



T.C.
ONDOKUZ MAYIS ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ



FİZİK ANABİLİM DALI

KUANTUM BİLGİ TEORİSİNDE DÖNME İŞLEMCİLERİ VE EPR
TEKNİĞİNİN UYGULANABİLİRLİĞİ

DOKTORA TEZİ

Mehpeyker KOCAKOÇ
(09210516)

Tezin Savuma Tarihi : 5 Aralık 2014

Tez Danışmanı : Prof. Dr. Recep TAPRAMAZ

Ondokuz Mayıs Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalında

Mehpeyker KOCAKOÇ Tarafından Hazırlanan

**KUANTUM BİLGİ TEORİSİNDE DÖNME İŞLEMÇİLERİ VE EPR
TEKNIĞİNİN UYGULANABİLİRLİĞİ**

**başlıklı bu çalışma jürimiz tarafından 05/12/2014 tarihinde yapılan sınav ile
DOKTORA tezi olarak kabul edilmiştir.**

Başkan : Prof. Dr. Ali Bülent EKİN
Ankara Üniversitesi

Jüri Üyeleri : Prof. Dr. Recep TAPRAMAZ
Ondokuz Mayıs Üniversitesi

Prof. Dr. Sait Eren SAN
Gebze Teknik Üniversitesi

Prof. Dr. Azmi GENÇTEN
Ondokuz Mayıs Üniversitesi

Yrd.Doç. Dr. Nurettin ŞENYER
Ondokuz Mayıs Üniversitesi

..../..../2014

Prof. Dr. Hüseyin DEMİR

Enstitü Müdürü

ÖNSÖZ

Bilgisayar teknolojisinin olağanüstü bir hızla gelişmesi ve boyutlarının oldukça küçülmesiyle birlikte, atom boyutunda bilgisayar tasarlanması düşüncesiyle ivme kazanan ve kuantum fiziğini temel alan kuantum bilgi teorisi hakkında pek çok çalışma yapılmaktadır. Ülkemizde de bu alana olan ilgi günden güne artmakta, nitekim bu alan TÜBİTAK tarafından öncelikli alanlar kapsamına alınmış bulunmaktadır. Kuantum bilgisayarları için mantık geçitlerinin ve algoritmaların oluşturularak hayatımıza girmesiyle söz konusu alanda büyük gelişmeler yaşanacağı tahmin edilmekte ve dikkate değer çabalar sarf edilmektedir. Yaptığımız tez çalışması da, denilebilir ki, bu bağlamda bir gayretin ürünüdür.

Bu doktora çalışmasında, kuantum bilgi teorisi üzerine EPR spektroskopi tekniği ile mantık geçitleri ve algoritmalar oluşturulması amaçlanmıştır. Bu maksatla, Pulsu EPR tekniği ile kutrit spin sistemleri için biradikallerin kuantum bilgi işleme için uygulanabilirliği bilimsel yönetime uygun olarak ele alınmıştır.

Çalışmada, kutrit sistemler için ($S = 1$); ilk olarak spin dönme işlemcileri elde edilmiş, kutrit sistemler için enerji düzeyleri ve geçiş frekansları gösterilmiş, yoğunluk matrisi teorisiyle puls dizileri birkaç uygulamayla irdelenmiş, son olarak da çarpım işlemci teoremi ile biradikal Hamiltonieni terimlerinin etkisi altındaki matris temsilleri gösterilmiştir.

Gerek yüksek lisans eğitimi boyunca, gerekse doktora tez çalışması süresince anlayış ve yardımlarını benden esirgemeyen, bilgi ve tecrübesiyle destekleyen, değerli fikirleriyle yol gösteren ve tezimin her aşamasında emek sarfeden kıymetli danışman hocam Prof. Dr. Recep TAPRAMAZ'a en derin saygılarımla teşekkür ederim.

Tez çalışması sırasında danışma ihtiyacı hissettiğim bazı konularda bilgi ve yardımlarını gördüğüm saygıdeğer hocam Prof. Dr. Azmi GENÇTEN'e, çalışmaya katkı sağlayan değerli hocam Yrd. Doç. Dr Nurettin ŞENYER'e, tezin yazım kuralları ve dilbilgisi açısından düzenlenmesinde yardımcı olan TDK Bilim Kurulu Üyesi Prof. Dr. Hasan AKAY'a ayrı ayrı teşekkürlerimi sunarım.

Tez çalışması esnasında karşılaştığım zorlukların giderilmesinde yardım ve destekleriyle yanımda olan aileme teşekkür ederim. Bilhassa, ilmi derinliği ve sıcak ilgisi ile her zaman olduğu gibi akademik çalışmalarım esnasında da yanımda olan, sevgi dolu yakınlığını daima hissettiğim çok değerli büyükbabam merhum Nuri ÜNLÜ'yü burada rahmetle anıyorum.

Nihayet, doktora çalışması dolayısıyla, *2211-C kodlu Yurt İçi Öncelikli Alanlara Yönelik Doktora Teşvik Bursu 2013 yılı 1. Dönem bursiyeri* olarak almış olduğum destek için *Türkiye Bilimsel ve Teknolojik Araştırma Kurumu*'na hususi olarak şükranlarımı sunmak isterim.

Aralık 2014

Mehpeyker Kocakoç

(Öğretim Görevlisi)

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖNSÖZ.....	v
İÇİNDEKİLER	vii
ÇİZELGELER LİSTESİ.....	xi
ŞEKİLLER LİSTESİ.....	xiii
SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ.....	xv
KUANTUM BİLGİ TEORİSİNDE DÖNME İŞLEMCİLERİ VE EPR TEKNIĞİNİN UYGULANABİLİRLİĞİ	xvii
ÖZET.....	xvii
ROTATION OPERATORS IN QUANTUM INFORMATION THEORY AND APPLICABILITY OF EPR TECHNIQUE.....	xix
ABSTRACT	xix
1. GİRİŞ	1
1.1 Tezin Amacı.....	4
1.2 Literatür Araştırması.....	6
2. GENEL BİLGİLER.....	13
2.1 Kuantum Bilgi Teorisi.....	13
2.1.1 Kübit (kuantum bit).....	13
2.1.2 Spin 1/2 sistemler.....	14
2.1.3 Kutritler	14
2.1.4 Çoklu kübitler	15
2.1.5 Bell dolanıklığı.....	16
2.2 Kuantum Bilgisayarlarının Gerçekleştirildiği Sistemler	17
2.2.1 Kuantum elektrodinamiği	18
2.2.2 Fullerenler	19
2.2.3 Moleküler mıknatıslar	19
2.2.4 Biradikaller.....	20
2.2.5 Nükleer manyetik rezonans (NMR) spektroskopisi.....	20
2.2.6 Elektron paramanyetik rezonans (EPR) spektroskopisi.....	21
2.2.7 Elektron nükleer double rezonans (ENDOR) spektroskopisi	21
2.2.8 Spintronik.....	21
2.2.9 Kuantum noktalar.....	22
2.2.10 Süperiletken aygıtlar	22
2.2.11 Işık polarizasyonu	22
2.3 Kuantum Mantık Geçitleri	23
2.3.1 Tek kübit geçitler	23
2.3.1.1 NOT (DEĞİL) geçiti	23
2.3.1.2 Pauli–X geçiti.....	24
2.3.1.3 Pauli–Y geçiti.....	24
2.3.1.4 Pauli–Z geçiti	24
2.3.1.5 Bir kübit için Hadamard geçiti.....	24

2.3.1.6 Faz geçiti veya faz işlemcisi S.....	25
2.3.1.7 T- $\pi/8$ faz geçiti.....	25
2.3.2 İki kübitlik geçitler.....	26
2.3.2.1 CNOT (kontrol-not) geçiti.....	26
2.3.2.2 SWAP geçiti.....	27
2.3.2.3 Toffoli (CCNOT) geçiti.....	28
2.3.2.4 Fredkin (CSWAP) geçiti.....	29
2.4 Kuantum Mantık Devreleri.....	31
2.4.1 Yarı toplayıcı mantık devresi.....	31
2.4.2 Bell dolanıklığı geçiti.....	31
2.4.3 Kuantum dolanıklık.....	32
2.4.4 Dolanık kübitler.....	33
2.4.5 Kuantum transport.....	33
2.5 Kuantum Algoritmaları.....	34
2.6 DiVincenzo Kriterleri.....	35
2.7 EPR Spektroskopisi.....	36
2.7.1 Pulslu EPR spektroskopisi.....	39
2.7.2 Dönen RF sistemleri ve dipol momenti.....	40
2.8 Elektron Nükleer Double Rezonans (ENDOR) ve Pulslu ENDOR.....	43
2.8.1 ENDOR spektroskopisinin temelleri.....	43
2.8.2 Pulslu ENDOR.....	45
2.9 Radikal Çiftleri ve Spin-Spin Dipolar Etkileşme.....	48
2.10 Spin İşlemcileri.....	52
2.11 Yoğunluk Matrisi Teorisi.....	53
2.12 Çarpım İşlemci Teoremi.....	55
2.12.1 SI ($S = 1, I = 1$) spin sistemi için çarpım işlemcileri.....	57
3. MATERYAL VE METOT.....	63
3.1 Spin İşlemcileri ya da Spinlerin Matris Temsilleri.....	63
3.2 Biradikal Hamiltonieni.....	64
3.3 Yoğunluk Matrisi ve Puls Dizisi İşlem Algoritması.....	65
3.4 Üstel İşlemciler: Dönme İşlemcisi ve Yoğunluk Matrisi İşlemleri.....	66
3.5 Spin İşlemcileri ile Etkileşme Hamiltonieni Üzerine.....	67
3.6 Kutrit Sistemlerde Hadamard, CNOT ve SWAP Geçitleri.....	69
3.6.1 Kutrit sistemlerde Hadamard geçiti üzerinde bazı işlemler.....	69
3.6.1.1 Bir ve iki kutrit sistemler (SI; $S = 1, I = 0$ ve $I = 1$) için Hadamard geçiti.....	70
3.6.2 Kutrit sistemlerde Swap geçiti üzerinde bazı işlemler.....	71
3.6.2.1 Tek kutritlik Swap geçiti.....	71
3.6.2.2 SWAP geçitinin özellikleri.....	72
3.6.3 Kutrit Sistem İçin Kontrollü DEĞİL (CNOT) Geçiti.....	72
4. BULGULAR VE TARTIŞMALAR.....	75
4.1 Spin İşlemcilerinin Türetilmesi ve Bazı Spin İşlemcileri.....	75
4.2 Spin Dönme İşlemcileri.....	78
4.3 Kutrit Sistemlerde ($S = 1$) Enerji Düzeylerinin Matris Gösterimi ve Geçiş Enerjileri.....	84
4.3.1 Kutrit sistemde ($S=1$) $I_1 = 0, I_2 = 0$ durumu için enerji düzeyleri ve matris temsilleri ile gösterimi.....	84
4.3.2 ($S=1$) sistemde $I_1 = 1, I_2 = 0$ durumu için enerji düzeyleri ve matris temsilleri ile gösterimi.....	85
4.3.3 ($S = 1, I_1 = 1, I_2 = 1$) sistemde enerji düzeyleri ve geçiş frekansları.....	86

