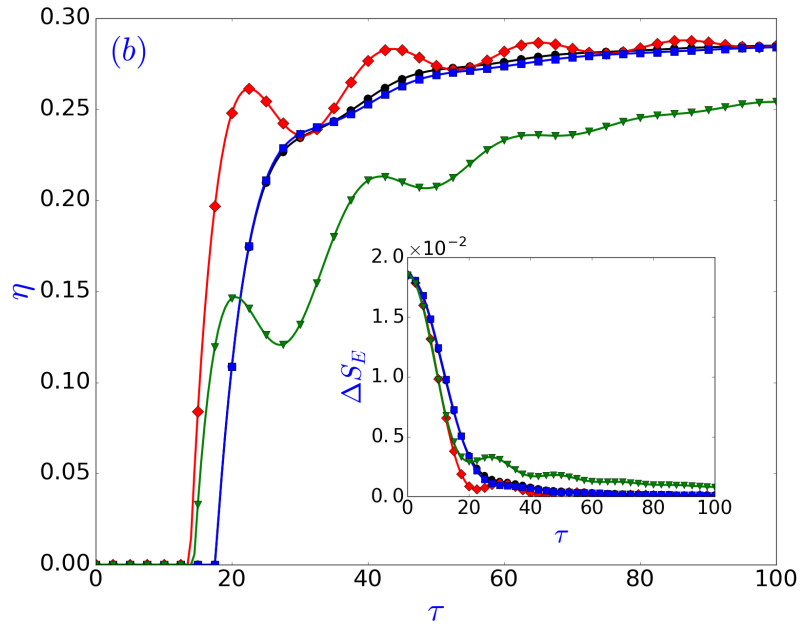
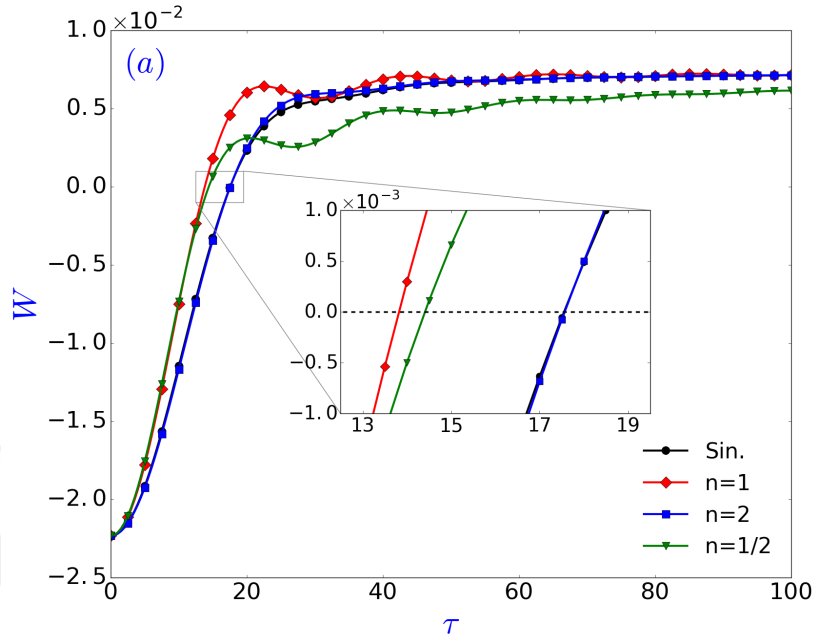
Bu çalışmada, adyabatik kollarda harcanan toplam zamanın Otto çevriminde üretilen iş ve verimlilik üzerindeki etkileri incelenmiştir. Hamiltonyenin geri alınabilir sanki-durağan dönüşümleri (adyabatik teorem sağlandığında) sistemin enerji seviyelerindeki değişimlerini, bu seviyelerdeki olasılıkları sabit tutarak, izlemesini sağlar. Öte yandan sonlu-zamanlı süreçlerde genellikle adyabatik dönüşümler mükemmel başarılamaz. Sistemin durumu denge durumundan sapar ve enerji konfigürasyonunda (yoğunluk matrisi enerji tabanında yazıldığında) eş-evrelilik üretir. Eş-evrelilik oluşturulması, sistemde içsel sürtünmenin göstergesi olan entropi üretimi ile alakalı olabilir. Prensipite, bu tip etkiler sistemin Hamiltonyen farklı zamanlarda komute etmediği zaman ortaya çıkar. Denklem (4.11) kullanılarak, manyetik alanlar aynı olmadığı durumda

($B(t_1) \neq B(t_2)$) komutasyon bağıntısının sıfırdan farklı olduğu kolaylıkla görülür $[H(t_1), H(t_2)] = -iB_0(B(t_1) - B(t_2))I_y$.

Mükemmel adyabatiklikten sapma von Neumann entropy $S_V = -Tr[\rho \ln \rho]$ ile enerji tabalı (Shannon) entropi $S_E = -\sum_i p_i \ln p_i$ arasındaki fark analiz edilerek karakterize edilebilir. Burada $p_i = Tr[|i\rangle \langle i| \rho]$ enerji seviyelerindeki olasılıklardır. Enerji temsilinde ρ köşegen olduğu kuantum durumları için (termalize olmuş durumlar gibi) $S_E = S_V$ olur. Buna ek olarak, von Neumann entropi üniter dönüşümler yoluyla sağlandığı sürece adyabatik kollarda değişmezdir. Diğer taraftan, sonlu-zamanlı dönüşümler eş-evresizlik üretiminden dolayı enerji seviyelerinin olasılıklarını yeniden dağıtabilirler. Sonuç olarak enerji entropi S_E von Neumann entropisinden S_V farklı olabilir. Ayrıca von Neumann entropi, enerji entropinin alt limitidir $S_E \geq S_V$. Bu yüzden mükemmel adyabatiklikten sapma, içsel sürtünmenin imzasını temsil eden enerji entropideki artış ile karakterize edilebilir. İki adyabatik süreç sonundaki enerji entropi artışlarının toplamı, üzerinde çalışılan modelde içsel sürtünmenin göstergesi olarak kullanılmıştır. Bu çalışmanın ileri bölümlerinde ΔS_E ile temsil edilmiştir. Bu konuda daha fazla tartışma için ilgili kaynaklara bakılabilir (Rezek & Kosloff, 2006; Kosloff, 2013).

4.3.4. İş ve verimlilik analizi

Bu bölümde, farklı sürücü pulslar ile üretilen adyabatlar için toplam izinli sürenin τ iş üretimi ve verimlilik üzerindeki etkileri incelenmiştir. Şekil 4.12'de spin-1/2 iş-kaynağı için çevrimde üretilen iş ve termal verimlilik τ 'nın fonksiyonu olarak çizdirilmiştir. Kuantum Otto çevriminin performans parametrelerinin τ 'ya bağlılığının analizi belirgin etkileri göstermiştir. Şekil 4.12(b) de iç grafikte, adyabatik süreçlerde sistemdeki içsel sürtünmenin varlığını gösteren güçlü entropi üretimi vardır. Adyabatlar için kritik bir τ_c zamanı tanımlanabilir. Adyabatik evreler bu kritik zamanın altında kaldığında $\tau < \tau_c$, ısı motoru dışarıya pozitif iş üretemezken $\tau > \tau_c$ olduğunda $W > 0$ olur. Şekil 4.12(a) iç grafikte gösterildiği üzere, bu kritik zaman kontrol pulsunun şekline bağlıdır. Ayrıca $W < 0$ olduğu zamanda ısı motorunun dondurucu



Şekil 4.12. (a) Çevrimde elde edilen işin ve (b) termal verimliliğin toplam adyabatik zamana τ karşı, spin-1/2 ve $B_0 = B_1 = 0.5$, $B_2 = 0.05$, $T_1 = 2$ ve $T_2 = 1$ parametreleri için değişimi. Adyabatik evreler dört farklı sürücü pulslar tarafından üretilmiştir. (b)'deki iç grafik, adyabatik kollardaki toplam entropi üretimini τ 'ya karşı gösterir. (a)'daki iç grafik ise $W = 0$ olduğu bölgenin büyütülmüş halidir

olmadığını söylemek gerekir. Bu bölgede sıcak ısı-rezervinden ısı soğrulur ancak bir miktarı soğuk ısı-rezervi tarafından reddedilir. Fakat $|Q_2| > Q_1 > 0$ olduğundan $W < 0$ 'dır. Bu bölgede kübit Otto motoru, adyabatik kollara paylaştırılan zaman aralığı τ_c dan kısa olduğunda, içsel sürtünme kayıplarını yenemez. Toplam entropi üretimi ΔS_E için pozitif olduğu bölge ile kıyaslandığında, negatif bölgede daha fazladır. İş çıkışının azalması ve entropi üretimi sadece içsel sürtünmenin özelliği değildir. Ancak içsel sürtünmenin nicel ölçümüdür.

Adyabatik kollar için toplam izinli zamanın, τ , W ve η üzerindeki etkileri analiz ortak görüş ile uyumludur. Genelde beklenen W ve η toplam zamanla τ lineer değişerek artar ve maksimum değerlerine ulaşır. Gerçekte, çıkarılan işin tekdüze davranışı son çalışmalarla doğrulanmıştır (Thomas & Johal, 2014; Feldmann & Kosloff, 2000; Alecce vd, 2015). Adyabatik kollar sinüzoidal veya kare ($n = 2$) pulsları ile gerçekleştirildiğinde, hemen hemen genel davranışa uyduğu Şekil 4.12'da gözlenebilir. Öte yandan, lineer ($n = 1$) ve karekök ($n = 1/2$) pulsları için W ve η toplam zamanın fonksiyonu olarak dalgalanan davranış sergiler. Bunun anlamı kuantum Otto motorunun daha kısa adyabatik süreçlerde daha fazla iş üretebilmesidir. Örneğin lineer puls ($n = 1$) için $\tau \sim 20$ iken $\eta \sim 0.26$, $\tau \sim 30$ olduğunda ise $\eta \sim 0.22$ olur. Benzer örnekler iş üretimi ve karekök puls ($n = 1/2$) verilebilir. İlginç olan bir davranış da, $W < 0$ olduğu bölgede iş çıkarımı ve entropi üretiminin, her puls durumu için τ 'nın tekdüze (dalgalanmayan) fonksiyonları olduğudur. Dalgalanan davranış ısı motoru pozitif iş üretiminden $W > 0$ hemen sonra ortaya çıkar. Ayrıca iş ve verimliliğin adyabatik evrenin gelişme zamanına göre dalgalanan davranışları, iş-kaynağı harmonik titreşken olan Otto çevrimi için tartışılmıştır (Zheng vd, 2016).

Adyabatik kolların belirlediği iş üretiminin izinli aralığı için τ 'nın iki uç değeri kestirilebilir (Thomas & Johal, 2014; Feldmann & Kosloff, 2012). Adyabatlar için sıfır zaman aralığı verildiğinde ($\tau \rightarrow 0$), iş üretiminin alt sınırı elde edilebilir. Bu durum adyabatlardaki en büyük entropi üretimine karşılık gelir. Sistemin Hamiltonyeni oldukça hızlı değiştirilse bile, yoğunluk matrisi değişmez kalır. Adyabatik genişleme ve sıkışma evrelerinin başında ve sonunda yoğunluk matrisleri sırasıyla $\rho_T^{(1)} \rightarrow \rho_T^{(1)}$ ve $\rho_T^{(2)} \rightarrow \rho_T^{(2)}$ şeklide kalır. Bu

formalizm kullanılarak, iş çıkışının alt sınırı Şekil 4.12’de verilen parametreler için $W_{lb}/k_B T_2 \cong -2.233 \times 10^{-2}$ olarak elde edilir.

Diğer taraftan, çıkarılan pozitif işin maksimum değerine adyabatik süreçler sanki-durağan olarak sürdürüldüğünde ulaşılır ($\tau \rightarrow \infty$). Sistemdeki içsel sürtünme tamamen ortadan kalktığı için entropide herhangi bir artış olmaz. Kuantum adyabatik teorem sağlandığında, sonsuz yavaş süreçte her öz-durumun olasılığı korunur. Yoğunluk matrisi Hamiltonyenin öz-durumlarındaki ani değişimleri izler. Kuantum adyabatik teorem (Quan vd, 2007a) göz önüne alındığında, Şekil 4.12’de verilen parametreleri için üretilen işin üst sınırı $W_{up}/k_B T_2 \cong 7.277 \times 10^{-3}$ olur. Şekil 4.12’deki grafikler için iş çıkışının alt ve üst limit arasında kaldığı, $W_{lb} < W < W_{up}$, nümerik olarak doğrulanmıştır.

Bu noktada, literatürdeki çalışmalarda adyabatik teoremin doğru olduğu vurgulamak gereklidir (Kieu, 2004; Kieu, 2006; Thomas & Johal, 2011; Altintas vd, 2014; Quan vd, 2005; Henrich vd, 2007; Zhang vd, 2007; Quan vd, 2007a; Quan, 2009). Ancak bu durum çok düşük güç üretimine ve iş-kaynağının iç zaman skalasından daha uzun süreler gerektirebildiğinden sistemin durumunu bozmaya neden olur. Kuantum adyabatik teorem altında, üzerinde çalışılan model, enerji aralığı $\delta_i = \sqrt{B_0^2 + B_i^2}$ ($i = 1, 2$ sırasıyla sıcak ve soğuk Hamiltonyenleri temsil eder) için kübit Otto motorunun Kieu modeliyle eşit duruma gelir (Kieu, 2004; Kieu, 2006). Çevrimin termal verimliliği;

$$\eta_m = 1 - \frac{\delta_2}{\delta_1}. \quad (4.12)$$

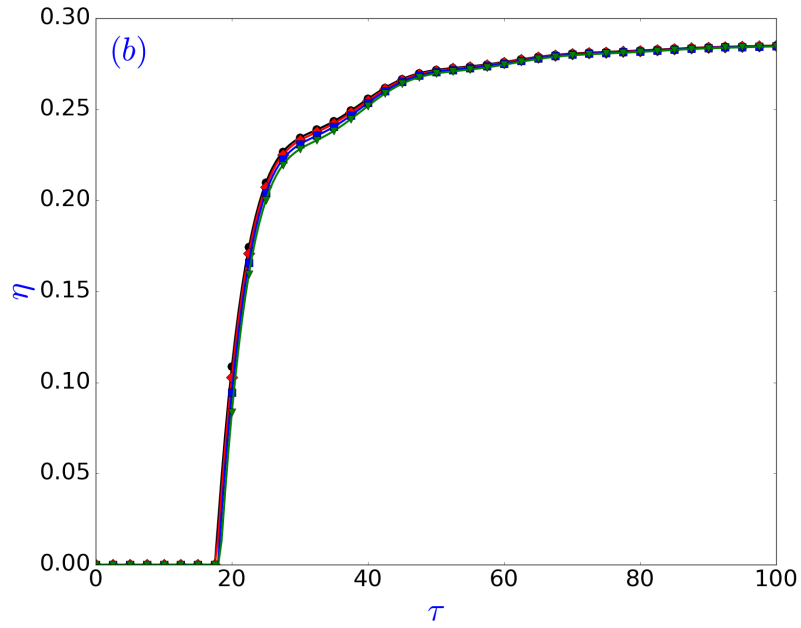
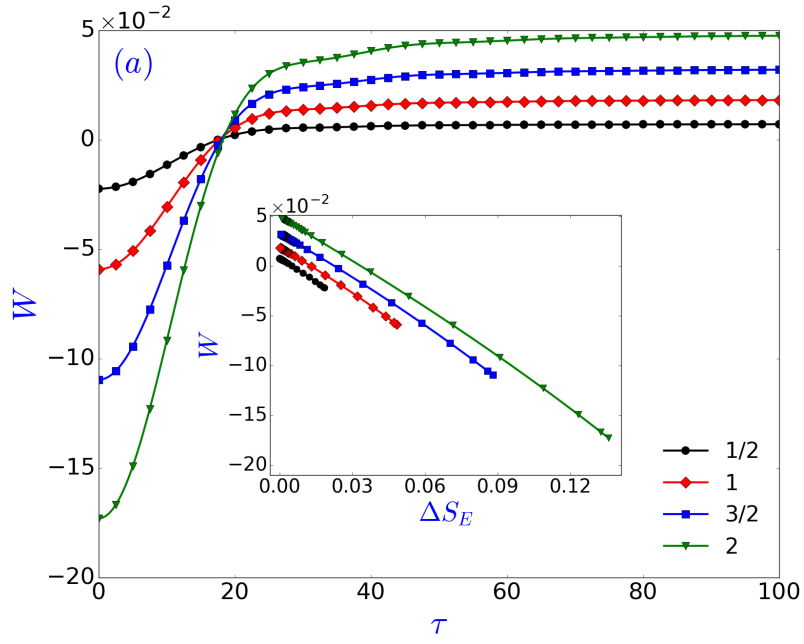
ifadesiyle elde edilir. Isı motorunun pozitif iş şartı ($W > 0$) $T_1 > \delta_1/\delta_2 T_2$ dir (Kieu, 2004; Kieu, 2006). Sonuç olarak η_m klasik Carnot verimliliği $\eta_c = 1 - T_2/T_1$ ifadesiyle sınırlandırılır. Şekil 4.12 de elde edilen nümerik sonuçlar maksimum termal verimliliğin, kuantum adyabatik teoremin altında kaldığını göstermektedir ($\eta \leq \eta_m \cong 0.289$). Bu nedenle çalışmada alınan Otto motorunun adyabatik teorem altında maksimum iş ve maksimum verimlilikte çalışabilir. Buna ek olarak sanki-durağan gelişimler optimum süreçlerdir (Allahverdyan & Nieuwenhuizen, 2005). τ ’nın sonlu-zamanlı değerleri için çok küçük entropi üretimi sağlanarak hemen hemen sürtünmesiz bir çevrim tasarlanabilir. Özellikle lineer (doğrusal) ($n = 1$) sürülen adyabatik

gelişimler küçük τ değerlerinde ($\tau > 40$) neredeyse sürtünmesiz çözümler sağlar. Ancak aynı durum $n = 1/2$ pulse için daha uzun süreler gerektirir ($\tau > 600$).

Yukarıda verilen fikirler kuantum Otto çevriminin iş-kaynağı olarak keyfi spin- I değerleri için genellendiğinde, sinüzoidal puls tarafından sağlanan çevrimde üretilen iş ve termal verimlilik toplam adyabatik zamanın, τ , fonksiyonu olarak Şekil 4.13'de çizdirilmiştir. Bunun yanında her spin- I değeri için W ve ΔS_E arasındaki ortak ilişki Şekil 4.13(a)'da içteki grafikte gösterilmiştir. Yüksek spin değerleri daha yüksek enerji seviyeleri oluşturduğundan, ısı motoru yüksek spin- I değerleri için daha fazla mutlak iş $|W|$ üretebilir. Ayrıca çalışmada her spin- I değeri için üretilen işin $W_{\text{lb}} < W < W_{\text{up}}$ aralığında olduğu nümerik olarak doğrulanmıştır. Burada W_{lb} ve W_{up} sırasıyla $\tau \rightarrow 0$ ve $\tau \rightarrow \infty$ limitlerinde ısı motorundan elde edilen işin alt ve üst sınırlarıdır. Her spin- I değeri için ardışık enerji seviyeleri arasındaki uzaklık $\delta_i = \sqrt{B_0^2 + B_i^2}$ olduğundan Şekil 4.13(b)'de verilen ısı-motorunun verimliliğinin üst değeri η_m ile sınırlanır. Bu bölümde göz önüne alınan iş-kaynağı için kritik adyabatik zaman τ_c ($W > 0$ olduğunda) iş ve termal verimlilik üzerinde önemli bir etki yoktur. Her spin- I değeri η ve τ_c değerlerini çok az kaydırır. Şekil 4.13(a)'da içteki grafikte verilen iş çıkışı ile toplam entropi üretimi arasındaki iki-tarafli bağımlılık, çalışmada daha önce yapılan ΔS_E 'nin ve W 'ün lineer karşılıklı bağımlıya sahip olduğu varsayımını doğrular. Entropi üretimindeki artış iş üretiminde azalmaya neden olur ve bunun tam tersi de geçerlidir. Bu iki ölçülebilir, içsel sürtünmenin ölçülen değeri olarak davranır. Özellikle entropi üretiminin büyük olduğu bölgelerde $W < 0$ olur.

4.3.5. İçsel sürtünme kayıplarının incelenmesi

Bu bölümde, kuantum Otto çevriminde içsel sürtünme konusu detaylı olarak çalışılmıştır ve sayısal olarak belirlenmiştir (Plastina vd, 2014). İlk olarak, başlangıç Hamiltonyeni H_i ve başlangıç termal durumu $\rho_i = \sum_n p_n^{(i)} |\epsilon_n^{(i)}\rangle \langle \epsilon_n^{(i)}|$ olan sadece bir adyabatik evre göz önüne alınmıştır. Geri alınabilir (sürtünmesiz) adyabatik dönüşüm, ideal olan sonsuz uzun zamanda ($\tau \rightarrow \infty$) uygulanmıştır. Bu nedenle, sistem Hamiltonyeninin başlangıç değerinden H_i son değerine H_f



Şekil 4.13. (a) Çevrimde elde edilen işin ve (b) termal verimliliğin toplam adyabatik zamana τ karşı, spin- $I = 1/2, 1, 3/2, 2$ ve $B_0 = B_1 = 0.5$, $B_2 = 0.05$, $T_1 = 2$ ve $T_2 = 1$ parametreleri için değişimi. Bu şekilde, sadece sinüzoidal puls adyabatik süreçleri üreten sürücü puls olarak göz önüne alındı. İçteki grafik (a) iş çıkışı ve toplam entropi üretimi arasındaki ortak ilişkiyi gösterir

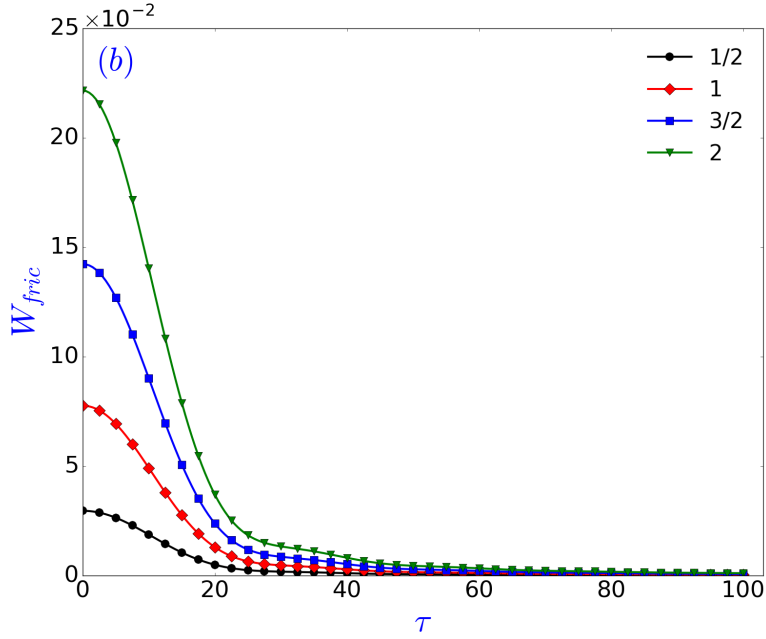
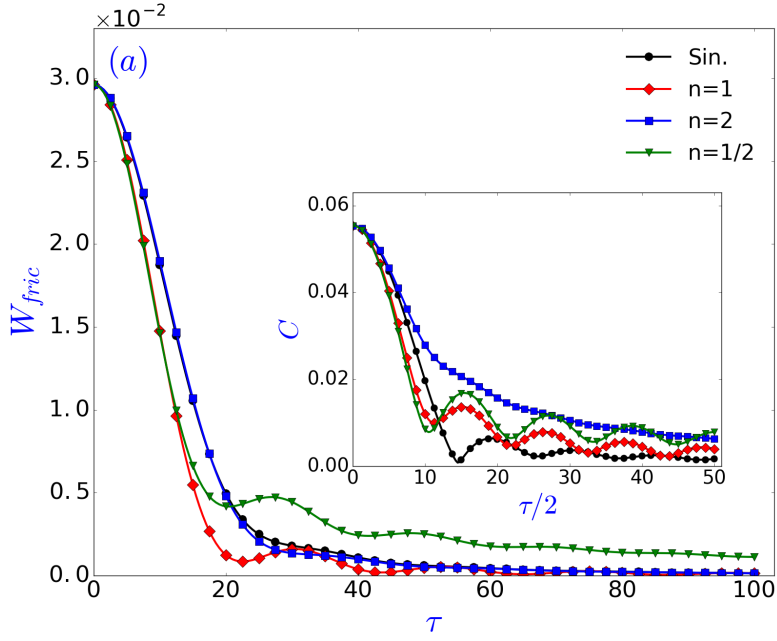
çok yavaş dönüşümü, ulaşılan (hedef) denge durumunun $\rho_a = \sum_n p_n^{(i)} |\epsilon_n^{(f)}\rangle \langle \epsilon_n^{(f)}|$ formunda olmasını sağlayacaktır. Bu ifadede $|\epsilon_n^{(f)}\rangle$ terimi H_f Hamiltonyeninin öz-durumudur. Diğer taraftan, aynı dönüşümü sonlu-zamanda τ yapmak, genellikle sistemin son (adyabatik teorem sağlandığında) yoğunluk matrisini, ρ_τ , denge durumundan saptıracak ve enerji temsilindeki eş-evresizlik artışı nedeniyle fazladan iş gerekecektir. İçsel sürtünme, sonlu-zamanlı süreçte sistem üzerinde yapılan işin, sanki-durağan süreç yapılan geri alınabilir işin farkı olarak tanımlanabilir. Sistem üzerinde harcanan fazladan enerji, uygulanan puls tarafından sürtünmeye karşı yapılan enerjiye eşittir. İçsel sürtünme kısaca $W_{\text{fric}} = W_\tau - W_{\tau \rightarrow \infty} = U_\tau - U_a \geq 0$ ifadesiyle hesaplanır. Burada $U_\mu = \text{Tr}[H_f \rho_\mu]$ 'dır ($\mu = \tau, a$). Plastina vd (2014) içsel sürtünmeyi doğrudan kuantum bağıl entropiye bağlar $S(\rho||\sigma) = \text{Tr}(\rho \ln \rho - \rho \ln \sigma)$. İlgili yoğunluk matrisler göz önüne alındığında içsel sürtünme;

$$W_{\text{fric}} = \beta_a^{-1} S(\rho_\tau || \rho_a) \geq 0, \quad (4.13)$$

ifadesiyle verilir. Bu ifadede β_a^{-1} denge durumundaki yoğunluk matrisinin, ρ_a , sıcaklığıdır. Klein'nin eşitsizliğine göre bağıl entropinin negatif olmaması W_{fric} değerinin her zaman negatif olmadığını garanti eder (Plastina vd, 2014). ρ_τ durumunu denge durumu ρ_a 'ya termalize eden ek bir izokorik süreç düşünüldüğünde, W_{fric} sistemin durumu ρ_τ 'dan ρ_a 'ya giderken sistemden atılmak zorunda olan atık enerji olarak yorumlanabilir. Termalizasyon sırasında değişen enerji $Q = U_a - U_\tau$ ifade edilirken, içsel sürtünme ise $W_{\text{fric}} = -Q$ olarak yazılır.