4.4 Yoğunluk Matrisi Teorisi ile Biradikal Spektrumu ve Puls Dizileri.....	89
4.5 Çarpım İşlemci Teorisinin EPR Spektroskopisine Uygulanması: Radikal Çiftleri	93
4.6 Çarpım İşlemci Teorisinde Puls Hamiltonieni	99
4.6.1 Elektron zeeman terimi üzerine x ve y pulslarının etkisi	99
4.6.2 Eksensel aşırı ince yapı etkileşmesi üzerine x ve y pulslarının etkisi	100
4.6.3 Ekvatorial aşırı ince yapı etkileşmesi üzerine x ve y pulslarının etkisi	101
4.6.4 EPR Hamiltonien terimlerinin çarpım işlemci temsilleri.....	103
4.7 Hamiltonien Etkisi Altında Spin İşlemcilerinin Gelişimi	104
4.7.1 Elektron zeeman etkileşmesi altında spin işlemcilerinin gelişimi	105
4.7.2 Eksensel dipolar etkileşmesi altında spin işlemcilerinin gelişimi.....	108
4.7.3 Ekvatorial dipolar etkileşmesi altında spin işlemcilerinin gelişimi	108
4.7.4 Eksensel aşırı ince yapı etkileşmesi altında spin işlemcilerinin gelişimi	108
4.7.5 Ekvatorial aşırı ince yapı etkileşmesi altında spin işlemcilerinin gelişimi	109
5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER	119
5.1 Sonuçlar.....	121
5.2 Bazı Öneriler	121
5.3 Sonsöz	122
KAYNAKLAR	123
ÖZGEÇMİŞ.....	131

ÇİZELGELER LİSTESİ

Sayfa

Çizelge 2.1. Klasik mantık geçitlerinin doğruluk çizelgesi	13
Çizelge 2.2. CNOT geçitinin doğruluk çizelgesi	27
Çizelge 2.3. Swap işlemcisi için doğruluk çizelgesi.....	28
Çizelge 2.4. Toffoli geçitinin doğruluk çizelgesi	29
Çizelge 2.5. Fredkin geçitinin üç kübit için doğruluk çizelgesi	30
Çizelge 2.6. $S=1/2$ ve $I=1/2$ spin sistemi için Hamiltonien gösterimi	46
Çizelge 2.7. Biradikal Hamiltonieninin triplet durum için matris temsili ile enerji öz durumları ve özfonksiyonları (Matris temsili $B_{m_1, m_2} = g\beta B_0$ alınmıştır).....	51
Çizelge 2.8. $IS(S=1/2, I=1/2)$ spin sisteminde 16 çarpım işlemci	56
Çizelge 2.9. Spin 1 sistem için Wigner 3-j formülü ile bulunan 9 spin işlemcisi. Aynı işlemciler $I=1$ için de geçerlidir	58
Çizelge 2.10. $SI(S=1, I=1)$ spin sistemindeki 81 çarpım işlemcisi.....	60
Çizelge 3.1. İki kutritlik sistemler için Wilmott tarafından önerilen iki farklı CNOT geçitinin işlem tablosu. Q_0 taban durumları, W_1 birinci geçitin sonucunu ve W_2 ikinci geçitin sonucunu vermektedir	73
Çizelge 4.1. Spin 3/2 için dönme işlemcisinin r_{23} elemanının açıya göre değişimi ve değişimin grafiği. Sürekli çizgi uyum fonksiyonunu göstermektedir... ..	79
Çizelge 4.2. Radikal çifti (biradikal) ($S = 1$) ile tek bir $I = 1$ spinli çekirdeğin etkileşme Hamiltonieni ve klasik matris temsili. Öz durumların gösteriminde sadelik için $ S, M_S; I, M_I\rangle$ yerine değişmeyen S ve I yazılmadan sadece M_S ve M_I alınmıştır. Genel bilgiler bölümünde verilen biradikal ve aşırı ince yapı etkileşme Hamiltonieninde tek bir çekirdek alınmıştır. Ayrıca ek olarak ikinci merteye aşırı ince yapı etkileşme terimi de, $\omega_{a_1}(S_x I_x + S_y I_y)$, burada dikkate alınmıştır (çekirdek Zeeman terimi küçük olduğu için gözardı edilmiştir)	96
Çizelge 4.3. Denklem 4.33’de verilen Hamiltoniendeki işlemcilerin matris temsilleri	97
Çizelge 4.4. Çizelge 4.2 ve Denklem 4.33’de verilen Hamiltonien temsillerinde izinli geçişler (seçim kuralları $\Delta M_S = \pm 1$ ve $\Delta M_I = 0$). Geçiş enerjileri frekans cinsinden ($\omega = g\beta B_z/\hbar$) alınmıştır. Bu geçiş enerjileri geleneksel EPR spektroskopisine uygun olarak manyetik alan biriminde veya frekans biriminde de ifade edilebilir	98
Çizelge 4.5. Dipolar etkileşme Hamiltonieninin terimlerinin $S = 1$ ve $I_1 = 1$ spin sistemi için x ve y puls tepkisi. Katsayılar matrisleri ilgili kesim içinde verilmiştir.....	103
Çizelge 4.6. Elektron zeeman teriminin etkisi altında dokuz işlemcinin zamana göre gelişim ifadeleri. İfadelerde verilen katsayılar matrisleri ilgili kesimde verilmiştir.....	110

- Çizelge 4.7.** Eksensel dipolar terimin etkisi altında dokuz işlemcinin zamana göre gelişim ifadeleri (ifadelerde verilen katsayılar matrisleri Çizelge 4.10'da verilmiştir)..... 111
- Çizelge 4.8.** Ekvatorial dipolar terimin etkisi altında dokuz işlemcinin zamana göre gelişim ifadeleri (ifadelerde verilen katsayılar matrisleri Çizelge 4.10'da verilmiştir)..... 112
- Çizelge 4.9.** Eksensel aşırı ince yapı etkisi altında dokuz işlemcinin zamana göre gelişim ifadeleri (ifadelerde verilen katsayılar matrisleri Çizelge 4.10'da verilmiştir)..... 113
- Çizelge 4.10.** Dipolar EPR Hamiltonieni altında spin işlemcilerinin zamana bağlı gelişim ifadelerindeki katsayılar matrisleri. Bu matrisler $S = 1$ ve $I = 1$ spin sistemi için oluşturulmuştur. 114

ŞEKİLLER LİSTESİ

Sayfa

- Şekil 2.1.** Bloch küresi (bir kübitin geometrik temsili) 14
- Şekil 2.2.** Bir endohedral fullerenin yapısı. Büyük yuvarlak kafes içine konulmuş bir atomu temsil etmektedir 19
- Şekil 2.3.** CNOT geçitinin bir devredeki gösterimi. \oplus işlemi mod 2'ye göre toplama işlemidir (klasik mantıkta kullanılan XOR geçitine karşılık gelmektedir) 26
- Şekil 2.4.** SWAP mantık geçitinin üç CNOT geçitiyle oluşumu ve spin değiş tokuşunu gösteren kuantum devresi 28
- Şekil 2.5.** Toffoli geçitinin devre şeklinde gösterimi..... 29
- Şekil 2.6.** Fredkin (CSWAP) geçitinin devre şeklinde gösterimi 30
- Şekil 2.7.** Yarı toplayıcı devre 31
- Şekil 2.8.** Bell durumlarının elde edilmesi için kuantum mantık devresi..... 31
- Şekil 2.9.** B_1 alanının uygulanma süresi t_p 'ye göre M_0 mıknatıslanma vektörünün durumu: *a*) $\theta = 0^\circ$ *b*) $\theta = 45^\circ$ *c*) $\theta = 90^\circ$ *d*) $\theta = 180^\circ$ 41
- Şekil 2.10.** Bir puls deneyinin aşamaları. *a*) Dış manyetik alan manyetizasyon vektörünü *z* eksenine doğrultusunda kutuplar *b*) Sistem kararlı haldeyken *x* eksenine etrafında döndüren bir 90° puls uygulanırsa manyetizasyon vektörü *y* eksenine üzerine yatar *c*) Manyetizasyonu oluşturan dipoller *x-y* düzleminde dağılmaya başlar (dekoherens) *d*) τ süresi kadar sonra dipoller tekrar *z* eksenine doğrultusunda toparlanmaya başlar (gelişme veya durulma süresi) *e*) Yeteri kadar bekledikten sonra manyetizasyon vektörü başlangıçtaki haline döner 42
- Şekil 2.11.** Üst şekil: Bir pulstan sonra elde edilen FID sinyali ve Fourier dönüşümü (sağda). Frekans uzayındaki spektrumda tek bir geçiş gözlenmektedir. Alttaki şekil: Bir pulstan sonra kaydedilen FID sinyalinin Fourier dönüşümü dört farklı frekansta geçiş olduğunu göstermektedir. Frekans uzayı spektrumları (sağda) EPR spektroskopisine uygun olarak birinci türev eğrisi olarak çizilmiştir 43
- Şekil 2.12.** EPR ve ENDOR enerji düzeyleri ve seçim kurallarına uygun geçişler. $H_0 = 0$ iken bütün düzeyler dejenere iken $H_0 > 0$ olduğunda düzeyler ayrışır. Bölgeler soldan başlayarak sırayla, dejenere bölge, elektron spininden dolayı yarılar, aşırı ince yapı yarılmadan dolayı yarılar ve çekirdek spininden dolayı düzeylerdeki kayma. Kesikli çizgiler, ikinci mertebeye kayma olmadan, yanındaki sürekli çizgiler ikinci mertebeye kaymayı temsil etmektedir (Weil ve diğ., 1993) 47
- Şekil 2.13.** Mims ENDOR puls dizileri 47
- Şekil 2.14.** Davies ENDOR puls dizileri 48
- Şekil 2.15.** Dipolar etkileşmenin temsili. Üzeri çizili etkileşmeler Hamiltoniende dikkate alınmamıştır 49
- Şekil 3.1.** Algoritma 4.2 için örnek puls dizisi 66