Her iki adyabatik süreç için hedef durumları ρ_a bulunarak ve denklem (4.13) kullanılarak kuantum Otto çevriminde içsel sürtünme belirlendi ve Şekil 4.14'de toplam adyabatik zamanın fonksiyonu olarak Şekil 4.12 ve Şekil 4.13 de verilen parametreler için çizdirildi. Beklenildiği gibi, hızlı dönüşümler için W_{fric} büyükken kuantum adyabatik teorem altında sıfıra gitmektedir. Aslında Şekil 4.14'nin detaylı analizi tam olarak bölüm 4.3.4'de verilen sonuçlarla uyumludur. Şekil 4.14(a)'da içsel sürtünmenin toplam adyabatik zamana monoton olmayan şekilde bağlı olduğu açıkça görülebilir. Bunun yanında yüksek spinlerin daha fazla içsel sürtünmeye uğradığı

Şekil 4.14(b)'de verilmiştir. Aslında Şekil 4.14'te görülen W_{fric} , çevrimin iki adyabatik kolunda alınan ve bu süreçler sonunda alt izokorik süreçler ile ısı-rezervlerine yönlendirilen toplam fazladan enerjidir. Bu, kökeninde sadece kuantum olan ve kuantum Otto çevriminin performansını sınırlayan etkidir. Bunun yanında farklı bir açıdan yorum yapıldığında W_{fric} ifadesi sonlu-zamanlı süreçlerde, enerji çerçevesinde eş-evresizlik artışının göstergesi olarak göz önüne alınabilir. Şekil 4.14(a) iç grafikte spin-1/2 için adyabatik genişleme kolundaki eş-evresizlik üretimi verilmiştir. Eş-evresizlik çevrimin izokorik süreçlerinde fazladan enerji olarak atılır. Isı olarak kaybedilen bilgi-eşevresizlik belki de Landauer'in prensibinin yorumlanması yoluyla açıklanabilir (Landauer, 1961). Bu aşamada şunu belirtmek gereklidir ki; fazladan iş, kuantum yada klasik olabilir, izole edilmiş kuantum sistemleri ve onun monoton olmayan özelliği farklı durumlarda tartışılmıştır (Çakmak vd, 2016; Acconcia vd, 2015; Acconcia & Bonanca, 2015).



Şekil 4.14. Toplam adyabatik zamanın τ fonksiyonu olarak, içsel sürtünmeden kaynaklanan toplam fazladan enerji (W_{fric}) (a) Şekil 4.12 ve (b) Şekil 4.13 de verilen parametreler için görülmektedir. İç grafik (a)'da sonlu zamanda eşvrelilik üretimini gösterir. Spin-1/2 için adyabatik genişleme evresinde τ 'nın fonksiyonu olarak $C = \left| \left\langle \epsilon_1^{(f)} \left| \rho_\tau \right| \epsilon_2^{(f)} \right\rangle \right|$ ifadesi verilmiştir

4.4. NMR Uyumlu Model Önerisi: Algoritmik Soğutmalı Kuantum Isı Motoru

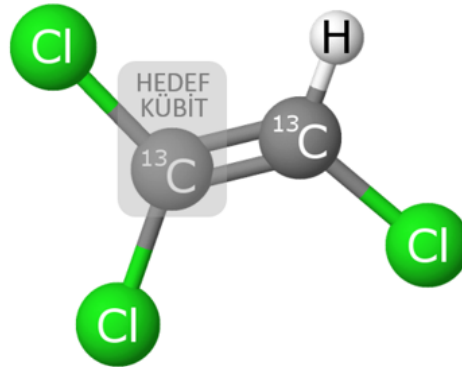
Tezin bu bölümünde kuantum Otto döngüsü, deneysel olarak uygulanabilir model ve gerçek parametreler göz önüne alınarak, Nükleer Manyetik Rezonans teknikleri ile simüle edilecektir.

Spin-1/2 çekirdeklerinden oluşan bir kuantum sisteminin iç Hamiltonyeni, spin-spin etkileşme terimleriyle, genel olarak;

$$H_{int} = \sum_i \omega_i \sigma_{zi} + \frac{\pi}{2} \sum_{i < j} J_{ij} \sigma_{zi} \sigma_{zj}. \quad (4.14)$$

şeklinde yazılır. Burada ω_i , i inci çekirdeğin Larmor frekansı ve J_{ij} ise, spin- i ve spin- j arasındaki skaler çiftlenimin büyüklüğüdür (Hau vd, 2014). NMR'da

a)



b)

| | H | C ₂ | C ₁ | T ₁ |
|----------------|------------|----------------|----------------|----------------|
| H | 500.133MHz | | | 3.5s |
| C ₂ | 200.8Hz | 125.772MHz | | 20s |
| C ₁ | 9Hz | 103.1Hz | 125.773MHz | 43s |

Şekil 4.15. (a) $CDCL_3$ (chloroform-d) çözeltisi içerisinde, $^{13}C_2$ TCE paramanyetik ajanıyla $Cr(acac)_3$. (b) Rezonans frekansları ve J çiftlenim değerleri, tabloda sırasıyla köşegen ve köşegen dışı elemanlarda verilmiştir (Atia vd, 2016; Brassard vd, 2014). C_1 , C_2 ve H için T_1 durulma zamanları sırasıyla 3.5s, 43s ve 20s'dir (Brassard vd, 2014)

kuantum bilgi işleme uygulamaları için çeşitli üç kübitlik modeller kullanılmıştır (Li vd, 2011; Hau vd, 2014; Henry vd, 2006; Cummins vd, 2002). Bu çalışmada ise Brassard vd (2014) deneysel olarak kullandığı; oda sıcaklığında

$CDCL_3$ (chloroform-d) çözültüsü içerisinde, $^{13}C_2$ TCE paramanyetik ajanıyla $Cr(acac)_3$ molekülü, zayıf çiflenim rejimi altında değerlendirilerek, üzerinde çalışılacak model olarak ele alınmıştır (Atia vd, 2016; Brassard vd, 2014). Şekil 4.15’de gösterilen ve aralarında spin-spin etkileşmesi olan 3 tane spin-1/2 sistemi için iç Hamiltonyen ifadesi denklem (4.14) kullanılarak,

$$H_Z = -(\hbar\omega_{C1}I_{z1} + \hbar\omega_{C2}I_{z2} + \hbar\omega_H I_{z3}), \quad (4.15)$$

$$H_J = 2\pi\hbar J_{12}I_{z1}I_{z2} + 2\pi\hbar J_{23}I_{z2}I_{z3} + 2\pi\hbar J_{13}I_{z1}I_{z3}, \quad (4.16)$$

$$H_{int} = H_Z + H_J \quad (4.17)$$

şeklinde yazılır. Burada H_Z Zeemann ve H_J spin-spin etkileşme terimleridir ($\hbar = 1/2\pi$).

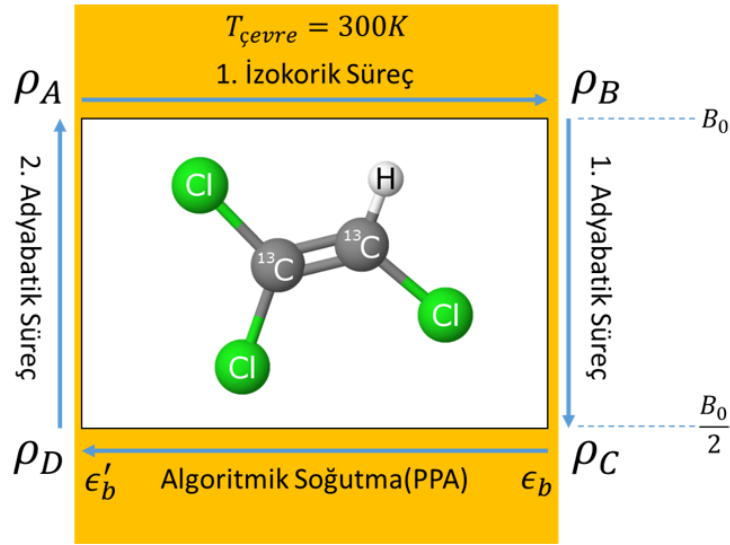
4.4.1. Kuantum Otto çevrimi süreçlerinin uygulanması

Kuantum Otto çevrimi iki izokorik ve iki adyabatik termodinamik süreç içerir. Bu ısı motoru hakkında detaylı teorik bilgi Bölüm 2.3.3’de verilmiştir. Temelde kuantum ısı motorları, ısı akışını fiziksel işe çeviren ve çeşitli kuantum termodinamik süreçlerden oluşan modellerdir. Kuantum Otto çevrimi göz önüne alındığında, Nükleer Manyetik Rezonans teknikleri kullanılarak, uygulanabilir gerçekçi bir modeli canlandırmak için gerekli kuantum izokorik ve kuantum adyabatik süreçler ancak uygun örnek üzerinde ve iyi tasarlanmış bir prosedür ile uygulanabilir. Bilindiği üzere NMR’da bir yönde (genellikle- z) sabit manyetik alan uygulanır. Ancak adyabatik süreçleri uygulamak için z yönündeki manyetik alanın ayarlanabilir şekilde değiştirilmesi gerekmektedir. Pratikte bu teknik yaygın olarak kullanılmaktadır. Özellikle Manyetik Rezonans Görüntüleme işleminde z yönündeki manyetik alan sabit değildir. Bu sayede pozisyon bilgisi elde edilir. Aslında, NMR’da ileri teknikler kullanılarak sabit manyetik alan altında da adyabatik süreçler uygulanabilmektedir (Du vd, 2010). Bu çalışmada ise z yönündeki manyetik alanın ayarlanabilir olduğu kabul edilerek uygulanabilir model önerilmiştir.

Öte yandan NMR’da dış sıcaklık sabittir (genellikle oda sıcaklığı) ve üzerinde çalışılan örnek her zaman ısı-rezervi (çevre) ile temas halindedir. Kuantum Otto döngüsü ise iki farklı sıcaklık arasında ısı akışı olmasını

gerektirmektedir. Bu problemi çözmek için, NMR’da polarizasyonu düşük olan çekirdeklerin sinyallerini güçlendirmek için kullanılan ve NMR kuantum bilgi işleme yöntemleri kullanılarak uygulanan algoritmik soğutma tekniği kullanılmıştır. Bu teknik sayesinde NMR kuantum bilgi işleme teknikleri kullanılarak sistemdeki hedef spin çevreden daha yüksek polarizasyona sahip (soğuk) duruma getirilebilmektedir. İlgili teorik bilgi Bölüm 3.2’de bulunabilir. Bu çalışmada kuantum Otto motoru Şekil 4.15(a) da gösterilen *hedef kübit*, $C1(^{13}C)$, spini göz önüne alınarak uygulanmıştır. Modeldeki diğer spinler ise ($H, C2$) NMR da kuantum Otto motorunu uygulamak için zorunlu-yardımcı kübitler olarak kullanılmıştır.

Kuantum Otto çevrimini NMR teknikleriyle uygulamak için Şekil 4.16’ de gösterilen süreçlerin aşağıdaki prosedüre göre uygulanması ön görülmektedir.



Şekil 4.16. Algoritmik soğutma tekniğiyle Kuantum Otto çevrimi

İzokorik Isıtma: Üzerinde çalışılan modelin başlangıç Hamiltonyeni, $H^{(1)} = H_Z + H_J$ ’dir. Model molekül sabit manyetik alan altında ısı-rezervine temas ettirilerek izokorik süreç başlatılır. $T = T_b$ sıcaklığındaki ısı-rezervi (çevre) ile model molekül arasında, model molekül ile ısı-rezervi termal dengeye ulaşana kadar ısı akışı olur. İzokorik süreç sonunda termal dengeye ulaşan modelin yoğunluk matrisi, $\rho_B = \exp(-\beta_1 H^{(1)})/Z_1$ ile hesaplanır. Burada bölme fonksiyonu $Z_1 = Tr[\exp(-\beta_1 H^{(1)})]$ ve $\beta_1 = 1/k_B T_B$ ’dir ($k_B = 1$). NMR’da

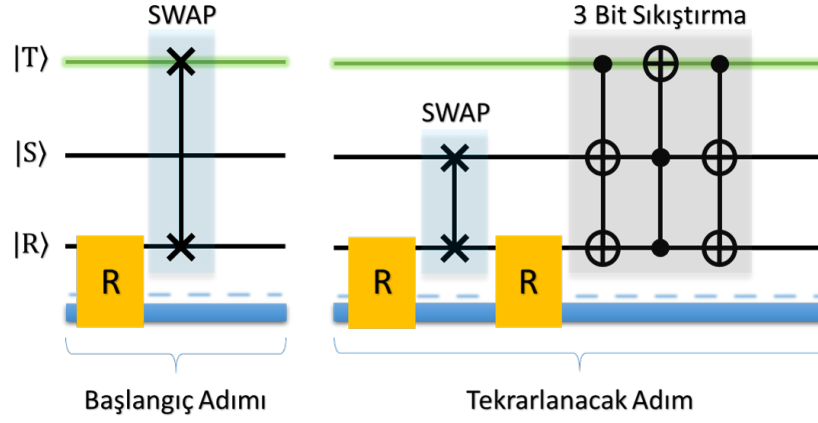
üzerinde çalışılan örnek sürekli çevre ile termal etkileşimde olduğundan aslında ilk izokorik süreci uygulamak için, örnek içerisinde en uzun durulma zamanına sahip spinin dengeye ulaşmasını beklemek yeterli olacaktır. Bu aşamada şunu hatırlatmak gerekmektedir; NMR puls dizilerinin uygulanması için uzun durulma zamanlarına sahip modeller (örnekler) özellikle kuantum bilgi işleme uygulamaları için tercih sebebidir.

Adyabatik Genişleme: Çevre ile termal dengeye ulaşan model üzerine z -ekseninde uygulanan dış manyetik alan $B_0 \rightarrow B_0/2$ ye sonlu-zamanda değiştirilerek kuantum adyabatik gelişme sağlanır. Böylece adyabatik süreç başında, $t = 0$, $H^{(1)}$ olan model hamiltonyeni, ilk adyabatik süreç sonunda, $t = \tau/2$, $H^{(2)} = H_Z/2 + H_J$ 'ye değişir. Burada τ kuantum Otto çevriminde, iki adyabatik süreç için harcanan toplam zamandır. Ayrıca adyabatik süreçlerde geçen toplam zaman, hedef spinin durulma süresinden çok küçüktür ($\tau \ll T_1$). Bu nedenle üzerinde çalışılan modelin ısı-rezervi ile bağlantısı olmadığı kabul edilebilir. Yani sistemle ısı-rezervi arasında ısı transferi olmayacağından sistemdeki spinlerin polarizasyonu korunur. Sistemi adyabatik sürece sokmak için z -yönünde uygulanan Hamiltonyen ifadesi;

$$H_{ext}(t) = (\hbar\omega_{C1}I_{z1} + \hbar\omega_{C2}I_{z2} + \hbar\omega_H I_{z3}) \sin(\pi t/\tau), \quad (4.18)$$

şeklinde verilir. Yoğunluk matrisinin gelişimi von-Neumann denklemi, $\dot{\rho}(t) = -i[H(t), \rho(t)]$, ile hesaplanır. Bu denklemde $H(t) = H^{(1)} + H_{ext}(t)$ ve $\rho(t = 0) = \rho_B$ 'dir. Adyabatik genişleme sonundaki yoğunluk matrisi $\rho_C = \rho(t = \tau/2)$ olmak üzere, bu süreçte yapılan iş $W_I = Tr[H^{(1)}\rho_B] - Tr[H^{(2)}\rho_B]$ olarak yazılır.

Algoritmik Soğutma: NMR'da ısı-rezervi (çevre) sabit sıcaklıkta olduğundan ikinci izokorik süreci gerçekleştirmek için bu çalışmada algoritmik soğutma tekniğinin kullanılması öngörülmüştür. Ayrıca algoritmik soğutma tekniğinde uygulanan pulslar için harcanan süre, hedef kübitin durulma zamanına kıyasla çok küçük olduğundan, çevre ile model arasındaki etkileşmenin hedef kübitin polarizasyonunda sebep olduğu değişim ihmal edilmiştir. Algoritmik soğutma için Şekil 4.17'de verilen partner paylaşma



Şekil 4.17. 3 kubitlik Partner Paylaşma Algoritması (PPA)'nın şematik devre gösterimi. $|T\rangle$, $|S\rangle$ ve $|R\rangle$ sırasıyla hedef, yardımcı ve yeniden kurma kubitleridir. R işlemi ile, yeniden kurma kubitinin ısı-rezervindeki kubit ile yer değiştirilerek yenilenmesi temsil edilmektedir. PPA'da *başlangıç adımı* bir kez uygulanırken, *teklanacak adım* belirli bir sayıda tekrarlanır

algoritması kullanılmıştır. PPA algoritması ile ilgili teorik bilgi Bölüm 3.2.2'de verilmiştir. Üzerinde çalışılan model olarak, $C1$, $C2$ ve H olmak üzere 3 çekirdek spininin temsil ettiği 3 kubitlik bir kuantum sistemi olarak belirlenmiştir. PPA algoritmasını en verimli şekilde kullanmak için Şekil 4.15(b) de verilen tablo yardımıyla, polarizasyonu en yüksek ve durulma zamanı en kısa olan H spini *yenileme kübiti*, $|R\rangle$, polarizasyonu en küçük ve durulma zamanı en uzun olan $C1$ çekirdeğinin spini ise *hedef kubit*, $|T\rangle$ olarak önerilmiştir. $C2$ kübiti ise entropi transferine yardımcı olan kubit, $|S\rangle$. Model molekül üzerinde ilk olarak Şekil 4.17' de gösterilen başlangıç adımı uygulanarak, ısı-küvetiyle termal dengede olan yenileme kubitinin, $|R\rangle$, polarizasyonu hedef kübite, $|T\rangle$, aktarılır. Bu işlem kuantum bilgi işlemede SWAP mantık kapısı ile uygulanır. Ardından direk 3-bit sıkıştırma puls dizisini içeren, ikinci adım uygulanarak hedef kubitin polarizasyonu artırılır. Direk 3-bit sıkıştırma işlemi için kuantum bilgi işlemede kullanılan CNOT kapılarından fadalanılır. Hedef kubitin polarizasyonunu daha da artırmak için ikinci adım tekrarlanır. Böylece hedef kubit, Shannon'un limitini (Atia vd, 2016) aşarak, ısı-rezervinin sıcaklığından daha düşük bir sıcaklığa soğutulur. Algoritmik soğutma işlemi süreci sonucunda, hedef kubitin sıcaklığı, $T_{C1} < T_B$, çevreden daha soğuk olur. Bu süreçte sistemin Hamiltonyeni, $H^{(2)}$ sabit kalacağından, hedef kubit için 2. kuantum izokorik

süreç gerçekleştirilmiş olur. İzokorik süreç sonunda sistemin yoğunluk matrisi ise ρ_D olarak elde edilir ($\rho_D = \rho_{C1} \otimes \rho_{C2} \otimes \rho_H$).

Adyabatik Sıkıştırma: Hedef kübitin algoritmik soğutulmasının ardından, model molekül üzerine uygulanan z -yönündeki manyetik alan $B_0/2 \rightarrow B_0$ 'ye değiştirilerek ikinci adyabatik gelişim süreci başlatılır. Bu süreç sonunda sistem başlangıç Hamiltonyenine geri getirilir ($H^{(2)} \rightarrow H^{(1)}$). Adyabatik süreç başında $\rho(t = \tau/2) = \rho_D$ olan sistemin yoğunluk matrisinin zamanla gelişimi $\dot{\rho}(t) = -i[H(t), \rho(t)]$ denkleminde hesaplanır. $H(t) = H^{(2)} - H_{ext}(t)$ olmak üzere sistemin ulaşacağı yoğunluk matrisi $\rho(t = \tau) = \rho_A$ şeklinde elde edilir. Adyabatik süreçte sistemin yaptığı iş ise $W_{II} = Tr[H^{(1)}\rho_D] - Tr[H^{(2)}\rho_D]$ denkleminde elde edilir.

Böylece adyabatik süreçler sonunda sistemin yaptığı toplam iş,

$$W = W_I + W_{II} \quad (4.19)$$

şeklinde elde edilir.

4.4.2. Kuantum Otto çevriminde hedef kübit'in yaptığı işin hesaplanması

Isı-rezervi (oda sıcaklığında) ile termal dengede olan sistemin yoğunluk matrisi,

$$\rho_T^{(1)} = \exp(-\beta_1(H_Z + H_J))/Z_1 \quad (4.20)$$

şeklinde yazılır. Buradan hedef kübit, $|T\rangle$, için indirgenmiş yoğunluk matrisi;

$$\rho_1^{(T)} = tr_{|T\rangle}[\rho^{(1)}] \quad (4.21)$$

kısmi-iz işlemi ile elde edilir. Realistik parametreler üzerinden nümerik hesaplama yapıldığında; hedef, yardımcı ve yenileme kübitleri için elde edilen polarizasyonlar yaklaşık olarak, sırasıyla ϵ_b , ϵ_b ve $4\epsilon_b$ olarak elde edilir ($\epsilon_b = 2.095 \times 10^{-4}$). Nümerik hesaplamalarda parametre-ölçeklendirme yapılarak, termal denge durumundaki polarizasyonun realistik mertebede olması sağlanmıştır ($\epsilon_b \approx 10^{-5}$) (Park vd, 2015).

Kuantum adyabatik süreçlerde polarizasyon değişmez kalır. Şekil 4.17'de verilen PPA, ilk kuantum adyabatik süreç sonundaki yoğunluk matrisi temel

alınarak aşağıdaki gibi uygulanır:

$$\begin{aligned}
& \rho^{(0)} \{ \epsilon_b, \epsilon_b, 2\epsilon_b \} \\
& \downarrow [SWAP_{13}] \rho^{(0)} [SWAP_{13}]^{-1} \\
& \rho^{(1)} \{ 2\epsilon_b, \epsilon_b, \epsilon_b \} \\
& \downarrow [U(T_1)] \rho^{(1)} [U(T_1)]^{-1} \\
& \rho^{(2)} \{ 2\epsilon_b, \epsilon_b, 2\epsilon_b \} \tag{4.22} \\
& \downarrow [SWAP_{23}] \rho^{(2)} [SWAP_{23}]^{-1} \\
& \rho^{(3)} \{ 2\epsilon_b, 2\epsilon_b, \epsilon_b \} \\
& \downarrow [U(T_1)] \rho^{(3)} [U(T_1)]^{-1} \\
& \rho^{(4)} \{ 2\epsilon_b, 2\epsilon_b, 2\epsilon_b \}
\end{aligned}$$

yukardaki işlem sonucunda hedef kübitin yoğunluk matrisi $\rho_1^{(T)} = tr_{|T\rangle}[\rho^{(4)}]$ ifadesinden;

$$\rho_1^{(T)} = \begin{pmatrix} 0.50020838 & 0 \\ 0 & 0.49979162 \end{pmatrix} \tag{4.23}$$

şeklinde elde edilir. Bu ifadeden hedef karbon atomunun polarizasyonu $\epsilon_{karbon} = P_{|0\rangle} - P_{|1\rangle} = 4.167 \times 10^{-4} (\approx 2\epsilon_b)$ olarak hesaplanır. Karbon atomunun yerel (lokal) Hamiltoniyeni ise,

$$H_C = -\frac{\hbar}{2} \omega'_{C1} \sigma_z \tag{4.24}$$

şeklinde yazılır. Bu ifadede $\omega'_{C1} = \omega_{C1}/2$ ($B_0 \rightarrow B_0/2$)'dir. Bu ifadeler göz önüne alındığında karbon çekirdek spininin sıcaklığı,

$$T_C = \frac{\hbar \omega'_{C1}}{2k_B \epsilon_{karbon}} \tag{4.25}$$

ifadesinden $T_C = 75.446K$ olarak elde edilir ($\hbar = h/2\pi$ ve $k_B = 1$).