- Şekil 4.1.** Uygulama 1: Bir SİB sinyali. Bu SİB $\mathbf{S} = \mathbf{1}$, $\mathbf{I}_1 = \mathbf{1}$ ve $\mathbf{I}_2 = \mathbf{1}$ spin sisteminde alınmıştır, dolayısıyla SİB farklı frekans ve şiddette sönümlü sinüsel eğrilerin toplanmasıyla oluşmuştur. 90
- Şekil 4.2.** Uygulama 2: $\mathbf{S} = \mathbf{1}$ ve $\mathbf{I}_1 = \mathbf{0}$ ve $\mathbf{I}_2 = \mathbf{0}$ sistemi. $\theta = 30^\circ$ pulsu uygulandıktan ve peşinden $\tau = 10$ ns beklendikten sonra alınan SİB sinyalinin Fourier dönüşümü frekans uzayındaki spektrumu verir (spektrumda faz düzeltmesi yapılmamıştır, dolayısıyla soğurma veya dağılma spektrumu olmasının bu aşamada önemi yoktur). Spektrum dipolar etkileşmeden dolayı iki enerji düzeyine yarılmakta, dolayısıyla iki geçiş çizgisi oluşturmaktadır 91
- Şekil 4.3.** Uygulama 3: Seçici puls uygulamasıyla $\mathbf{S} = \mathbf{1}$, $\mathbf{I}_1 = \mathbf{0}$ ve $\mathbf{I}_2 = \mathbf{0}$ spin sisteminde geçişlerden birisi (bu uygulamada düşük frekanstaki geçiş) söndürülmüştür 91
- Şekil 4.4.** Uygulama 4: Tek bir puls ile ve seçici puls uygulanmaksızın $\mathbf{S} = \mathbf{1}$, $\mathbf{I}_1 = \mathbf{1}$ ve $\mathbf{I}_2 = \mathbf{0}$ spin sisteminin oluşturduğu geçişler. Spektrumda dipolar yarılmadan dolayı önce ikiye ve her bir dipolar geçiş çekirdek spininden dolayı üçe yarılmaktadır..... 91
- Şekil 4.5.** Uygulama 5: Tek bir puls ile ve seçici puls uygulanmaksızın $\mathbf{S} = \mathbf{1}$, $\mathbf{I}_1 = \mathbf{1}$ ve $\mathbf{I}_2 = \mathbf{1}$ spin sisteminin oluşturduğu geçişler. İki çekirdeğin aşırı ince yapı yarılmaları eşittir. Spektrumda dipolar yarılmadan dolayı önce ikiye ve her bir dipolar geçiş özdeş çekirdek spininden dolayı 1 : 2 : 3 : 2 : 1 şiddet dağılımını vermektedir..... 92
- Şekil 4.6.** Uygulama 6: Tek bir puls ile ve seçici puls uygulanmaksızın $\mathbf{S} = \mathbf{1}$, $\mathbf{I}_1 = \mathbf{1}$ ve $\mathbf{I}_2 = \mathbf{1}$ spin sisteminin oluşturduğu geçişler. İki çekirdeğin aşırı ince yapı yarılmaları farklıdır. Spektrumda dipolar yarılmadan dolayı önce ikiye ve her bir dipolar geçiş farklı çekirdek spininden dolayı eşit şiddette dokuz çizgi vermektedir 92
- Şekil 4.7.** Uygulama 7: Seçici puls uygulanarak $\mathbf{S} = \mathbf{1}$, $\mathbf{I}_1 = \mathbf{1}$ ve $\mathbf{I}_2 = \mathbf{1}$ spin sisteminde bazı geçişlerin söndürülmesine ve bazılarının da fazlarının terslenmesine örnek. İki çekirdeğin aşırı ince yapı yarılmaları eşittir..... 92

SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ

a	: Aşırı ince yapı etkileşme sabiti
\hat{A}	: Genel işlemci gösterimi
a_{sk}	: Verilen çarpım işlemcide bulunan spinler
B_0	: Dış manyetik alan
B_1	: Manyetik puls genliği
β	: Elektronun Bohr manyetonu
BCH	: Becker–Campbell–Housdorff (formülü)
β_N	: Çekirdek bohr manyetonu
B_S	: Baz fonksiyonu takımı
p_k	: Her bir k 'nci durumun bulunma olasılığı
CNOT	: Kontrollü NOT geçiti
D	: Eksensel dipolar etkileşme tensörü
ENDOR	: Elektron nükleer double rezonans
EPR	: Elektron paramanyetik rezonans
FID	: Free induction decay
g	: Elektronun g faktörü
g_N	: Çekirdek g faktörü
h	: Planck sabiti
\hbar	: $h/2\pi$
$\hat{\mathcal{H}}_{etk}$: Laboratuvar koordinat sisteminde etkin Hamiltonien
I	: Çekirdek spin işlemcisi
I_+	: Arttırıcı çekirdek spin işlemcisi
I_-	: Azaltıcı çekirdek spin işlemcisi
I_x	: Çekirdek spininin x yönünde işlemcisi
I_y	: Çekirdek spininin y yönünde işlemcisi
I_z	: Çekirdek spininin z yönünde işlemcisi
\mathcal{J}	: Yoğunluk matrisi teorisinde sinyal ortalama işlemi
K_0	: Hamiltoniende eksensel dipolar etkileşme teriminde işlemci
K'_0	: Hamiltoniende ekvatorial dipolar etkileşme teriminde işlemci
μ	: Manyetik dipol moment
M_I	: Çekirdek spininin manyetik moment kuantum değerleri
M_S	: Elektronun spini
m	: Elektronun kütlesi
M	: Mıknatıslanma
MW	: Mikrodalga
NMR	: Nükleer manyetik rezonans
$\hat{\rho}_0$: Yoğunluk matrisinin başlangıç durumu
$\rho(t)$: Zamana bağlı yoğunluk matrisi
Q_0	: Taban durumları
r	: Eşlenmemiş iki elektron spini arasındaki uzaklık
RF	: Radyofrekans pulsu

\hat{R}	: Dönme işlemcisi
S	: Elektron spin açısal momentum işlemcisi
S_+	: Arttırıcı spin işlemcisi
S_-	: Azaltıcı spin işlemcisi
SİB	: Serbest indüksiyon bozulması
SWAP	: Common gateway interface
S_x	: Elektron spininin x yönünde işlemcisi
S_y	: Elektron spininin y yönünde işlemcisi
S_z	: Elektron spininin z yönünde işlemcisi
T_1	: Spin-örgü durulma zamanı
T_2	: Spin-spin durulma zamanı
T_i	: Tekli enerji durumları ($i = 1, 0, -1$)
$T_I^{(k,q)}$: Wigner 3j sembolünde işlemcilerin herhangi bir I spini için tanımı
t_p	: Puls uygulama süresi
τ	: Puls bekleme süresi
W	: Wilmott tarafından önerilen iki farklı CNOT geçiti
\hat{W}	: \mathcal{H}/\hbar , frekans biriminde Hamiltonien
ω	: Açısal frekans
ω_α	: Dönme eksenini dışındaki (x veya y eksenini) etrafındaki frekans bileşeni
ω_L	: Laboratuvar sistemindeki açısal frekans
ω_p	: Pulsun frekans eşdeğeri
γ	: Jiromanyetik sabit
ξ	: Skaler katsayı
$\hat{\Omega}$: Hamiltonien işlemcisi

KUANTUM BİLGİ TEORİSİNDE DÖNME İŞLEMCİLERİ VE EPR TEKİNİNİN UYGULANABİLİRLİĞİ

ÖZET

Bu çalışmada EPR spektroskopisi ile gözlenebilen ve kutrit spin sistemlerine taban oluşturan biradikallerin Kuantum Bilgi İşleme için kullanılabilirliği ele alınmıştır.

Elektron spini biradikal oluşturabilmekte, toplam spin 1 olmakta ve triplet durumu ya da kutrit sistemi oluşturabilmektedir. Bunun yanında karbon nanotüpler ya da fullerenler üç ve daha fazla çiftlenmiş elektron sistemlerini mümkün kılacaktır. Dolayısıyla büyük spin sistemlerinin teorik temellerini oluşturmak gerekli görünmektedir. EPR spektroskopisi farklı spin sistemlerinde çalışabildiği için spin 1/2 dışındaki sistemler için kuantum mekanik dönme, bazı temel geçitler ile spin işlemcilerin oluşturulma gereği ortadadır.

Çalışmanın birinci kısmında spin 1, 3/2, 2, 5/2, 3 ve 7/2 sistemlerinin dönme işlemcileri elde edilmiştir. Biradikaller için SI ($S=1$, $I=0,1$) spin sisteminde toplam Hamiltonienin spin sistemlerinin matris temsilleri oluşturulmuştur.

$S = 1$ spin sisteminde her iki elektronun bağlı olduğu iki çekirdeğin spinlerinin $(I_1 = 0, I_2 = 0)$, $(I_1 = 1, I_2 = 0)$, $(I_1 = 1, I_2 = 1)$ durumlarında EPR geçişleri ve sınırlı sayıda puls dizilerinin etkileri, yoğunluk matrisi teorisi kullanılarak mantık geçit örnekleri yazılan bir program yardımıyla hesaplanmıştır.

Çalışmanın son kısmında çarpım işlemci teorisi ile kutrit sistem için ($S = 1$ ve $I=1$) dokuz spin işlemcisinin biradikal Hamiltonieni terimlerinin etkisi altındaki matris temsilleri, Becker–Campbell–Housdorff (BCH) formülünün değerlendirilmesiyle elde edilmiştir.

Anahtar Kelimeler: Biradikal; EPR; Kutrit; Kuantum Hesaplama.

ROTATION OPERATORS IN QUANTUM INFORMATION THEORY AND APPLICABILITY OF EPR TECHNIQUE

ABSTRACT

Biradicals or radical pairs which are physically important but rarely worked structures and can be investigated by EPR technique as a basis for qutrit spin systems in quantum information theory.

Biradicals can be found in some chemical structures having a total spin of 1, which forms triplet state and a qutrit system in quantum information theory. Moreover carbon nanotubes and fullerenes are also promising as other spin systems with three or more unpaired electrons and therefore the theoretical basis for qutrit and higher spin systems will probably become necessary in near future. EPR spectroscopy deals with all spin systems. Therefore the basic rotation operators, gates and spin operators are needed to be established.

In the first part the rotation matrices of spin 1, 3/2, 2, 5/2, 3 and 7/2 systems are worked out.

The EPR transitions with limited number of sample pulse trains for spin states are calculated for $(S = 1, I_1 = 0, I_2 = 0)$, $(S = 1, I_1 = 1, I_2 = 0)$, $(S = 1, I_1 = 1, I_2 = 1)$ spin systems using density matrix formalism.

In the last part of the work, the nine spin operators of SI ($S = 1, I = 1$) spin systems under the effects of biradical spin Hamiltonian are formed using Becker–Campbell–Housdorff formula.

Key Words: Biradical; EPR; Qutrit; Quantum Information.

1. GİRİŞ

Bilgisayar teknolojisindeki olağanüstü gelişmelerin sonucunda bilgisayarların işlem kapasiteleri her yıl iki katına çıkarken fiziksel olarak da küçülmektedirler (Moore yasası). Günümüzde kullanılmakta olan klasik işlemciler ve diğer sayısal tümleşik elektronik devreler artık mikron altı boyutlarda tasarlanıp üretilebilmektedir. "Klasik Hesaplama" kuramı ilk olarak 1936 yılında ünlü matematikçi Alan Turing tarafından ifade edilmiştir (Turing, 1937). 1940'lı yıllarda matematikçi olan John von Neumann Turing Makinesini daha etraflı çalışmıştır. Günümüzdeki bilgisayarlar klasik mantık devrelerini kullanmaktadır.