Hedef kübiti daha da soğutmak için Şekil 4.17'da gösterilen *direk 3-bit*

sıkıştırma adımıdaki kuantum mantık kapıları izleyen sırayla uygulanarak;

$$\begin{aligned}
& \rho^{(4)} \{2\epsilon_b, 2\epsilon_b, 2\epsilon_b\} \\
& \downarrow [CNotNot_{23}] \rho^{(4)} [CNotNot_{23}]^{-1} \\
& \rho^{(5)} \\
& \downarrow [Tofoli_1] \rho^{(5)} [Tofoli_1]^{-1} \\
& \rho^{(6)} \tag{4.26} \\
& \downarrow [CNotNot_{23}] \rho^{(6)} [CNotNot_{23}]^{-1} \\
& \rho^{(7)} \{1.5(2\epsilon_b) - 0.5(2\epsilon_b)^3\}
\end{aligned}$$

ilk iterasyon sonundaki yoğunluk matrisi, $\rho^{(7)}$, elde edilir. Diğer taraftan $\rho^{(7)} = [U]\rho^{(4)}[U]^{-1}$ olarak yazılabilir. Burada U direk 3-bit sıkıştırma adımıdaki kuantum mantık kapılarını temsil eden işlemcidir.

$$U = [CNotNot][Tofoli][CNotNot] \tag{4.27}$$

olarak elde edilir. Matris temsiliyle;

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{array}{c} \bullet \\ \oplus \\ \bullet \end{array} \begin{array}{c} \oplus \\ \bullet \\ \oplus \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \oplus \\ \bullet \end{array} \tag{4.28}$$

şeklinde yazılır. Sistemin son yoğunluk matrisi, $\rho^{(7)}$, göz önüne alındığında, hedef kubitin indirgenmiş yoğunluk matrisi;

$$\rho_2^{(T)} = \begin{pmatrix} 0.50031257 & 0 \\ 0 & 0.49968743 \end{pmatrix} \tag{4.29}$$

şeklinde elde edilir. Bu ifadeden hedef kubitin polarizasyonu $\epsilon_{karbon} = 6.251 \times 10^{-4}$ olarak hesaplanır. Böylece partner paylaşma algoritması ile hedef kubitin entropisi ısı küvetine yönlendirilerek Shannon'un limiti

aşmıştır ($\epsilon_{karbon} > 4.426 \times 10^{-4}$) (Atia vd, 2016). Diğer taraftan, ilk iterasyon sonunda, elde edilen polarizasyon analitik olarak

$$\epsilon_{karbon} = 1.5\epsilon_{hidrojen} - 0.5\epsilon_{hidrojen}^3 \quad (4.30)$$

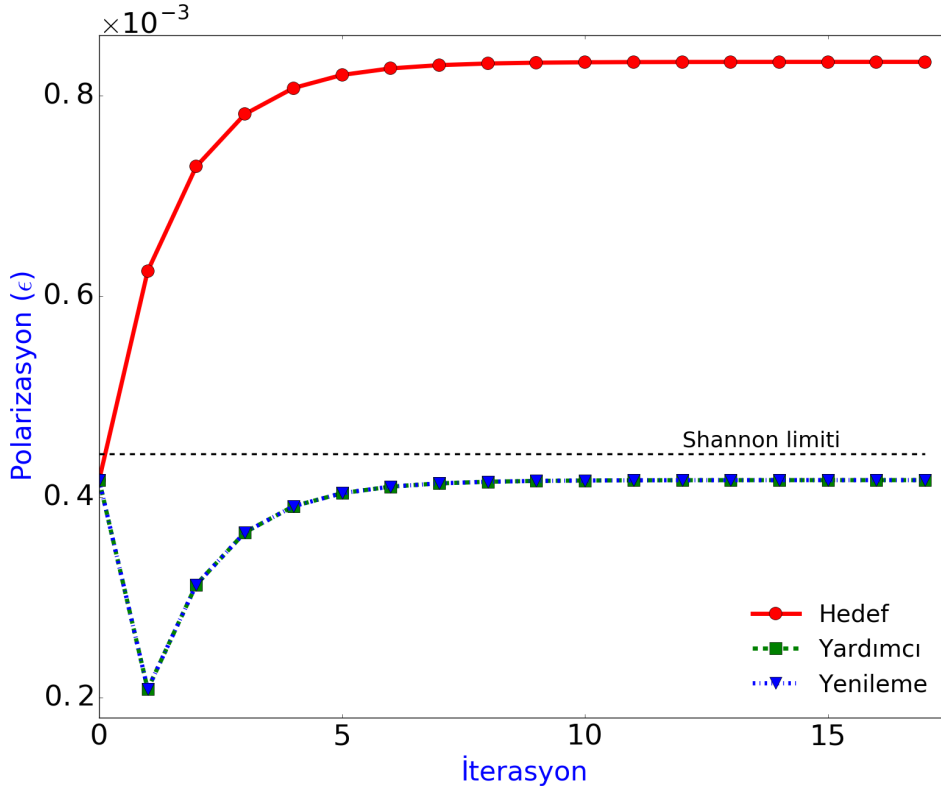
eşitliği ile de hesaplanabilir. Hedef spinin tanımladığı sıcaklık ise denklem (4.25)'den $50.297K$ olarak hesaplanır. Şekil 4.17'de gösterilen ve direk 3-bit soğutma bölümünün olduğu kısım (tekrarlanacak adım) tekrarlanarak her iterasyonda hedef kübitin polarizasyonunun artması sağlanır. Üzerinde çalışılan moleküldeki hedef ($C1$), yardımcı ($C2$) ve yenileme (H) kübitlerinin polarizasyonlarının iterasyon sayısı ile değişimi Şekil 4.18'de verilmiştir. İlk iterasyonun başında tüm kübitlerin polarizasyonu aynıdır. Birinci iterasyonun ardından yardımcı ve yenileme kübitlerinin polarizasyonu minimum değerini değerini alırken, hedef spininin polarizasyonu artmıştır. Bu artışla beraber hedef kübitin polarizasyonu Shannon'un limitinin üzerine çıkmıştır ($\epsilon_{karbon} = 6.251 \times 10^{-4}$). Diğer taraftan yardımcı ve yenileme kübitlerinin polarizasyonu her iterasyon sonunda aynı değeri almıştır. Birinci iterasyonun ardından iterasyon sayısının artması ile tüm kübitlerin polarizasyonu artarken, yardımcı ve yenileme kübitlerinin polarizasyonu maksimum ısı-küvetinin polarizasyonuna (H için) eşit olmaktadır. Benzer şekilde hedef kübitin aldığı maksimum polarizasyon değerinin de iterasyon sayısı ile doyuma ulaştığı gözlemlenmektedir.

Öte yandan kuantum Otto döngüsünde üretilen iş, izokorik süreç sonundaki ρ_B ve algoritmik soğutma sonundaki ρ_D yoğunluk matrisleri üzerinden hesaplanabilir. Hedef kübitin indirgenmiş yoğunluk matrisleri sırasıyla $\rho_B^{[T]} = tr_{[T]}[\rho_B]$ ve $\rho_D^{[T]} = tr_{[T]}[\rho_D]$ olarak elde edilir. Kuantum izokorik süreçlerde hedef kübit tarafından soğrulan ve salınan ısı enerjileri,

$$q_1 = tr[(\rho_B^{[T]} - \rho_D^{[T]})H_{C1}^{ust}] \quad (4.31)$$

$$q_2 = tr[(\rho_D^{[T]} - \rho_B^{[T]})H_{C1}^{alt}] \quad (4.32)$$

şeklinde temsil edilir. Burada eşitliklerde H_{C1}^{ust} ve H_{C1}^{alt} hedef karbonun sırasıyla dış manyetik alan B_0 ve $B_0/2$ olduğundaki yerel Hamiltonyenleridir. Bu ifadeler



Şekil 4.18. PPA'nın tekrarlanması sonucunda hedef (kırmızı-düz), yardımcı (yeşil-kesikli), ve yenileme (mavi-kesikli noktalı) kubitlerinin polarizasyonlarının kusursuz uygulanan kuantum mantık kapıları göz önüne alınarak hesaplanması. Siyah-kesikli çizgi Shannon'un limitini göstermektedir. Hedef ($C1$) kubitinin polarizasyonu bu limiti aşarken, yardımcı ($C2$) ve yenileme (H) kubitleri aynı polarizasyona sahiptirler ve limitin altında kalırlar

kullanılarak kuantum Otto döngüsünde hedef kubit tarafından yapılan iş;

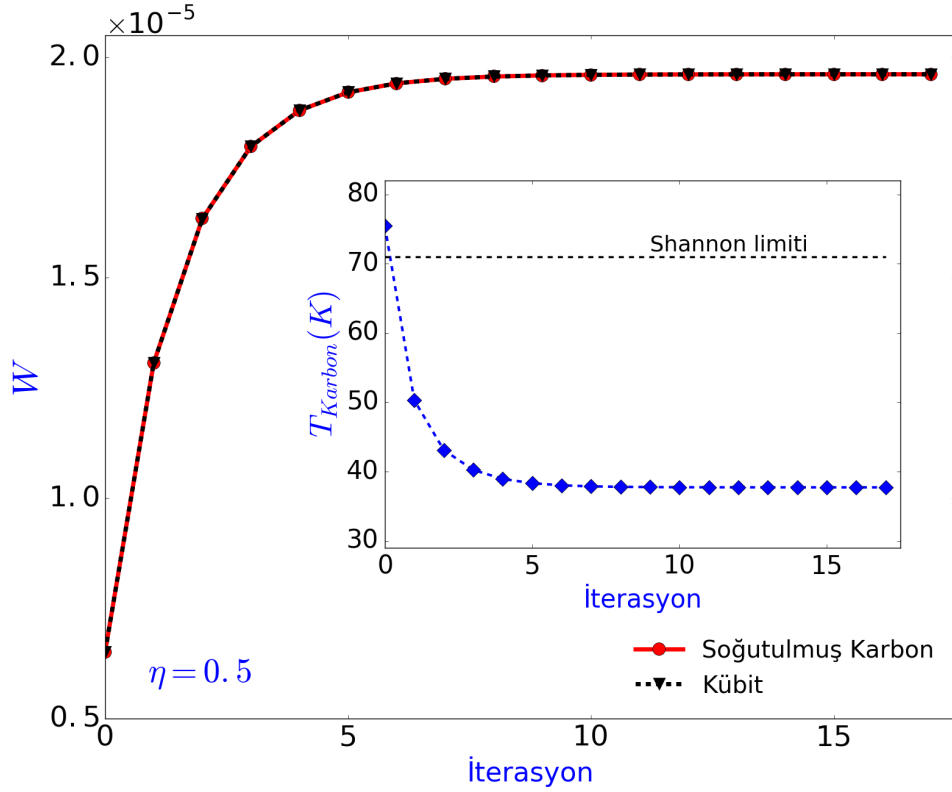
$$W_{karbon} = q_1 + q_2 \quad (4.33)$$

ifadesiyle hesaplanır. Döngüde üretilen işin verimliliği ise,

$$\eta_{karbon} = \frac{W_{karbon}}{q_1} \quad (4.34)$$

eşitliği ile verilir. Şekil 4.19'de kuantum Otto döngüsünde model molekül içerisindeki hedef karbon ($C1$) spininin ürettiği işin, iterasyon sayısına göre değişimi gösterilmiştir. İçteki grafikte ise hedef spinin sıcaklığındaki değişiminin iterasyonla ilişkisi verilmiştir. Ana grafikte görüldüğü üzere; hedef spinin ürettiği iş başlangıçta iterasyon sayısı ile artmakta iken, PPA'nın belirli bir iterasyonundan sonra üretilen iş sabit kalmaktadır. Bunun nedeni ise ikici

izokorik süreçte kullanılan algoritmik soğutma tekniğinin hedef spini belirli bir limite kadar soğutabilmesidir. Alt grafikte iterasyon sayısına göre hedef kübitin yerel (lokal) sıcaklık değerleri verilmiştir. Aynı grafikte birinci iterasyonda hedef spinin sıcaklığının Shannon limitinin altına düştüğü görülebilir. Öte yandan izole bir karbon spini için aynı parametler göz önüne alındığında, denklem (2.39) kullanılarak hesaplanan iş ile molekül içerisindeki hedef karbon spininin ($C1$) ürettiği iş neredeyse aynıdır ($\approx \%001$). Bunun sonucu olarak Şekil 4.19’de iki grafiğin üst-üste geldiği görülebilir. Ayrıca hedef kübitin ürettiği işin verimliliği ile izole kübitin ürettiği işin verimliliği aynıdır ($\eta_{karbon} = 1 - B_l/B_h = 0.5$ ($B_h = B_0$, $B_l = B_0/2$)) (Quan vd, 2007a).



Şekil 4.19. PPA'nın tekrarlanma sayısı ile kuantum Otto motorunun ürettiği işin W değişimi (Kırmızı-düz çizgi). Aynı parametreler için kübitin yaptığı iş (Siyah-kesikli çizgi). İçteki grafikte ise algoritmanın iterasyon sayısı ile hedef kübitin sıcaklığının (T_{Karbon}) değişimi

5. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu bölümde, tez çalışmasından çıkarılan önemli sonuçlara değinilmiştir. Bunun yanında daha sonraki çalışmalara ışık tutması adına önerilerde bulunulmuştur.

5.1. Sonuçlar

Bu çalışmada ilk olarak LMG modeli (Bölüm 4.1) kuantum Otto çevriminin iş-kaynağı olarak göz önüne alındı. Çevrimin adyabatik kolları, ya dış manyetik alanı (h) ya çiftlenim büyüklüğünü (J), yada çevrim boyunca $r = J/h$ oranının sabit olduğu h ve J nin eş zamanlı değişimini içermesi için göz önüne alındı. Her durum için, motorun verimliliği ve iş üretimi üzerindeki anizotropi etkileri detaylı olarak incelendi. J veya h tarafından kontrol edilen adyabatik değişimlerde, LMG Otto motorunun, Kieu'nun şartları sağlanmadığında iş üretilebileceği gösterildi. Adyabatik süreçlerde manyetik alan değişimleri için $h_1 > h_2$ ve $h_1 < h_2$, çiftlenim büyüklüğü değişimleri içinse $J_1 > J_2$ ve $J_1 < J_2$ koşulları altında ısı motoru geliştirilmiştir. LMG Otto motorunun klasik Carnot verimliliğine önemli derecede yakın verimlilikte iş çıkarabildiği bulunmuştur. J ve h 'ın eş-zamanlı değişimleri için LMG Otto motorunun çalışma koşullarının Kieu'nun eşitlikleri ile analiz edilebileceği sunulmuştur. Ayrıca bu durumda hem LMG Otto motoru hemde kübit-motoru aynı verimlilikte iş üretir. Diğer taraftan, güçlü anizotropi, iki-eksenli burkulma ve spin etkileşmeleri iş üretimini, tek-kübit Otto motorunun ürettiği işi 12 kata kadar arttırdığı gösterilerek sistemin ortak doğası ortaya koyulmuştur. Son olarak elde edilen sonuçlar anizotropi parametresinin, etkileşen spin kuantum ısı motorlarının optimum çalıştığı ve ortak üretilen işi arttıran kritik parametre, olduğuna işaret edilmiştir.

Bölüm 4.2'de içsel sürtünme konusu, üniter dönüşümle denge durumu dışına sürülen kapalı kuantum sistemlerinde tersinmezlik, deneysel olarak erişilebilir bir kuantum sistemi örneği içerisinde incelendi. Kuantum sürtünmeden dolayı fazla enerjinin tersinmezlik üretimi, parametrik dönüşüm

sırasında elde edilen güncel yoğunluk matrisi ile sonsuz-yavaş limitte dönüştürülen arasındaki kuantum bağıl entropi kullanılarak, Hamiltonyenin ileri-geri dönüşümü içinde analiz edildi. İçsel sürtünme üzerinde toplam dönüşüm zamanı ve farklı puls kontrolü tasarımları detaylı şekilde incelendi. Sonlu-zamanlı alınan dönüşümler sistemi yoğunluk matrisinin, başlangıç durumuna geri getirilemediği tersinmez süreçlerdir. Bu durum Bloch uzayında sistemin yoğunluk matrisinin izlediği yol çizilerek doğrulandı. Önerilen puls kontrol şemaları, içsel sürtünmenin tekdüze (monoton) olmayan toplam protokol zamanına bağlılığını ve sonlu-zamanlı gerçekleştirilen dönüşümler için neredeyse sürtünmesiz çözümlerini açığa çıkarmaktadır. Elde edilen sonuçlar, toplam protokol zamanının fonksiyonu olarak, adyabatik olmayan işin tekdüze davranışı olmadığını ortaya çıkarmıştır. Ayrıca, üniter dönüşümün neredeyse sürtünmesiz olduğu farklı puls zamanlamaları göz önüne alınarak, sonlu-zamanlı protokollerin elde edilebileceği gösterilmiştir.

Bölüm 4.3'de ise deneysel olarak ulaşılabilir kuantum spin sistemi tabanlı kuantum Otto çevriminin performansı İçsel sürtünmenin varlığında incelendi. Farklı sürücü pulsar tarafından üretilen adyabatik kollar için, iş üretimi ve termal verimlilik üzerinde toplam izinli zamanın rolü detaylı olarak analiz edildi. İçsel sürtünmenin geri alınmaz doğası, entropi üretimi ile karakterize edildi. Ayrıca içsel sürtünmenin sayısal değeri, sonlu-zamanlı üniter sürecin, adyabatik teorem sağlandığında (sonsuz-uzun zamanda) elde edilen sonuç ile arasındaki yakınlık kuantum bağıl entropi ile çalışılarak belirlendi. Kontrollü ve serbest gelişimler uyumlu olmadığında, kuantum Otto çevriminde üretilen iş ile termal verimlilik üzerinde negatif etkilerle kendini gösteren, ideal olmayan, sonlu-zamanlı adyabatik dönüşümler nedeniyle kaçınılmaz uyarılar (enerji-tabanlı temsilde eş-evresizlik üretimine karşılık gelen) sistemde indüklenir. Çevrimin performans parametrelerinin adyabatik evreleri süren manyetik alanın tipine güçlü bir şekilde bağlı olduğu bulundu. Özellikle, her sürücü puls için kritik τ_c zamanın farklı tanımlandığı ve sistemin bu kritik değer ötesinde ısı-motoru olarak çalıştığı gösterildi. İş üretiminin, termal verimliliğin, enerji entropinin ve içsel sürtünmenin monoton olmayan karakteristiği toplam adyabatik zamanın fonksiyonu olarak gösterildi. Sonlu-zamanlı gelişimler içinde

az miktarda entropi üretimi ile neredeyse sürtünmesiz dönüşümlerin mümkün olduğu açıklandı.

Tezin son bölümünde (Bölüm 4.4) ise kuantum Otto çevrimi fiziksel olarak uygulanabilir bir model üzerinde Nükleer Manyetik Rezonans teorisi ile simüle edilmiştir. Algoritmik soğutma tekniği kullanılarak, seçilen moleküldeki hedef kübitin polarizasyonu Shannon limitinin ötesine taşınmış ve bu sayede kuantum Otto çevriminde ikinci izokorik süreç gelişimi sağlanmıştır. Bunun yanında Otto çevriminde hedef kübitin yaptığı iş ve verimliliği hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçlar tek bir ısı-küveti (ısı-rezervi) kullanılarak, NMR teknikleriyle kuantum Otto çevriminin realistik olarak uygulanabileceğini ve sistemin iş üretebildiğini göstermiştir.

5.2. Öneriler

LMG modeli parçacık dolanıklılığı için uygun olmakla birlikte anizotropi parametresi ile sistem tek-eksen burulmada durumundan iki-eksen burulma durumuna geçirilebilir (Kitagawa & Ueda, 1993). Yerel iş ve ısı kavramları açısından LMG sistemindeki ortak etkiler incelenebilir ve ilgi çekici yönleri araştırılabilir (Thomas & Johal, 2011; Huang vd, 2013a; Thomas & Johal, 2014; Ivanchenko, 2015; Huang vd, 2014b; Altintas & Müstecaplıoğlu, 2015).

Konvensiyonel NMR sistemleri üzerinde z -yönünde uygulanan şiddetli manyetik alan sabit olduğundan, Bölüm 4.4.1'de verilen prosedürü uygulamak mümkün değildir. Ancak günümüz teknolojisi sayesinde z -yönündeki manyetik alanı değiştirilebilir yapmak kolaydır. Hatta bunun ticari uygulamaları da mevcuttur. Tıpta kullanılan Manyetik Rezonans Görüntüleme (MRI) tekniğinde z -yönünde uygulanan manyetik alan değişkendir. Buna benzer sistemler modellenerek kuantum Otto çevriminde gerekli olan adyabatik süreçler uygulanabilir. Bunun yanında kuantum Otto çevriminin tüm kuantum termodinamik süreçlerinin algoritmik olarak tasarlanması da mümkündür. Böylece tamamen algoritmik çalışan kuantum Otto motoru tasarlanabilir.

KAYNAKLAR

- Abah O, Roßnagel J, Jacob G, Deffner S, Schmidt-Kaler F, Singer K & Lutz E. (2012). Single-Ion Heat Engine at Maximum Power. *Physical Review Letters*, 109:203006. doi:10.1103/PhysRevLett.109.203006
- Acconcia T V & Bonanca M V S (2015). Degenerate optimal paths in thermally isolated systems. *Physical Review E*, 91:042141. doi:10.1103/PhysRevE.91.042141
- Acconcia T V, Bonanca M V S & Deffner S (2015). Shortcuts to adiabaticity from linear response theory. *Physical Review E*, 92:042148. doi:10.1103/PhysRevE.92.042148
- Ahn K -H & Mohanty P (2003). Quantum Friction of Micromechanical Resonators at Low Temperatures. *Physical Review Letters*, 90:085504. doi:10.1103/PhysRevLett.90.085504
- Albayrak E (2013). The entangled quantum heat engine in the various heisenberg models for a two-qubit system. *International Journal of Quantum Information*, 11:1350021. doi:10.1142/S0219749913500214
- Alecce A, Galve F, Lo Gullo N, Dell'Anna L, Plastina F & Zambrini R (2015). Quantum Otto cycle with inner friction: finite-time and disorder effects. *New Journal of Physics*, 17:075007. doi:10.1088/1367-2630/17/7/075007
- Allahverdyan A E & Nieuwenhuizen T M (2005). Minimal work principle: Proof and counterexamples. *Physical Review E*, 71:046107. doi:10.1103/PhysRevE.71.046107
- Allahverdyan A E, Johal R S & Mahler G (2008). Work extremum principle: Structure and function of quantum heat engines. *Physical Review E*, 77:041118. doi:10.1103/PhysRevE.77.041118
- Altintas F & Müstecaplıođlu Ö E (2015). General formalism of local thermodynamics with an example: Quantum Otto engine with a spin-1/2 coupled to an arbitrary spin. *Physical Review E*, 92:022142. doi:10.1103/PhysRevE.92.022142
- Altintas F, Hardal A Ü C & Müstecaplıođlu Ö E (2014). Quantum correlated heat engine with spin squeezing. *Physical Review E*, 90:032102. doi:10.1103/PhysRevE.90.032102
- Altintas F, Hardal A Ü C & Müstecaplıođlu Ö E (2015). Rabi model as a quantum coherent heat engine: From quantum biology to superconducting circuits. *Physical Review A*, 91:023816. doi:10.1103/PhysRevA.91.023816
- Atia Y, Elias Y, Mor T & Weinstein Y (2016). Algorithmic cooling in liquid-state nuclear magnetic resonance. *Physical Review A*, 93:012325. doi:10.1103/PhysRevA.93.012325
- Attal S, Joye A & Pillet C -A (2006). *Open Quantum Systems II*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg.

- Azimi M, Chotorlishvili L, Mishra S K, Vekua T, Hubner W & Berakdar J (2014). Quantum Otto heat engine based on a multiferroic chain working substance. *New Journal of Physics*, 16:063018. doi:10.1088/1367-2630/16/6/063018
- Batalhao T B, Souza A M, Mazzola L, Auccaise R, Sarthour R S, Oliveira I S, Goold J, Chiara G D, Paternostro M & Serra R M (2014). Experimental reconstruction of work distribution and study of fluctuation relations in a closed quantum system. *Physical Review Letters*, 113:140601. doi:http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.113.140601
- Batalhao T B, Souza A M, Sarthour R S, Oliveira I S, Paternostro M, Lutz E & Serra R M (2015). Irreversibility and the arrow of time in a quenched quantum system. *Physical Review Letters*, 115:190601. doi:10.1103/PhysRevLett.115.190601
- Beretta G P (1984). On the relation between classical and quantum-thermodynamic entropy. *Journal of Mathematical Physics*, 25:1507.
- Beretta G P (1986). Frontiers of nonequilibrium statistical physics: Proc of the NATO advanced study institute, (Santa Fe, 1984, *Series B: Physics*, Vol. 135) ed G.T. Moore and M.O. Scully (New York: Plenum) p 205
- Beretta G P (2006). Nonlinear model dynamics for closed-system, constrained, maximal-entropy-generation relaxation by energy redistribution. *Physical Review E*, 73:026113. doi:10.1103/PhysRevE.73.026113
- Brassard G, Elias Y, Fernandez J M, Gilboa H, Jones J A, Mor T, Weinstein Y & Xiao L (2014). Experimental heat-bath cooling of spins. *The European Physical Journal Plus*, 129:266. doi:10.1140/epjp/i2014-14266-0
- Briones N A R (2015). Achievable polarization for heat-bath algorithmic cooling. University of Waterloo, Canada.
- Caldirola P & Lugiato L A (1982). Connection between the Schrödinger equation for dissipative systems and the master equation, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 116:248-264. doi:10.1016/0378-4371(82)90242-4
- Campisi M, Pekola J & Fazio R (2015). Nonequilibrium fluctuations in quantum heat engines: theory, example, and possible solid state experiments. *New Journal of Physics*, 17:035012. doi:10.1088/1367-2630/17/3/035012
- Caneva T, Fazio R & Santoro G E (2008). Adiabatic quantum dynamics of the Lipkin-Meshkov-Glick model. *Physical Review B*, 78:104426. doi:10.1103/PhysRevB.78.104426
- Caneva T, Fazio R & Santoro G E (2009). Quantum annealing of an infinite-range transverse-field Ising model, *Journal of Physics: Conference Series*, 143:012004. doi:10.1088/1742-6596/143/1/012004
- Cappellaro P (2012). Quantum theory of radiation interactions, Lecture Notes, Massachusetts Institute of Technology, USA.
- Chen G, Liang J -Q & Jia S (2009). Interaction-induced Lipkin-Meshkov-Glick model in a Bose-Einstein condensate inside an optical cavity. *Optics Express*,