1900'lü yılların başlarında bilim adamları siyah cisim ışıması, fotoelektrik, hidrojenin spektrumu gibi bazı deneyleri klasik fizik kurallarıyla açıklayamadılar. O dönem için anlaşılamayan olayları açıklama arayışları kuantum mekaniğinin temellerini oluşturmuştur. Kuantum teorisi 1900 yılında Max Planck'ın siyah cisim ışımasını açıklamak için ortaya koyduğu enerjinin kuantumlu olmasının gerektiği düşüncesi kısa zamanda kabul görmüş ve Niels Bohr, Albert Einstein, Louis deBroglie, Max Born, Ernest Heisenberg, Wolfgang Pauli, Poul Dirac gibi meşhur fizikçilerin inanılmaz çalışmalarıyla çeyrek yüzyıl içinde yeni ve kuvvetli bir disiplin olarak ortaya konulmuştur. Kuantum teorisinin doğal bir sonucu olarak zaman içinde yeni teknolojik uygulamalarda ortaya çıkmıştır. Bunlardan belki de uygulamada en etkili olanı yarıiletken teknolojisidir.

Klasik bilgi işlem uygulamaları başta silisyum olmak üzere, yarıiletken maddelerden yapılan mikroişlemci teknolojisine dayanmaktadır. Kuantum bilgi işleme teknolojisi, bu teknolojinin dar bir silikon yüzeyine daha fazla sayıda bit sığdırabilme ihtimalinin ortadan kalkmasını ve yeni mikroişlemcilerin öncekilerin çalışma hızını katlayamama endişesini bir yana iterek tümüyle yeni hesaplama yöntemlerini desteklemesi bu alanda sonu belirlenemeyen bir ufuk açmaktadır. Yeni algoritmalar yazabilmemize olanak sağlayan bu hesaplama paradigması tek atom veya elektron gibi taneciklerin davranış ilkelerinden yararlanmaktadır.

Yarı iletken teknolojisindeki hızlı gelişmeler birim hücredeki transistör sayısını artırarak bilgisayarların hesaplama kapasitelerini yükseltmiştir. İlk kişisel bilgisayar

1970'li yıllarda ortaya çıkmış ve günümüze kadar hızla gelişmiştir. Öte yanda günümüzde nanoteknoloji üzerine yapılan çalışmaların bir ürünü olarak nano ölçekli bilgisayar işlemcileri tasarlanmıştır fakat gerçekleştirilmesi için zaman ve daha fazla çalışma gerekmektedir. Güçlü ve hızlı işlem yapabilmek için çok sayıda bilgisayarın birbirine bağlandığı paralel hesaplama yapabilen bilgisayar kümeleri diğer bir deyişle süper bilgisayarlar geliştirilmişse de, bir kuantum bilgisayarın öngörülen işlem gücü ve hızı ile kıyaslandığında bilgi işleme yine de çok yavaş kalmaktadır. Yirminci asrın ünlü fizikçilerinden Richard Feynman, 1980'lerin başında, kuantum mekanik sistemlerin bilgisayar ile simülasyonunun çok fazla zaman, işlem ve bellek ihtiyacı doğurduğuna işaret etti (Feynman ve diğ., 2000). Üstelik bu ihtiyaç kuantum mekanik değişkenlerinin sayısı ile üstel oranda artmaktaydı. Bilgisayarların hesaplama kapasitelerindeki olağanüstü genişlemeye yol açan olasılıklara ışık tutan da işte bu tespit oldu.

Her ne kadar fikir Feynman'dan çıkmışsa da kuantum hesaplama veya kuantum bilişiminin resmi miladı Benioff'un 1980 yılında yayınladığı makale olarak kabul edilmektedir (Benioff, 1980). Bu makalesinde Benioff kuantum sistemlere uygulanan birimsel (üniter) dönüşümlerin mantık geçitleri olabileceğini göstermiştir. Aslında gerçek başlangıç, IBM laboratuvarında çalışan fizikçi Bennett'in 1973 yılında kuantum sistemlerle oluşturulacak mantık geçitlerinin *tersinir* olduğunu ortaya koymasıyla gerçekleşmiştir; ancak Bennett'in bu makalesi o zaman fazla dikkat çekmemiştir (Bennett, 1973).

Kuantum hesaplama alanında bundan sonra gelişme hızlanarak sürmüştür. Atılan adımların önemli olanları kısaca şunlardır: Deutsch, Benioff ve Bennett'in tespitlerinden yola çıkarak 1980'lerin sonunda karmaşık matematiksel hesapların belirli bir düzenek tarafından yapılmasını sağlayan Kuantum Turing makinesini tasarladı (Deutsch, 1985). Bunun peşinden Peter Shor büyük sayıların çarpanlarına ayrılması işlemini oldukça az sayıda yapan Shor algoritmasını oluşturdu (Shor, 1994). Bu gelişmenin hemen peşinden Lov Grover kuantum arama algoritmasını oluşturdu (Grover, 1997). Bu algoritma ile bir bilgi kümesi içinde arama yapmak klasik yöntemlere göre eleman sayısının karesi kadar hızlanabilmektedir.

Bu gelişmelerin doğal bir sonucu olarak Einstein, Podolsky ve Rosen tarafından 1935 yılında yayınlanan tarihi makalede ortaya atılan ve bilim adamlarının isimlerinin baş harfleriyle anılan EPR paradoksunun uygulaması gündeme gelmiştir (Einstein ve diğ., 1935). Bu çalışma ile ortaya atılan "konumdan bağımsızlık" veya

“yersizlik” ya da “uzaktan gizli etkileşme” olarak çevrilebilecek olan “non–lokalite”, tamamen kuantum mekanik kavramlarla açıklanabilen veya bir paradoks olarak görünen olaylar gündem oluşturmuş ve 1964 yılında John Bell tarafından ortaya atılan ve kuantum non–lokalite kavramının istatistik bir testi olan Bell Eşitsizliği tartışmasını başlatmıştır (Bell, 1964). Aynı zamanda “dolanıklık (entanglement)” ve “kuantum teleportasyon” tartışmalarıyla uygulamalar da gündeme dahil olmuş ve çok sayıda dolanıklık kuantum hesaplama ve kuantum iletişim uygulamalarının temelini oluşturmuştur. Bunlara aşırı yoğun kodlama, kuantum hata düzeltme kodlaması, kuantum kriptografi, kuantum teleportasyon uygulamalarının gerçekleştirilmesi tartışmaları ve çalışmaları eşlik etmiştir (Ramanathan ve diğ., 2004). Bu çalışmalardan özellikle kuantum teleportasyon üzerinde Bouwmeester ve çalışma arkadaşları tarafından 1997 yılında fotonlar kullanılarak, 1998 yılında Nielsen ve çalışma arkadaşları tarafından NMR spektroskopisi kullanılarak ve 2004 yılında Riebe ve çalışma arkadaşları tarafından iyon tuzaklama kullanılarak yapılan çalışmalar yayınlanmıştır (Bouwmeester ve diğ., 1997; Nielsen ve diğ., 1998; Barrett ve diğ., 2004). Bu çalışmalara göre pulslu NMR tekniği, kuantum hesaplamada ve temel kuantum mantık geçitlerinin fiziksel gerçekleştirilmesinde milat sayılmaktadır. Bu konudaki gelişmeler Literatür Araştırması kesiminde daha geniş biçimde ele alınacaktır.

İlk defa Richard Feynman’ın ortaya attığı kuantum mekaniksel temelleri kullanan kuantum hesaplama düşüncesi, bilim çevresinde oldukça rağbet kazanmış ve bu alandaki araştırmalar artmıştır. Bilim adamları, gelişmelerin ışığında artık bir atom veya atom gurubunun etkileşimi esasına dayalı mantık kapılarından oluşan yeni nesil işlemciler tasarlanabileceğini öngörebilmektedirler (Feynman, 1986, 2000).

Bu gelişmelerin yanında Moore yasasının öngördüğü birim alandaki transistör sayısındaki artışın 2020’li yıllarda limite ulaşarak duracağı gerçeği ve Richard Feynman’ın evrensel bilgisayar fikri, bilim adamlarını başka arayışlara yönlendirmiştir.

Atomik düzeyde maddeler kuantum mekaniği yasaları ile açıklanan esaslara göre etkileşirler. Bu yasalar, klasik bilgisayarların kullandığı temel mantık geçitlerinin çalışma prensiplerini belirleyen yasalardan oldukça farklıdır. O nedenle, gelecekte öngörülen atomik boyuttaki mantık geçitleri için, klasik mantık geçitleri yerine kuantum teknolojisi ile yeni ve kuantum mekanik yasalara uygun geçitler tasarlanmalıdır. Teorideki gelişmelerin aksine kuantum mantık geçitlerinin fiziksel

uygulamaları başlangıç düzeyinde oluşturulmuş olmasına rağmen, yeni ve farklı teknikler ve araçlar için arayışlar sürmektedir.

Çeşitli spektroskopi yöntemleri, fotonik uygulamaları, tuzaklanmış iyonlar ve yarı iletken teknolojileri kullanılarak bazı kuantum bilgi işleme teknikleri geliştirilmiş ve bir ölçüde uygulanmaktadır. Bu tez çalışması fiziksel kuantum bilgi işleme tekniği arayışlarının uzantısı olarak Elektron Paramanyetik Rezonans (EPR) spektroskopisinin uygulamalarından olan ve kutrit sistemleri de oluşturan biradikalleri ele almaktadır.

Kuantum bilgisayarlarının insan hayatına girmesi bilgi işleme biliminde bir devrim oluşturacak ve bu da pek çok bilimsel konudaki gelişmeleri kuvvetlendirecek ve hızlandıracaktır.

1.1 Tezin Amacı

Kuantum Mekaniği 20. yüzyılın başlarında klasik mekaniğin yetersiz kaldığı durumları açıklayabilmek için zorunlu olarak ortaya çıkmıştır. Bunu teknolojik uygulamalar izlemiş ve hızla gelişmiştir. Örneğin tek bir atom içinde hızlar çok büyük olduğundan klasik teori, atomların içindeki olayları açıklayamamaktadır. Atomik ve moleküler ölçekteki yapıların anlaşılması ancak kuantum mekaniği ile mümkün olmuştur.

Bilgi işleme teorisinin uygulamasıyla ilgili olması nedeniyle konumuzu ilgilendiren yarı iletken teknolojisinde, örneğin transistörün keşfi ile boyutlar oldukça küçülmesine rağmen atomik boyutlara inememiştir ve inmesi de beklenmemektedir. Bunun yerine kuantum mekaniğinin ilkelerine göre çalışan ve atomik ölçekte ve hızda yapıları kullanan kuantum bilgisayar fikri ortaya çıkmıştır. Bu fikrin öncülerinden biri, hatta ilk ortaya atan isim Fizikçi Richard Feynman olmuştur. Bir fizikçi olması nedeniyle kendi çalışmalarını ilgilendirmesi bakımından klasik bilgisayarlar ile kuantum mekaniksel sistemlerin iyi modellenemeyeceğini tespit ve ifade etmiştir (Feynman, 1986, 2000). Böylece kuantum bilgi teorisinin temelleri atılmış ve kuantum bilgi işleme mantığının temelleri olan kuantum mantık kapıları oluşturulmaya başlanmıştır.

Kuantum bilgisayarlar ile günümüzde kullanılan klasik bilgisayarlar arasında oldukça farklı bir çalışma mantığı vardır. Klasik hesaplama ve klasik bilginin temel birimi “bit” iken, Kuantum bilgisayarların temel bilgi birimi olarak kübit (**ku**antum

bit ya da **qubit** – **quantum bit**) tanımlanmıştır. Klasik bilginin bölünmez birimi olan bit, iki mümkün durum olan $\{0, 1\}$ 'den sadece birini, yani herhangi bir anda ya sadece 0 veya sadece 1 değerini alabilirken kubitler bu iki durumun lineer kombinasyonu olarak, yani mümkün bütün durumlarda belirli olasılıklarla bulunabilmektedir.

Kuantum bilgi işleme çeşitli fiziksel teknikler kullanılarak gerçekleştirilebilmektedir. Manyetik rezonans spektroskopileri (Pulsu NMR, ENDOR, EPR) puls dizileri ile spektrum manipülasyonu kolay olduğundan bu tekniklerden en fazla kullanılan olarak bilinmektedir. Özellikle pulsu NMR ve ENDOR tekniği oldukça gelişmiş bir teknik olması nedeniyle temel kuantum mantık geçitlerinin fiziksel gerçekleştirilmesinde bir hayli mesafe almıştır (Jones, 2001; Ramanathan ve diğ., 2004; Rule ve Hichens, 2006; Oliviera ve diğ., 2007). Bunun yanında ışık polarizasyonu, tuzaklanmış iyonlar gibi teknikler de kullanılmaktadır.

Bu alanda, bu çalışmanın yapıldığı tarih itibarıyla pulsu NMR kadar olmasa bile dikkat çekici çalışmaların önerildiği ve gerçekleşme ihtimali yüksek olan elektron spin sistemleri ve dolayısıyla bu alanda en güçlü spektroskopi tekniği olan Elektron Paramanyetik Rezonans (EPR) Spektroskopisinin kullanılabilirliği, biradikal yapısı üzerinden tartışılacaktır. NMR spektroskopisini içeren ENDOR dahil olmak üzere EPR spektroskopisi oldukça geniş uygulaması olan bir tekniktir. Pulsu NMR tekniğinin başarıları göz önüne alınarak farklı spin sistemlerinde EPR spektroskopisinin de kuantum bilgi teorisinin gerçekleştirilmesinde başarılı sonuçlar vereceği beklenebilir (Schweiger ve Jeschke, 2001; Malinovski ve Rudin, 2012). Bu alanda farklı safsızlıklar içeren nanotüpler ve fullerenler üzerinden umut verici sonuçlar alınmaktadır.

Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı bünyesinde NMR spektroskopisi ile gerçekleştirilen yüksek lisans ve doktora tezleri yapılmış, özgün bilgiler ortaya konulan bu tezler kitap olarak da yayınlanmıştır (Şaka, 2007; Gün, 2011; Türkpençe, 2013). Biradikallerin kuantum bilgi teorisinde kullanımı üzerinde ise çok az sayıda çalışma yapılmıştır (Nakazawa ve diğ., 2012). Bu çalışmada pulsu EPR tekniği ile ayrıntılı yapısı gözlenebilen ve önemli yapılardan birisi olan biradikallerin Kuantum Bilgi İşleme için kullanılabilirliği ele alınacaktır.

Biradikallerde, Genel Bilgiler Bölümünde de görüleceği üzere iki elektron spini eşlenerek $S = 1$ durumunu oluşturur. Bu spin durumu kutrit sistemler için baz oluşturur. Kutrit sistemler için de, ayrıca kuantum bilgi teorisi açısından çok az

çalışma yapılmıştır. Bu çalışmada biradikaller üzerinden kutrit sistemlerde gerekli olabilecek bazı kuantum mantık geçitleri ile spin sistemlerinin fonksiyonlarının ve etkilerinin bir kısmı irdelenecektir.

Kutrit sistemler için üçlü dönme işlemcisinin ifadesi kaynaklarda bulunamamıştır. Bu dönme işlemcisini oluşturmak için kullanılan matematik yöntem ile daha büyük spin sistemlerinin dönme işlemcileri de oluşturulacaktır.

Kutrit sistemlerde kullanılacak temel geçitlerin bir çoğu kaynaklarda eksiktir. Bu çalışmada temel geçitlerden bazıları ele alınacaktır.

Kutrit sistemlerin temel spin işlemcilerinin sayısı dokuzdur. Ancak bu spin ile etkileşen başka spinler, özellikle de spin 1 sistemler dikkate alındığında bu dokuz işlemci ile çok sayıda işlem yapılabilmektedir. Örneğin, eğer biradikalin oluşturduğu bir spin 1 sistem, spini 1 olan bir çekirdek ile etkileşiyorsa işleme esas olan matrislerin boyutları 9, eğer benzer ikinci bir çekirdek spini ile etkileşiyorsa boyut 27 olacak, çekirdek sayısı artarsa da bu sayı geometrik olarak büyüyecektir. Bu çalışmada biradikal ile boyut uyuşması bakımından ele alınan tek bir spin 1 çekirdek dikkate alınarak temel dokuz spin işlemcisinin biradikal Hamiltonieninin terimlerinin etkisi altındaki davranışları incelenecektir.

1.2 LiteratürAraştırması

Elektronik bilgi işleme teknolojisi 1946 yılında inşa edilerek çalıştırılan ENIAC I isimli devasa bilgisayar ya da hesaplayıcı ile başlamıştır. Mantık geçitlerinin elektron tüpü kullanılarak yapıldığı bu ilk bilgisayardan sonra 1960'lı yıllarda ortaya çıkan transistörler tüplerin yerini almış ve daha kapasiteli, hâlâ büyük boyutta, fakat daha az enerji harcayan bilgisayarlar yapılmıştır. Bunun peşinden 1970'li yılların ortalarından itibaren tümleşik devreler transistörlü devrelerin yerini almış, böylece hem işlem hızı, hem işlem kapasitesi artmış, buna karşın fiyatı ve enerji tüketimi büyük oranda azaldığı için artık evlere girebilen masaüstü bilgisayarlar dönemi başlamıştır. Bu gelişme sayesinde ki aynı teknoloji ile günümüzde ENIAC I ile kıyaslanamayacak kadar güçlü fakat küçük boyutlu (akıllı taşınabilir telefonlar gibi) bilgisayarlar yapılmaktadır.

Klasik mantık geçitlerini kullanan bu bilgisayarlar oldukça düşük güç, dolayısıyla nanoamper mertebesinde akım kullanmaktadır. Bunun anlamı, bu bilgi işleme teknolojisinin mantık geçitlerinin hâlâ çok sayıda elektron kullandığıdır (1 nA

demek bir saniyede bir devreden yaklaşık olarak 10^{10} tane elektronun geçtiğidir ki kuantum mekanik ölçülere göre bu sayı çok çok büyüktür). Çok sayıda elektron demek akım demektir, akım demek işlem hızının sınırlı olması demektir. Halbuki kuantum bilgi işlemede bir mantık geçiti için kullanılan elektron sayısı, sayılabilir miktarda, yani birkaç tane olacaktır ya da sistem sayılabilir miktarda elektron üzerine oturacaktır.

Kuantum mekaniği temel alan bilgi işleme fikri öncülerinden Richard Feynman, klasik bilgisayarlar ile kuantum mekaniksel sistemlerin, örneğin basit bir molekülün bile iyi modellenemeyeceğini belirtmiştir (Feynman, 1986, 2000). Bunun üzerine kuantum bilgi teorisinin temelleri atılmış, henüz on yıl geçmeden kuantum bilgi işleme için gerekli olan kuantum mantık kapıları oluşturulmaya başlanmıştır. Böylece kuantum mekaniksel sistemlere bilgi yükleme ve kodlama süreçlerini kapsayan ve son on yıldır adından söz ettirmeyi başaran “Kuantum Bilgi Teorisinin” klasik iletişim araçlarıyla yapılması *imkansız* olarak görülen birçok olayı artık mümkün hale getirmesi, kuvvetli bir beklenti oluşturmuştur (Türkpençe, 2007). Diğer taraftan, son on yıl içinde kaydedilen nanoteknolojideki gelişmeler, bu alanda umut verici görünmektedir. Her ne kadar isimler “mantık geçiti” olsa da, kuantum mantık geçitleri mantıksal devre tasarımında bulunan klasik geçitlerden oldukça farklıdır.

Klasik mantık geçitlerinin hepsi temelde VE (AND), VEYA (OR) ve DEĞİL (NOT) geçitlerinin farklı kombinasyonlarından oluşmaktadır ve iki düzeyli {0 ve 1} durumdan oluşur. Kuantum mantık geçitlerinden olan örneğin Hadamard, CNOT, SWAP gibi geçitlerin klasik karşılıkları yoktur. Örneğin Hadamard geçiti, uygulandığı salt durumu başka durumlarla süperpozisyon durumuna getirir (Bellac, 2006; McMahan, 2008; Nakahara ve Ohmi, 2008). Diğer kuantum mantık geçitlerinin fonksiyonları Bölüm 2’de ele alınmıştır.

Kuantum geçitlerinin önemli bir özelliği olan *tersinirlik* (reversibility) klasik geçitlerde yoktur. Yani kuantum bilgi işleme tekniğinde bir işlem geri alınabilmektedir fakat klasik mantık geçitlerinde bir işlem sadece tek yönlüdür. Bu özellik kuantum mekaniğin dayandığı temel işlemlerden birisi olan “benzerlik dönüşümü” işleminden kaynaklanmaktadır (Ramanathan ve diğ., 2004; Boas, 2006; Arfken ve diğ., 2013).

Feynman’a göre bir kuantum sisteminin dinamiklerinin bir klasik bilgisayar tarafından taklit edilmesi üstel olarak artan bir hesaplama kapasitesi gerektirmektedir

(Feynman, 2000). Bilim adamları 1990 yıllarından bu yana kuantum bilgisayarlarında uygulanabilecek temel algoritmaları geliştirmeye başlamışlardır. Bilgilerin bitler yerine kubitlerde (veya kutritlerde) saklandığı ve kuantum mekaniğinin geçerli olduğu bu ortamda kuantum algoritmaları, işlem yaparken kuantum bitlerinin süperpozisyon özelliğini kullanmaktadır. Günümüze kadar geliştirilmiş algoritmalarından en ünlüleri Deutsch, Shor ve Grover algoritmalarıdır (Bellac, 2006; McMahan, 2008; Nakahara ve Ohmi, 2008).

Kuantum bilgi teorisinin ortaya çıkmasıyla birlikte teorinin nasıl uygulanabileceği ve nasıl bir fiziksel sistem üzerinde bilgi işleme süreçlerinin modellenebileceği veya gerçekleştirilebileceği tartışılmaya başlanmıştır. Modelleme için kullanılacak fiziksel sistemlerden en uygun olanların başında ESR, NMR ve ENDOR gibi yöntemler gelmektedir.