17:19682. doi:10.1364/OE.17.019682

- Cirac J I, Lewenstein M, Molmer K & Zoller P (1998). Quantum superposition states of Bose-Einstein condensates. *Physical Review A*, 57:1208. doi:10.1103/PhysRevA.57.1208
- Comparat D (2009). General conditions for quantum adiabatic evolution. *Physical Review A*, 80:012106. doi:10.1103/PhysRevA.80.012106
- Courbage M & Prigogine I (1983). Intrinsic randomness and intrinsic irreversibility in classical dynamical systems. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 80:2412.
- Cummins H K, Jones C, Furze A, Soffe N F, Mosca M, Peach J M & Jones J A (2002). Approximate quantum cloning with nuclear magnetic resonance. *Physical Review Letters*, 88:187901. doi:10.1103/PhysRevLett.88.187901
- Çakmak S, Altintas F & Müstecaplıoğlu Ö E (2016). Irreversibility in a unitary finite-rate protocol: the concept of internal friction. *Physica Scripta*, 91:075101. doi:10.1088/0031-8949/91/7/075101
- Das A, Sengupta K, Sen D & Chakrabarti B K (2006). Infinite-range Ising ferromagnet in a time-dependent transverse magnetic field: Quench and ac dynamics near the quantum critical point. *Physical Review B*, 74:144423. doi:10.1103/PhysRevB.74.144423
- Deffner S & Lutz E (2010). Generalized clausius inequality for nonequilibrium quantum processes, *Physical Review Letters*, 105:170402. doi:10.1103/PhysRevLett.105.170402
- Deffner S & Lutz E (2011). Nonequilibrium Entropy Production for Open Quantum Systems. *Physical Review Letters*, 107:140404. doi:10.1103/PhysRevLett.107.140404
- del Campo A, Goold J & Paternostro M (2014). More bang for your buck: Superadiabatic quantum engines. *Scientific Reports*, 4:6208. doi:10.1038/srep06208
- Deng J, Wang Q-h, Liu Z, Hanggi P & Gong J (2013). Boosting work characteristics and overall heat-engine performance via shortcuts to adiabaticity: Quantum and classical systems. *Physical Review E*, 88:062122. doi:10.1103/PhysRevE.88.062122
- Dillenschneider R & Lutz E (2009). Energetics of quantum correlations. *Europhysics letters*, 88:50003. doi:10.1209/0295-5075/88/50003
- Diosi L (2007). *A Short Course in Quantum Information Theory* (2nd ed.). Springer, Verlag Berlin Heidelberg.
- Du J, Xu N, Peng X, Wang P, Wu S & Lu D (2010). NMR Implementation of a molecular hydrogen quantum simulation with adiabatic state preparation. *Physical Review Letters*, 104:030502. doi:10.1103/PhysRevLett.104.030502
- Elias Y, Gilboa H, Mor T & Weinstein Y (2011). Heat-bath cooling of spins in two amino acids. *Chemical Physics Letters*, 517:126-131. doi:10.1016/j.cplett.2011.10.039
- Feldmann T & Kosloff R (2000). Performance of discrete heat engines and heat

- pumps in finite time. *Physical Review E*, 61:4774. doi:10.1103/PhysRevE.61.4774
- Feldmann T & Kosloff R (2003). Quantum four-stroke heat engine: Thermodynamic observables in a model with intrinsic friction. *Physical Review E*, 68:016101. doi:10.1103/PhysRevE.68.016101
- Feldmann T & Kosloff R (2004). Characteristics of the limit cycle of a reciprocating quantum heat engine. *Physical Review E*, 70:046110. doi:10.1103/PhysRevE.70.046110
- Feldmann T & Kosloff R (2006). Quantum lubrication: Suppression of friction in a first-principles four-stroke heat engine. *Physical Review E*, 73:025107(R). doi:10.1103/PhysRevE.73.025107
- Feldmann T & Kosloff R (2012). Short time cycles of purely quantum refrigerators. *Physical Review E*, 85:051114. doi:10.1103/PhysRevE.85.051114
- Fialko O & Hallwood D W (2012). Isolated quantum heat engine. *Physical Review Letters*, 108:085303. doi:10.1103/PhysRevLett.108.085303
- Gardas B & Deffner S (2015). Thermodynamic universality of quantum Carnot engines. *Physical Review E*, 92:042126. doi:10.1103/PhysRevE.92.042126
- Geva E & Kosloff R (1992). On the classical limit of quantum thermodynamics in finite time. *The Journal of Chemical Physics*, 97:6.
- Glick A J, Lipkin H J & Meshkov N (1965). Validity of many-body approximation methods for a solvable model: (III). Diagram summations. *Nuclear Physics*, 62(2), 211-224. doi:10.1016/0029-5582(65)90864-3
- Gorini V, Kossakowski A & Sudarshan E C G (1976). Completely positive dynamical semigroups of N-level systems. *Journal of Mathematical Physics*, 17(5), 821-825. doi:10.1063/1.522979
- Hamdouni Y & Petruccione F (2007). Time evolution and decoherence of a spin-1/2 particle coupled to a spin bath in thermal equilibrium. *Physical Review B*, 76:174306. doi:10.1103/PhysRevB.76.174306
- Hardal A Ü C & Müstecaplıođlu Ö E (2015). Superradiant Quantum Heat Engine. *Scientific Reports*, 5:12953. doi:10.1038/srep12953
- Hatsopoulos G N & Gyftopoulos E P (1976). A unified quantum theory of mechanics and thermodynamics. Part I. Postulates. *Foundations of Physics* 6:15-31. doi:10.1007/BF00708660
- Hau S-Y, Sheng Y-B, Feng G-R & Long G-L (2014). Single molecule investigation of Ag⁺ interactions with single cytosine-, methylcytosine- and hydroxymethylcytosine-cytosine mismatches in a nanopore. *Scientific Reports*, 4:6857. doi:doi:10.1038/srep05883
- Havel T F (2003). Robust procedures for converting among Lindblad, Kraus and matrix representations of quantum dynamical semigroups. *Journal of Mathematical Physics*, 44:534. doi:10.1063/1.1518555
- He J -Z, He X & Zheng J (2012b). Thermal entangled quantum heat engine

- working with a three-qubit heisenberg XX model. *International Journal of Theoretical Physics*, 51(7):2066–2076. doi:10.1007/s10773-012-1084-z
- He X, He J & Zheng J (2012a). Thermal entangled quantum heat engine. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 391(24):6594–6600. doi:10.1016/j.physa.2012.07.050
- Heggie M I, Terrones M, Eggen B R, Jungnickel G, Jones R, Latham C D, Briddon P R & Terrones H (1998). Quantitative density-functional study of nested fullerenes. *Physical Review B*, 57:13339. doi:http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.57.13339
- Henrich M J, Mahler G & Michel M (2007). Driven spin systems as quantum thermodynamic machines: Fundamental limits. *Physical Review E*, 75:051118. doi: 10.1103/PhysRevE.75.051118
- Henry M K, Emerson J, Martinez R & Cory D G (2006). Localization in the quantum sawtooth map emulated on a quantum-information processor. *Physical Review A*, 74:062317. doi:10.1103/PhysRevA.74.062317
- Hensel M, & Korsch J (1992). Dissipative quantum dynamics: solution of the generalized von Neumann equation for the damped harmonic oscillator, *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 25:2043. doi:10.1088/0305-4470/25/7/040
- Hou S -Y, Sheng Y -B, Feng G -R & Long G -L (2014). Experimental optimal single qubit purification in an NMR quantum information processor. *Scientific Reports*, 4:6857. doi:10.1038/srep06857
- Huang X L, Liu Y, Wang Z & Niu X Y (2014b). Special coupled quantum Otto cycles. *The European Physical Journal Plus*, 129:4. doi:10.1140/epjp/i2014-14004-8
- Huang X L, Niu X Y, Xiu X M & Yi X X (2014a). Quantum Stirling heat engine and refrigerator with single and coupled spin systems. *The European Physical Journal D*, 68:32. doi:10.1140/epjd/e2013-40536-0
- Huang X L, Wang L C & Yi X X (2013a). Quantum Brayton cycle with coupled systems as working substance. *Physical Review E*, 87:012144. doi:10.1103/PhysRevE.87.012144
- Huang X L, Wang T & Yi X X (2012). Effects of reservoir squeezing on quantum systems and work extraction. *Physical Review E*, 86:051105. doi:10.1103/PhysRevE.86.051105
- Huang X L, Xu H, Niu X Y & Fu Y D (2013b). A special entangled quantum heat engine based on the two-qubit Heisenberg XX model. *Physica Scripta*, 88:065008. doi:10.1088/0031-8949/88/06/065008
- Hubner W, Lefkidis G, Dong C. D, Chaudhuri D, Chotorlishvili L & Berakdar J (2014). Spin-dependent Otto quantum heat engine based on a molecular substance. *Physical Review B*, 90:024401. doi: 10.1103/PhysRevB.90.024401
- Ingarden R S, Kossakowski A & Ohya M (1997). *Information Dynamics and Open Systems*. Springer, New York.

- Ivanchenko E A (2015). Quantum Otto cycle efficiency on coupled qudits. *Physical Review E*, 92:032124. doi:10.1103/PhysRevE.92.032124
- Kieu T D (2004). The Second Law, Maxwell's Demon and Work Derivable from Quantum Heat Engines. *Physical Review Letters*, 93:140403. doi:10.1103/PhysRevLett.93.140403
- Kieu T D (2006). Quantum heat engines, the second law and Maxwell's daemon. *The European Physical Journal D*, 39:115-128. doi:10.1140/epjd/e2006-00075-5
- Kitagawa M & Ueda M (1993). Squeezed spin states. *Physical Review A*, 47:5138. doi:10.1103/PhysRevA.47.5138
- Korsch H J & Steffen H (1987). Dissipative quantum dynamics, entropy production and irreversible evolution towards equilibrium. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 20:3787. doi:10.1088/0305-4470/20/12/028
- Kosloff R (2013). Quantum thermodynamics: a dynamical viewpoint. *Entropy*, 15:2100-2128. doi:10.3390/e15062100
- Kosloff R & Feldmann T (2002). Discrete four-stroke quantum heat engine exploring the origin of friction. *Physical Review E*, 65:055102(R). doi:10.1103/PhysRevE.65.055102
- Kosloff R & Feldmann T (2010). Optimal performance of reciprocating demagnetization quantum refrigerators. *Physical Review E*, 82:011134. doi:10.1103/PhysRevE.82.011134
- Ladd T D (2005). Quantum computing with nuclear spins in semiconductors. Stanford University, USA
- Landauer R (1961). Irreversibility and heat generation in the computing process, *IBM Journal of Research and Development* , 5(3):183-191. doi:10.1147/rd.53.0183
- Levitt M H (2008). *Spin Dynamics: Basics of Nuclear Magnetic Resonance* (2nd ed.). John Wiley & Sons Ltd, England.
- Li Z, Yung M -H, Chen H, Lu D, Whitfield J D, Peng X, -Guzik A A & Du J (2011). Solving Quantum Ground-State Problems with Nuclear Magnetic Resonance, *Scientific Reports*, 1:88. doi:doi:10.1038/srep00088
- Lin B & Chen J (2003). Performance analysis of an irreversible quantum heat engine working with harmonic oscillators. *Physical Review E*, 67:046105. doi:10.1103/PhysRevE.67.046105
- Lindblad G (1976). On the generators of quantum dynamical semigroups. *Communications in Mathematical Physics*, 48, 119–130.
- Lipkin H J, Meshkov N & Glick A J (1965). Validity of many-body approximation methods for a solvable model: (I). Exact solutions and perturbation theory. *Nuclear Physics*, 62(2):188-198. doi: 10.1016/0029-5582(65)90862-X
- Lucia U (2015a). Some considerations on molecular machines and Loschmidt paradox. *Chemical Physics Letters*, 623:98-100.

doi:10.1016/j.cplett.2015.01.055

- Lucia U (2015b). A Link between nano and classical thermodynamics: Dissipation analysis (the entropy generation approach in nano thermodynamics). *Entropy*, 17(2):1309-1328. doi:10.3390/e17031309
- Lucia U (2015c). Entropy production and generation: Clarity from nanosystems considerations. *Chemical Physics Letters*, 629:87-90. doi:10.1016/j.cplett.2015.03.062
- Lucia U (2016a). Second law considerations on the third law: From Boltzmann and Loschmidt paradox to non equilibrium temperature. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 444:121-128. doi:10.1016/j.physa.2015.10.023
- Lucia U (2016b). Considerations on non equilibrium thermodynamics of interactions. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 447:314-319. doi:10.1016/j.physa.2015.12.063
- Ma J & Wang X (2009). Fisher information and spin squeezing in the Lipkin-Meshkov-Glick model. *Physical Review A*, 80:012318. doi:10.1103/PhysRevA.80.012318
- Ma J, Wang X, Sun C P & Nori F (2011). Quantum spin squeezing. *Physics Reports*, 509:89-165. doi:10.1016/j.physrep.2011.08.003
- Maddox J (1985). When reference means deference. *Nature*, 321:723. doi:10.1038/321723a0
- Mangold O, Heidebrecht A & Mehring M (2004). NMR tomography of the three-qubit Deutsch-Jozsa algorithm. *Physical Review E*, 70:042307. doi:10.1103/PhysRevA.70.042307
- Meshkov N, Glick A J & Lipkin H J (1965). Validity of many-body approximation methods for a solvable model: (II). Linearization procedures. *Nuclear Physics*, 62(2):199-210. doi:10.1016/0029-5582(65)90863-1
- Misra A, Singh U, Bera M N & Rajagopal A K (2015). Quantum Rényi relative entropies affirm universality of thermodynamics. *Physical Review E*, 92:042161. doi:10.1103/PhysRevE.92.042161
- Misra B, Prigogine I & Courbage M (1979). Lyapounov variable: Entropy and measurement in quantum mechanics. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 76:4768.
- Miszczak J A, Puchala Z, Horodecki P, Uhlmann A & Życzkowski K (2009). Sub- and super-fidelity as bounds for quantum fidelity. *Quantum Information & Computation*, 9:103-130.
- Morrison S & Parkins A S (2008a). Collective spin systems in dispersive optical cavity QED: Quantum phase transitions and entanglement. *Physical Review A*, 77:043810. doi:10.1103/PhysRevA.77.043810
- Morrison S & Parkins A S (2008b). Dynamical quantum phase transitions in the dissipative Lipkin-Meshkov-Glick model with proposed realization in optical cavity QED. *Physical Review Letters*, 100:040403.