Pulsu NMR spektroskopik tekniklerinin kuantum bilgi işleme süreçlerinde kullanışlı olabileceği ilk kez Neil A. Gershenfeld ve Isaac L. Chuang tarafından gösterilmiştir (Gershenfeld ve Chuang, 1997). Daha sonra ise Shor'un çarpanlara ayırma algoritması ilk kez sıvı NMR kullanılarak uygulanmış ve başarılı sonuçlar elde edilmiştir (Çakmak, 2011). Spini 1/2 olan üç çekirdekli bir kuantum sisteminde puls NMR ile şarta bağlı faz işlemcileri kullanılarak Grover algoritmasının ilk basamağında kullanılan süperpozisyon durumunu elde etmek için üç kubitlik Hadamard kapısı elde edilmiştir. Bu güne kadar sıvı ve katı NMR kullanılarak daha birçok kuantum algoritması ve bilgi işleme süreçlerinin simülasyonu yapılmıştır. Kuantum bilgisayarlarındaki işlemlerin gerçekleşmesinin önündeki en önemli engel uygulamadaki zorluklardır. Puls programlı NMR spektroskopisinin kullandığı zengin ve neredeyse sınırsız sayıda teknikler bu anlamda umut vermektedir. NMR kuantum bilgisayarlarındaki ilk uygulama Deutsch algoritmasının iki kubitte temsil edilebilecek sitozin molekülüne, daha sonra kloroforma yapılırken aynı moleküllere Grover'in arama algoritması uygulanmıştır (Gruska, 1999).

Pratik olarak çalışabilir bir kuantum bilgisayarın sahip olması gereken kriterlerden ilk bahseden diVincenzo olmuştur (diVincenzo, 2000). diVincenzo'ya göre bu kriterlerden biri evrensel bir kuantum mekaniksel mantık kapısı takımıdır. Kuantum bilgisayar literatüründe var olan en basit mantık kapısı NOT kapısı olup tek kubitlik bir kapıdır. Geliştirilen mantık kapıları 2, 3 veya daha fazla kubitte oluşmuş olabilir. Çok kubitli mantık kapılarında kubitlerin birinin durumu diğer kubitin durumunu belirliyorsa böyle mantık kapılarına kontrollü mantık kapıları denilir.

Evrensel mantık kapılarının belli sıralarla ard arda belli kurallara göre uygulanması sonucu farklı mantık kapıları elde edilebilir. İki kübitin durumlarını deęiş tokuş eden ve CNOT kapılarının arda arda uygulanmasıyla oluşan SWAP mantık kapısı buna örnek olabilir (Bellac, 2006; McMahon, 2008; Nakahara ve Ohmi, 2008).

Pulslu NMR spektroskopisinin kuantum hesaplamada kullanılması üzerine son yıllarda çok sayıda çalışma yapılmış ve yayınlanmıştır. Bu çalışmalar özlü olarak hacimli kitaplarda toplanmıştır ve gerekli bilgiler ile çok sayıda farklı kaynağa bu kitaplardan erişilebilir (Rule ve Hichens, 2006; Oliviera ve dię., 2007). Ayrıca bu alanda Ondokuz Mayıs Üniversitesinde de bazı çalışmalar yapılmış, tez ve makale olarak da yayınlanmıştır (Şaka, 2007; Gün, 2011; Türkpençe, 2013).

Puls tekniğinin NMR spektroskopisinde kullanılmasının yaygınlığı ve bu alandaki gelişmeler doğal olarak kuantum hesaplamasının gerçekleştirilebileceği fiziksel sistemler olarak öne çıkmıştır ve bu alanda oldukça fazla çalışma yapılmıştır. Mikrodalga frekansını kullanan EPR spektroskopisinin puls tekniği tarihi açıdan gecikmeli olarak da olsa kullanılmaya başlanmıştır. Ancak bu, EPR spektroskopisinin kuantum hesaplamada kullanılamayacağı anlamına gelmez. Uygun paramanyetik yapılar kullanılarak kuantum hesaplamasının bu teknikle gerçekleştirilebileceği veya modellenebileceği son yıllarda bazı özel yapılarda gösterilmiştir. Endohedral fullerenler bu yapıların başında gelmektedir. ENDOR tekniği ile bu alanda umut verici çalışmalar son yıllarda yayınlanmaya başlamıştır.

Puls ve Fourier dönüşüm tekniği uygulanabilirliği nedeniyle öncelikle NMR spektroskopisinde başlamış ve başlangıçtaki durum ile kıyaslanamayacak ölçüde yol almıştır. Bunun bir uygulaması da kuantum bilgi işlemede yapılmaktadır. Pulslu NMR spektroskopik teknikleri ile birçok kuantum geçitleri oluşturulmuştur (Cory ve dię., 1997; Rule ve Hichens, 2006; Oliviera ve dię., 2007).

EPR spektroskopisi teknik olarak NMR ile aynıdır. Farklı olan yönlerinin başında çalışma frekansları gelmektedir. NMR radyo frekans bölgesinde çalışırken EPR mikrodalga bölgesinde çalışır. Doğal olarak Hamiltonienleri de farklıdır. Daha önemli bir fark, NMR spektroskopisinde farklı çekirdekler için birbirinden farklı frekanslar ve dolayısıyla farklı detektörler kullanılırken EPR spektroskopisinde spini sıfırdan farklı bütün çekirdekler farklı bir işlem yapmadan gözlenebilir. Bu durum EPR spektroskopisinin bir üstün özelliğidir. Bu özelliği puls tekniği ile birleştirildiğinde kuantum bilgi işleminin modellenmesi için güçlü bir sistem ortaya çıkabilir. Ancak bu konu, içinde bulunduğumuz zaman kesiminde henüz oldukça

yenidir. Pulsu EPR kullanılarak yapılan bir çalışma için Ayabe ve diğ. (2013) tarafından yayınlanan bir çalışma incelenebilir.

Eşlenmemiş elektronun bulunduğu kimyasal radikaller, geçiş metal iyon kompleksleri, lantanit grubu iyon kompleksleri, yapı kusurlarında tuzaklanmış elektron veya iyonik radikaller, spin etiketleri gibi çok sayıda yapı EPR spektroskopisi ile incelenebilir. Her birisinin kuantum hesaplama işleminde model olma potansiyeli bulunmaktadır. Bu çalışmada birbirine komşu olup etkileşen iki eşlenmemiş elektronun oluşturduğu biradikaller kullanılarak kuantum bilgi sistemi modellenmesi yapılması planlanmaktadır. Bu alanda başlangıç düzeyinde de olsa bazı çalışmalar yayınlanmıştır (Nakazawa ve diğ., 2012; Ayabe ve diğ., 2013). Modellemede ele alınacak biradikallerin kararlı olmaları önemli bir özelliktir. Örneğin gama radyasyonuna tutulan $K_2S_2O_8$ ve $(NH_4)_2S_2O_8$ kristalleri içinde gözlenen SO_4-SO_4 biradikalinde eşlenmemiş her iki elektron da özdeş yapıda grup içindedir ve çekirdeklerin spinleri sıfırdır (Tapramaz, 1991). Benzer bir biradikal oksijen boşluk kusurları içeren α -kuvartz içinde gözlenmiştir (Maskhovtsev ve Pan, 2011). Bir başka örnekte eşlenmemiş her iki elektron da spini 1 olan ^{14}N ile etkileşmektedir (Nakazawa ve diğ., 2012). Benzer başka ^{14}N merkezli biradikal yapılar Kirk ve Shultz (2013) ve Fatila ve diğ. (2013) tarafından rapor edilmiştir. $Cu^{2+}-Cu^{2+}$ yapısında biradikaller (spin 3/2 çekirdek) silisyum yaprak üzerinde oluşturulan ince bakır film içinde gözlenmiştir (Kim ve diğ., 2003). Hatta elektron spini 5/2 olan iki Mn^{2+} iyonunun CaO ve MgO örgüleri içinde oluşturduğu radikal çiftleri bile rapor edilmiştir (Harris, 1971). Bu yapıların hepsi EPR spektroskopisinin konusudur ve kuantum bilgi teorisinin gerçekleştirilmesi için bir potansiyel modeldirler.

Kuantum mekanikte ve özellikle de pulslu manyetik rezonans spektroskopilerinde spin dönme işlemcileri gerekli işlemlerin başında gelmektedir. Bu konuda literatürde yaygın olarak sadece spin 1/2 sistemler ya da kuantum bilgi teorisinde kubitlerle oluşan sistemlerde sadece spin 1/2 için dönme işlemcileri olan $\hat{R}_x(\theta)$, $\hat{R}_y(\theta)$ ve $\hat{R}_z(\theta)$ verilmektedir. Diğer spin sistemleri için spin 1 ve spin 3/2 dönme işlemcilerinden sadece $\hat{R}_y(\theta)$ Wigner formülü kullanılarak ve grup teorisi bağlamında verilmektedir (Morrison ve Parker, 1987; Takahiro ve diğ., 2007); diğer bileşenler bulunamamıştır ya da pulslu sistemlerde doğrudan kullanılacak özellikte

değildir. Bu çalışmada spin $1/2$ yanında spin 1, $3/2$, 2, $5/2$, 3 ve $7/2$ sistemlerin dönme işlemcileri sayısal yöntemlerle bulunarak verilmiştir.

Son yıllarda gelişen nanoteknoloji ürünü olan endohedral fullerenler, yapıdaki karbonlardan bir veya birkaçının farklı atomlarla değiştirilebilmesi, örgü içinde atom veya atom grubunun tuzaklanabilmesi özellikle bu alanda umut verici görünmektedir. Çünkü fullerenlerle tek radikal, biradikal, triradikal yapma ihtimali vardır ve yapı oldukça kararlıdır. Bu yapıların kullanılmasına bir örnek olarak W. Harneit'in fullerenlerin içerisine yerleştirilen bir atomun elektron ve çekirdek spin durumlarının ENDOR teknikleriyle kontrol edilerek çalışan bir kuantum bilgisayar modeli yapılabileceği üzerindeki çalışması gösterilebilir (Çakmak, 2011). Bunun peşinden endohedral fullerenler kullanılarak bazı iki kübitlik kuantum mantık kapıları oluşturulmaya başlanmıştır (Ju ve diğ., 2007).

2. GENEL BİLGİLER

2.1 Kuantum Bilgi Teorisi

2.1.1 Kübit (kuantum bit)

Klasik mantık geçitlerinin hepsi temel geçitler olan VE (AND), VEYA (OR) ve DEĞİL (NOT) geçitlerinin çeşitli kombinasyonlarından oluşturulur. Bu geçitlerin doğruluk çizelgesi aşağıda verilmiştir:

Çizelge 2.1. Klasik mantık geçitlerinin doğruluk çizelgesi

GİRİŞLER		ÇIKIŞLAR			
A	B	VE	VEYA	VE DEĞİL	VEYA DEĞİL
0	0	0	0	1	1
0	1	0	1	1	0
1	0	0	1	1	0
1	1	1	1	0	0

Doğruluk çizelgesinden görüleceği gibi her bir A ve B giriş durumu için her bir çıkışın sadece bir durumu vardır: 0 veya 1.

Kuantum bilgi ve hesaplamada ise bilgi birimi, iki durumlu sistemlerde **kuantum bit** veya kısa olarak **kübit** olarak adlandırılır. Kübit, kuantum hesaplamannın ve kuantum bilgisayarın temel birimidir. Bir kuantum bilgi işleme sistemi klasik geçitlerin aksine kübitlerden oluşan durumların hepsinde belirli oranlarda bulunabilir.