doi:10.1103/PhysRevLett.100.040403

- Moussa O (2005). On heat-bath algorithmic cooling and its implementation in solid-state NMR. University of Waterloo, Canada.
- Nicolis G, & Prigogine I (1979). Irreversible processes at nonequilibrium steady states and Lyapounov functions. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 76(12):6060–6061.
- Nielsen M A & Chuang I L (2010). *Quantum Computation and Quantum Information*. (Cambridge: Cambridge University Press)
- Ohya M & Watanabe N (2010). Quantum entropy and its applications to quantum communication and statistical physics. *Entropy*, 12, 1194-1245. doi:10.3390/e12051194
- Oliveira I S, Bonagamba T J, Sarthour R S, Freitas J C C & deAzevedo E R (2007). *NMR Quantum Information Processing*. Elsevier, Netherlands.
- Park D K, Rodriguez-Briones N A, Freng G, Darabad R R, Baugh J & Laflamme R (2015). Heat bath algorithmic cooling with spins: Review and prospects. University of Waterloo, Canada.
- Parrondo J M R, den Broeck C V & Kawai R (2009). Entropy production and the arrow of time. *New Journal of Physics*, 11, 073008. doi:10.1088/1367-2630/11/7/073008
- Plastina F, Alecce A, Apollaro T J G, Falcone G, Francica G, Galve F, Lo Gullo N & Zambrini R (2014). Irreversible Work and Inner Friction in Quantum Thermodynamic Processes. *Physical Review Letters*, 113:260601. doi:10.1103/PhysRevLett.113.260601
- Prigogine I, Mayne F, George C & Haan M D (1977). Microscopic theory of irreversible processes, *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 74:4152–4156.
- Quan H T (2009). Quantum thermodynamic cycles and quantum heat engines. II. *Physical Review E*, 79:041129. doi:10.1103/PhysRevE.79.041129
- Quan H T, Liu Y -X & Sun C P (2007a). Quantum thermodynamic cycles and quantum heat engines. *Physical Review E*, 76:031105. doi:10.1103/PhysRevE.76.031105
- Quan H T, Wang Z D & Sun C P (2007b). Quantum critical dynamics of a qubit coupled to an isotropic Lipkin-Meshkov-Glick bath. *Physical Review A*, 76:012104. doi:10.1103/PhysRevA.76.012104
- Quan H T, Zhang P & Sun C P (2005). Quantum heat engine with multilevel quantum systems. *Physical Review E*, 72:056110. doi:10.1103/PhysRevE.72.056110
- Quan H T, Zhang P & Sun C P (2006). Quantum-classical transition of photon-Carnot engine induced by quantum decoherence. *Physical Review E*, 73:036122. doi:10.1103/PhysRevE.73.036122
- Raitz C, Souza A M, Auccaise R, Sarthour R S & Oliveira I S (2015). Experimental implementation of a nonthermalizing quantum thermometer.

- Quantum Information Processing*, 14:37-46. doi:10.1007/s11128-014-0858-z
- Rempp F (2007). Algorithmic cooling and quantumthermodynamic machines. University of Stuttgart, Germany.
- Rezek Y (2010). Reflections on friction in quantum mechanics. *Entropy*, 12(8):1885-1901. doi:10.3390/e12081885
- Rezek Y & Kosloff R (2006). Irreversible performance of a quantum harmonic heat engine. *New Journal of Physics*, 8:83. doi:10.1088/1367-2630/8/5/083
- Rezek Y, Salamon P, Hoffmann K H & Kosloff R (2009). The quantum refrigerator: The quest for absolute zero. *Europhysics Letters*, 85:30008. doi:10.1209/0295-5075/85/30008
- Ribeiro W L, Landi G T & Semiao F L (2016). Quantum thermodynamics and work fluctuations with applications to magnetic resonance. arXiv:1601.01833.
- Rigolin G & Ortiz G (2012). Adiabatic theorem for quantum systems with spectral degeneracy. *Physical Review A*, 85:062111. doi:10.1103/PhysRevA.85.062111
- Roßnagel J, Abah O, Schmidt-Kaler F, Singer K & Lutz E (2014). Nanoscale Heat Engine Beyond the Carnot Limit. *Physical Review Letters*, 112:030602. doi:10.1103/PhysRevLett.112.030602
- Sakurai J J (1994). *Modern Quantum Mechanics* (2nd ed.). Addison-Wesley Publishing, USA.
- Salvatori G, Mandarino A & Paris M G A (2014). Quantum metrology in Lipkin-Meshkov-Glick critical systems. *Physical Review A*, 90:022111. doi:10.1103/PhysRevA.90.022111
- Schaller G (2014). Open quantum systems far from equilibrium. *Lecture Notes in Physics*, 881:1-26. doi:10.1007/978-3-319-03877-3
- Schumacher B & Westmoreland M D (2000). Relative entropy in quantum information theory. arXiv:quant-ph/0004045.
- Scovil H E D & Schulz-Dubois E O (1959). Three-level masers as heat engines. *Physical Review Letters*, 2:262. doi:10.1103/PhysRevLett.2.262
- Scully M O, Zubairy M S, Agarwal G S & Walther H (2003). Extracting work from a single heat bath via vanishing quantum coherence. *Science*, 299:862-864. doi:10.1126/science.1078955
- Solinas P, Ribeiro P & Mosseri R (2008). Dynamical properties across a quantum phase transition in the Lipkin-Meshkov-Glick model. *Physical Review A*, 78:052329. doi:10.1103/PhysRevA.78.052329
- Sothmann B & Büttiker M (2012). Magnon-driven quantum-dot heat engine. *Europhysics Letters*, 99:27001. doi: 10.1209/0295-5075/99/27001
- Stolze J & Suter D (2008). *Quantum computing: A short course from theory to experiment*. (Wiley).
- Svirachevski G P (2001). Nonlinear quantum evolution with maximal entropy production. *Physical Review A*, 63:022105. doi:10.1103/PhysRevA.63.022105
- Sjöqvist E, Rahaman R, Basu U & Basu B (2010). Berry phase and fidelity

- susceptibility of the three-qubit Lipkin–Meshkov–Glick ground state. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 43:354026. doi:10.1088/1751-8113/43/35/354026
- Thoedospulu M, Grecos A & Prigogine I (1978). On the derivation of linear irreversible thermodynamics for classical fluids. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 75:1632.
- Thomas G & Johal R S (2011). Coupled quantum Otto cycle. *Physical Review E*, 83:031135. doi:10.1103/PhysRevE.83.031135
- Thomas G & Johal R S (2014). Friction due to inhomogeneous driving of coupled spins in a quantum heat engine. *The European Physical Journal B*, 87:166. doi:epjb/e2014-50231-1
- Tonner T & Mahler G (2005). Autonomous quantum thermodynamic machines. *Physical Review E*, 72:066118. doi:10.1103/PhysRevE.72.066118
- Torrontegui E & Kosloff R (2013). Quest for absolute zero in the presence of external noise. *Physical Review E*, 88:032103. doi:10.1103/PhysRevE.88.032103
- Turkpençe D & Müstecaplıođlu Ö E (2016). Quantum fuel with multilevel atomic coherence for ultrahigh specific work in a photonic Carnot engine. *Physical Review E*, 93:012145. doi:10.1103/PhysRevE.93.012145
- Uhlmann A (2011). Transition probability (fidelity) and its relatives. *Foundations of Physics*, 41:288–298. doi:10.1007/s10701-009-9381-y
- Vaikuntanathan S & Jarzynski C (2009). Dissipation and lag in irreversible processes. *Europhysics Letters*, 87, 60005. doi:10.1209/0295-5075/87/60005
- Vedral V (2002). The role of relative entropy in quantum information theory. *Reviews of Modern Physics*, 74:197. doi:10.1103/RevModPhys.74.197
- Vidal J (2006). Concurrence in collective models. *Physical Review A*, 73:062318. doi:10.1103/PhysRevA.73.062318
- Vidal J, Palacios G & Aslangul G (2004). Entanglement dynamics in the Lipkin–Meshkov–Glick model. *Physical Review A*, 70:062304. doi:10.1103/PhysRevA.70.062304
- Wang H, Liu S & He J (2009). Thermal entanglement in two-atom cavity QED and the entangled quantum Otto engine. *Physical Review E*, 79:041113. doi:10.1103/PhysRevE.79.041113
- Wang H, Wu G & Chen D (2012a). Thermal entangled quantum Otto engine based on the two qubits Heisenberg model with Dzyaloshinskii–Moriya interaction in an external magnetic field. *Physica Scripta*, 86:015001. doi:10.1088/0031-8949/86/01/015001
- Wang J, He J & Wu Z (2012b). Thermalization and quantum correlations in exactly solvable models. *Physical Review E*, 85:031145. doi:10.1103/PhysRevE.85.031145
- Wang J, He J & Xin Y (2007). Performance analysis of a spin quantum heat engine cycle with internal friction. *Physica Scripta*, 75:227–234. doi:10.1088/0031-

- Wang R, Wang J, He J & Ma Y (2013). Efficiency at maximum power of a heat engine working with a two-level atomic system. *Physical Review E*, 87:042119. doi:10.1103/PhysRevE.87.042119
- Wei Bo-Bo & Plenio M B (2015). Relations between dissipated work and rényi divergences. arXiv:1509.07043.
- Wichterich H, Vidal J & Bose S (2010). Universality of the negativity in the Lipkin-Meshkov-Glick model. *Physical Review A*, 81:032311. doi:10.1103/PhysRevA.81.032311
- Wilms J, Vidal J, Verstraete F & Dusuel S (2012). Finite-temperature mutual information in a simple phase transition. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, P01023. 10.1088/1742-5468/2012/01/P01023
- Wu F, Chen L, Sun F, Wu C & Li Q (2006). Generalized model and optimum performance of an irreversible quantum Brayton engine with spin systems. *Physical Review E*, 73:016103. doi:10.1103/PhysRevE.73.016103
- Zhang G -F (2008). Entangled quantum heat engines based on two two-spin systems with Dzyaloshinski-Moriya anisotropic antisymmetric interaction. *The European Physical Journal D*, 49:123-128. doi:10.1140/epjd/e2008-00133-0
- Zhang K, Bariani F & Meystre P (2014). Quantum optomechanical heat engine. *Physical Review Letters*, 112:150602. doi:10.1103/PhysRevLett.112.150602
- Zhang T, Liu W -T, Chen P -X & Li C -Z (2007). Four-level entangled quantum heat engines. *Physical Review A*, 75:062102. doi:10.1103/PhysRevA.75.062102
- Zhang Z, Chen G, Diao Z & Hemmer P R (2016). NMR quantum computing, Lecture Notes, Ohio State University, USA. <http://www.ohio.edu/people/diao/papers/nmr.pdf>
- Zheng Y, Campbell S, Chiara G D & Poletti D (2015). Cost of transitionless driving and work output. arXiv:1509.01882.
- Zheng Y, Hanggi P & Poletti D (2016). Occurrence of discontinuities in the performance of finite-time quantum Otto cycles. *Physical Review E*, 94:012137. doi:10.1103/PhysRevE.94.012137

ÖZGEÇMİŞ

Adı ve Soyadı :Selçuk Çakmak
Doğum Yeri :Ulubey/Ordu
Doğum Tarihi :06/05/1986
Yabancı Dili :İngilizce

Eğitim Durumu

Lise :Ordu Lisesi (2004)
Üniversite :Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Eğitim Fakültesi, Orta
Öğretim Fizik Öğretmeliği (2009)
Yüksek Lisans :Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik
Anabilim Dalı (Eylül, 2009-Eylül, 2011)

Çalıştığı Kurum/Kurumlar ve Yıl

Dizany Grup, 2010-2011
Koç Üniversitesi, 2011-Halen

Yayımlar

Çakmak S, Altintas F & Müstecaplıoğlu Ö E (2016). Lipkin-Meshkov-Glick model in a quantum Otto cycle. *The European Physical Journal Plus*, 131:197. doi:10.1140/epjp/i2016-16197-0
Çakmak S, Altintas F & Müstecaplıoğlu Ö E (2016). Irreversibility in a unitary finite-rate protocol:the concept of internal friction. *Physica Scripta*, 91:075101. doi:10.1088/0031-8949/91/7/075101