Bir kübitlik bir sistemde $|0\rangle$ ve $|1\rangle$ durumları baz durumlarıdır. En basit yapı olan bu baz durumları tek tek var olmazlar; aynı anda her ikisi de belirli oranlarda vardır. Bu özellik,

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

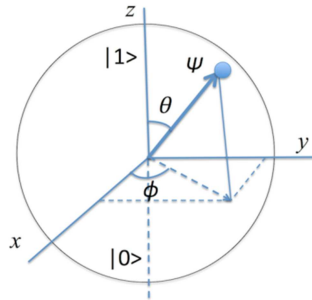
ifadesinde olduğu gibi süperpozisyon olarak gösterilir. Durum katsayıları $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ normalizasyon şartını sağlamalıdır. α ve β kompleks sayılardır (Oliviera ve diğ., 2007; McMahan, 2008; Jones, 2001, 2011).

2.1.2 Spin 1/2 sistemler

Elektronun spini $S = 1/2$ değeri ve alacağı $1/2$ ve $-1/2$ kuantum durumları ile kübiti temsil etmek üzere kullanılabilir. Böylece $|0\rangle$ ve $|1\rangle$ baz vektörleri, kuantumlanma doğrultusu olan z -ekseni boyunca yukarı spin $|\uparrow\rangle$ ve aşağı spin $|\downarrow\rangle$ durumlarını temsil eder. Büyüklüğü 1 birim olan kübitin geometrik yorumu,

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

olarak verilir ki bu gösterim Bloch küresi olarak bilinir, Şekil 2.1. Denklemden kutupsal açı θ ve azimut açı φ gerçel sayılardır. Buna göre bir kübit Bloch küresi üzerindeki her nokta ile temsil edilir. Şekil 2.1’de θ ve φ açıları ile üç boyutlu küre üzerinde bir nokta tanımlanmıştır. Bu küre tekli bir kübitin göz önünde canlandırılması için kullanışlı bir yoldur. Ancak Bloch küresiyle kübiti tanımlama sezgilerimizi sınırlar. Bunun nedeni, çoklu kübitler için Bloch küresinin görselleştirilmesinin genelleştirilememesidir (Oliviera ve diğ., 2007; McMahan, 2008; Jones, 2001, 2011).



Şekil 2.1. Bloch küresi (bir kübitin geometrik temsili)

2.1.3 Kutritler

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

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

dir ve bir kutrit,

$$|\psi\rangle = \alpha_0|0\rangle + \alpha_1|1\rangle + \alpha_2|2\rangle \quad (2.4)$$

olarak gösterilir. $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2$ kompleks sayılardır ve $|\alpha_0|^2 + |\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 = 1$ olmalıdır. Örneğin biradikalin triplet durumu kutrit durum oluşturur. Benzer biçimde spini 1 olan ^{14}N çekirdeği de bir kutrit oluşturur. Dört ve daha fazla ortonormal baza sahip kuantum durumları da kudit olarak isimlendirilmektedir (Oliviera ve diğ., 2007; Türkpençe, 2007; Şaka, 2007; Jie ve diğ., 2009; Jones, 2001, 2011; Wilmott, 2011).

2.1.4 Çoklu kubitler

Çoklu kubitler; $n=1, 2, 3, \dots$ olmak üzere 2^n elemanlı sütun vektörü ya da öz durum fonksiyonu olarak gösterilir ve bir kubitlik sistemden türetilir. Türetmede tensör çarpımı esas işlemdir (Oliviera ve diğ., 2007; McMahon, 2008; Jones, 2001, 2011).

$|x\rangle$ ve $|y\rangle$ birer kubitlik öz durum fonksiyonları kabul edilirse mümkün dört durum için tensörel çarpım iki kubitlik sistemin öz durumlarını verecektir.

$$|0\rangle \otimes |0\rangle = |00\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.5)$$

$$|0\rangle \otimes |1\rangle = |01\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.6)$$

$$|1\rangle \otimes |0\rangle = |10\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.7)$$

$$|1\rangle \otimes |1\rangle = |11\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (2.8)$$

Benzer işleme devam edilerek üç, dört, beş vb. kubitlik sistemlerin öz durumları oluşturulabilir.

Krönecker çarpımı olarak bilinen tensörel çarpım için $M \times N$ boyutlu \mathbf{A} matrisi ile $P \times Q$ boyutlu \mathbf{B} matrisi alınrsa, tensörel çarpım sonucu olan \mathbf{C} matrisi $(M \times P) \times (N \times Q)$ boyutlu olacaktır.

$$\mathbf{C} = \mathbf{A} \otimes \mathbf{B} = \begin{bmatrix} a_{11}\mathbf{B} & a_{12}\mathbf{B} \dots & a_{1n}\mathbf{B} \\ a_{21}\mathbf{B} & a_{22}\mathbf{B} \dots & a_{2n}\mathbf{B} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{m1}\mathbf{B} & a_{m2}\mathbf{B} \dots & a_{mn}\mathbf{B} \end{bmatrix} \quad (2.9)$$

Tensörel çarpım işleminin algoritması Algoritma 1’de verilmiştir. Bu algoritma programlama için yararlı olacaktır.

Algoritma 1. Tensörel çarpım algoritması. $M \times N$ boyutlu \mathbf{A} tensörü ile $P \times Q$ boyutlu \mathbf{B} tensörünün çarpımı $(M \times P) \times (N \times Q)$ boyutlu \mathbf{C} tensörünü verecektir.

1. M, N, P ve Q sayılarını oku (giriş matrislerinin boyutları),

2. Kompleks $\mathbf{A}_{\text{Re}}, \mathbf{A}_{\text{Im}}$ ve $\mathbf{B}_{\text{Re}}, \mathbf{B}_{\text{Im}}$ tensörlerini oku.

3. $i_3=0$ al.

4. $i_1=1, 2, 3, \dots M$ değerleri ve

$i_2=1, 2, 3 \dots P$ değerleri için

i- $i_3=i_3+1$ al,

ii- $j_3=0$ al,

iii- $j_1=1, 2, 3 \dots N$ için

iv- $j_2=1, 2, 3 \dots Q$ için

I. $j_3=j_3+1$ al,

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

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

işlemlerini yap.

5. $i_1=1, 2, 3 \dots (M \times P)$ ve

$j_1=1, 2, 3 \dots (N \times Q)$ değerleri için

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

2.1.5 Bell dolanıklığı

İki kübitlik kuantum durumunda, bir kübitlik durumda olduğu gibi her bir baz durumunun ayrı ayrı bulunma olasılıklarının genlikleri bulunabilir. İki kübitlik kuantum durumunu tanımlayan öz durum vektörü,

$$|\psi\rangle = \alpha_{00}|00\rangle + \alpha_{01}|01\rangle + \alpha_{10}|10\rangle + \alpha_{11}|11\rangle \quad (2.10)$$

şeklinde yazılabilir. Herhangi bir $|xy\rangle$ durumunun katsayısı $\langle xy|\psi\rangle$ iç çarpımı ile elde edilebilir.

Ölçüm sonucu meydana gelen her bir $|xy\rangle$ kübitinin durumu, $|\alpha_{xy}|^2$ olasılığı ile gözlenir. Olasılıklar için normalizasyon koşulu,

$$\sum_{x,y=0}^1 |\alpha_{xy}|^2 = |\alpha_{00}|^2 + |\alpha_{01}|^2 + |\alpha_{10}|^2 + |\alpha_{11}|^2 = 1 \quad (2.11)$$

şeklindedir.

İki spinden oluşan bir kuantum mekanik sistem, yani iki kübitlik sistem triplet (üçlü) ve singlet (tekli) durumlar oluşturur. Bunlardan singlet durum zıt durumdaki tek spinlerin zıt yönelimlerinin üst üste gelmesinden (süperpozisyonundan) oluşur. Bell eşitsizliği olarak bilinen bu ifade,

$$\psi_s = \frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle - |01\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (2.12)$$

olarak yazılır. Einstein Podolsky ve Rosen makalelerinde (Einstein ve diğ., 1935), tartışmaya açılan bu olay teorik fizikçi John Bell (1964) tarafından yayınlanan makalede formülleştirilmiştir. Kuantum non-lokalite (yersizlik ya da terim anlamıyla uzaktan etkileşim) olarak bilinen bu olay dolanıklık (entanglement) kavramının formülleştirilmesidir. Buradaki önemli hususlardan birisi singlet durumu oluşturan kübitlerin aralarındaki mesafenin öneminin olmadığıdır (McMahon, 2008; Jones, 2001, 2011).

2.2 Kuantum Bilgisayarlarının Gerçekleştirildiği Sistemler

Kuantum mekaniğinin yasalarını kullanarak bilgisayar tasarlama düşüncesi ilk defa Richard Feynman tarafından 1986 yılında öne sürülmüştür (Feynman, 1986). Feynman, klasik bilgisayarları kullanarak bir kuantum sistemin simülasyonunun oldukça uzun süre gerektireceğini öngörmüştür. Feynman bu öngörüyü yaptığı 1986 yılında çözümü zor ya da imkansız olarak nitelendirilen problemlerin çözülebileceği bir sistemin olması gerektiği sonucuna ulaşmıştır (Feynman, 1986).

1994 yılında Peter Shor kuantum bilgisayarlarının matematiksel olarak zor bir problemi çözmeye kullanılabileceğini ortaya koymuştur (Shor, 1994). Örneğin 250 haneli bir sayıyı asal çarpanlara ayırmak için bu makalenin yayınlandığı yıl esas

alındığında yüzlerce paralel bağı klasik bilgisayarın bile yüz milyon yıldan fazla zaman alacağı hesaplanırken kuantum bilgisayarlarda bu hesaplamanın dakikalar mertebesinde olacağı öngörülmektedir.

Fakat tüm fiziksel sistemler gibi kuantum mekaniksel sistemler de çevreleriyle etkileşim halindedir ve bu etkileşim bilgi işlemede çevrenin etkisi nedeniyle hatalara yol açabilir. Dolayısıyla kuantum bilgisayarlar için bu durum onların klasik bilgisayarlara üstünlüğünü zayıflatacak bir etkileşimdir. Bu olumsuzluğu gören Peter Shor ve Adrew Steane kübit hata düzeltme işleminin mümkün olduğunu ortaya koydular (Nakahara ve Ohmi, 2008). Örnek olarak tek kübitlik $c_1|\beta\rangle + c_2|\alpha\rangle$ durumu bir hata sonucu $c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle$ biçimine dönüşebilir. Bunu önlemek için sistemi bozmadan yani α ve β katsayılarını değiştirmeden bu sistem ters çevrilebilmelidir. Bu sistemde iki yardımcı kübit kullanılarak $c_1|\beta\rangle + c_2|\alpha\rangle$ durumu $c_1|\beta\beta\beta\rangle + c_2|\alpha\alpha\alpha\rangle$ şeklinde kodlanabilir. Böylece tek kübitteki bilgi dolanık seviyedeki üç kübitte kodlanmış olacaktır. İşlemlerin tersi alınarak ilave bitlerin durumu ölçülüp hata olup olmadığı bilgisi bulunabilir. Bu bilgi yardımıyla belirli aşamalarda yapılan hata düzeltme işlemleri ile işlemlerin doğru yürütülmesi sağlanabilmektedir.

Kuantum bilgisayarlarında tüm bu işlem basamaklarını gerçekleştirebilmek belirli fiziksel sistemler ve teknikler gerektirmektedir. Bu sistemler ve tekniklerle ilgili birçok öneri bulunmaktadır. Üzerinde kuvvetle durulan sistemler ve tekniklerden bazıları aşağıda ana hatlarıyla verilmiştir (Nakahara ve diğ., 2007; Nakahara ve Ohmi, 2008; Nielsen ve Chuang, 2010).

2.2.1 Kuantum elektrodinamiği

Kuantum elektrodinamiği, 1940'lı yıllarda kuantum mekaniği ile elektromanyetik teorisinin birleşerek ortaya çıkardığı ışık ve madde arasındaki etkileşim konusunda kuantum mekaniği ile özel göreliliği birlikte kullanan bir teoridir.

Kuantum elektrodinamiği hidrojen atomunun enerji seviyelerindeki Lamb kaymasını ve elektronun anormal manyetik momentini son derece doğru tahmin ettiği için Richard Feynman bu teoriyi 'fiziğin mücevheri' olarak tanımlamıştır (Feynman, 1985). Bu konu ile ilgili çalışmalarıyla Nobel ödülü alan Feynman kuantum elektrodinamikte üç temel hareketten bahsetmiştir.

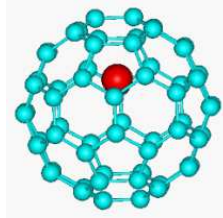
1. Bir foton bir yer ve zamandan diğer yer ve zamana geçebilir.
2. Bir elektron bir yer ve zamandan diğer yer ve zamana geçebilir.
3. Bir elektron belirli bir yer ve zamanda bir foton yayınlar veya soğurur.

Üç hareketin hepsinde iki durum sözkonusudur, yani her bir hareket ayrı ayrı ele alındığında bir kübitlik sistem oluşturur ve dolayısıyla kuantum hesaplamının gerçekleştirilmesi için kontrol edilebilmesi halinde uygun birer sistem oluştururlar.

2.2.2 Fullerenler

Fulleren veya buckminsterfulleren olarak bilinen özel moleküler yapılar tamamen karbon atomlarından meydana gelmiş bir tür moleküldür. Küre, silindir veya elipsoit şekillerinde bulunabilir. Fullerenlerin bilinen en küçük üyesi C_{20} , en yaygın üyesi C_{60} ve C_{70} molekülleridir. Silindir veya oval yapıda olanlar daha ziyade karbon nanotüp olarak bilinmektedirler ve örgüdeki karbon sayısı bu yapılarda doğal olarak çok fazladır. Yaklaşık 1 nm boyutunda olan bu yapılardan C_{60} ; 20 altıgen, 12 beşgenden ve 60 karbon atomundan oluşan küre biçimindeki yapıdır.

Fullerenler olağan dışı kafes yapılarından dolayı benzersiz bir iç uzaya sahiptirler. İç uzayın boyutları, fullerenlerin içerisine bazı atomların ve küçük moleküllerin yerleştirilmesine olanak tanır. İçine bir atom veya atom grubu konularak oluşan yapılar *endohedral fulleren* olarak adlandırılmaktadır. Farklı tekniklerle fullerenlerin içine atom veya küçük atom grupları konulabilmektedir. Bu yapılar $M@C_{60}$ biçiminde gösterilir. M burada metal yerine kullanılmışsa da ametaller de konulabilmektedir. Oluşan yapı $N@C_{60}$ gibi bir azot atomu veya $La@C_{60}$ gibi lantanitler grubundan bir atom olabilir. Kararlı olmaları, isteğe bağlı atomların fulleren içine konulabilmesi gibi birçok nedenden ötürü fullerenler özellikle manyetik rezonans spektroskopileri ile kuantum hesaplamının gerçekleştirilebileceği fiziksel yapıların başında gelmektedir (Yadav ve Kumar, 2008).



Şekil 2.2. Bir endohedral fullerenin yapısı. Büyük yuvarlak kafes içine konulmuş bir atomu temsil etmektedir

2.2.3 Moleküler mıknatıslar

Moleküler mıknatıslar ya da organometalik kompleks yapılar belirli bir kritik sıcaklığın altında mıknatıslanan ve tek bir molekülden oluşan mıknatıslardır. Bu

yapılarda metal olarak çoğunlukla Mn^{2+} veya Fe^{3+} bulunur. Manyetik dipol momentlerinin olması bu miknatısların manyetik rezonans spektroskopileri ile incelenebileceğini ya da davranışlarının kontrol edilebileceğini göstermektedir. Bu tür yapılar da kuantum hesaplamaların gerçekleştirilebileceği fiziksel yapı olarak umut vericidir (Ruiz–Molina ve diğ., 2000; Url-4).

2.2.4 Biradikaller

Biradikaller ya da radikal çiftleri, çiftlenmemiş iki elektronu olan moleküller olarak tanımlanır. Birbirleriyle eşlenen bu iki elektronun arasındaki mesafe moleküler veya atomik boyutlardadır. Biradikali oluşturan iki elektronun bağlı olduğu atom veya grup genellikle özdeştir, ancak nadir görülse de farklı da olabilir.

Yüksek enerjili radyasyona maruz bırakılan $K_2S_2O_8$ veya $(NH_4)_2S_2O_8$ kristali içinde spinleri sıfır olan iki SO_4^- grubuna bağlı $SO_4^- - SO_4^-$ iyonik biradikali oldukça kararlı bir yapıya sahiptir ve EPR spektroskopisi için en basit yapıdaki biradikaldir (Tapramaz, 1991). Benzer ve daha kararlı bir yapı kuartz kristali içinde oluşturulan oksijen boşluklarında tuzaklanan biradikallerdir (Mashkovtsev, 2011). Kararlı bir radikal olan nitroksit radikalinin iki tanesinin birbirine bağlanmasıyla oluşan $\dot{N}O - \dot{N}O$ biçimindeki dinitroksit radikalleri yaygın bilinen diğer kararlı biradikallerdir. Bu yapıda her iki elektron da spinini 1 olan ^{14}N atomuna bağlıdır ve spektrumu spektroskopik açıdan ilginçtir (Rieger, 2007; Ayabe ve diğ., 2013). İki N atomunun oluşturduğu başka yapılara bir örnek Fatila ve diğ.'nde bulunabilir (2013). Başta $Cu^{2+} - Cu^{2+}$ metal çifti olmak üzere metal komplekslerden oluşan kararlı biradikaller bu konu için diğer ilginç yapılar olarak durmaktadır (Kim ve diğ., 2003; Kirk ve Shultz, 2013). Biradikaller yanında triradikaller az da olsa gözlenen diğer ilginç davranış sergileyen yapılardır ve başka çalışmaların konusudur.

2.2.5 Nükleer manyetik rezonans (NMR) spektroskopisi

Nükleer manyetik rezonans spektroskopisi, kuantum bilgi terorisinin gerçekleştirilmesinde puls ve Fourier dönüşüm tekniğinin bu spektroskopide yaygın, kolay ve dolayısıyla bir adım önde gelişmiş olması nedeniyle oldukça fazla kullanılmaktadır (Oliviera ve diğ., 2007; Nakahara ve Ohmi, 2008). NMR tekniği ile moleküllerin yapısal olarak belirlenmesinde kimyasal kayma bir yana bırakılarak esas olarak spin–spin ve çekirdek kuadrupol moment etkileşimleri kuantum

hesaplama yaygın olarak kullanılan etkileşimlerdir. Bu çalışmada değerlendirilecek olan pulslu EPR spektroskopik teknikleri pulslu NMR spektroskopisi ile yakın benzerliğe sahiptir ve NMR uygulamalarında elde edilen tecrübe ve birikimden azami ölçüde yararlanılacaktır (Rule ve Hitchens, 2006; Oliviera ve diğ., 2007; Nielsen ve Chuang, 2010).

2.2.6 Elektron paramanyetik rezonans (EPR) spektroskopisi

Elektron paramanyetik rezonans (EPR) spektroskopisinde eşlenmemiş elektron içeren tüm ve eşlenmemiş elektronla etkileşen bütün çekirdekler ilave donanım gerektirmeden tek bir cihazla incelenebilir. Bu özellik EPR spektroskopisinin önemli özelliğidir. Kuantum bilgi işlemeye uygun olan paramanyetik yapıların öncelikle kararlı olmaları gereklidir. Bazı biradikaller, geçiş metal iyon kompleksleri, lantanitlerle yapılan kompleksler, tuzaklanmış iyonlar, endohedral fullerener ve nano tüpler ile moleküler mıknatıslar bu şartı sağlayan kararlı yapılardır. EPR spektroskopik tekniği ile ilgili ayrıntılı bilgiler Bölüm 2.7’de verilmiştir (Schweiger ve Jeschke, 2001; Gavin, 2005; Rule ve Hitchens, 2006).

2.2.7 Elektron nükleer double rezonans (ENDOR) spektroskopisi

Bir EPR spektrumunda herhangi bir geçiş çizgisi üzerinde manyetik alan sabitlenerek mikrodalga gücü doyum düzeyine yükseltilir ve NMR geçişini yapacak olan radyo frekans bölgesinde tarama yapılır; böylece üzerinde manyetik alanın sabitlendiği geçiş veren çekirdek ile komşu olan diğer çekirdekler belirlenebilir; çünkü elde edilen spektrum tipik bir NMR spektrumudur.

ENDOR geçişleri sürekli dalga spektroskopisi ile yapılabildiği gibi pulslu spektroskopi ile de yapılır. Kullanılan iki puls dizisi Davies ENDOR ve Mims ENDOR puls dizileridir. Ancak ENDOR eğer kuantum bilgi işlemede kullanılacaksa pulslu NMR veya EPR spektroskopilerinde olduğu gibi farklı puls dizileri de bu teknikte kullanılabilir. ENDOR ile ilgili ek bilgiler Bölüm 2.8’de verilmiştir (Sato ve diğ., 2007; Nakahara ve diğ., 2007).

2.2.8 Spintronik

Spintronik, spin geçiş elektronunun spin–elektronu kelimelerinden türetilen teknolojinin ismidir. Spintronik, elektronik aygıtlardaki bilgiyi elektronun spinini kullanarak taşır. Magneto elektronik olarak da adlandırılan spintronik elektronların

kuantum özellikleri olan spin hareketi (yukarı veya aşağı) ve yük durumlarından yararlanmayı temel alan bir teknolojidir. Spintronik mikroelektronikte olağanüstü gelişmelere yol açmıştır. Bu gelişmeler daha hızlı, başlangıç zamanı daha çabuk, veri kapasitesi daha büyük olan bilgi depolama aygıtları olarak sayılabilir (Nielsen ve Chuang, 2010; Url-1).

Spintronikte söz konusu elektron spini olduğundan, kuantum hesaplamasının gerçekleştirilebileceği ölçüde az güç harcayan ve son derece hızlı bir fiziksel teknik olma potansiyeline sahiptir.

2.2.9 Kuantum noktalar

Kuantum noktalar (quantum dots), elektronların ya da boşlukların sınırlı bir hacim içinde tutulduğu üç boyutlu yapılardır. Bu yapılar birkaç nanometre mertebesinde olup, elektriksel ve optiksel özellikleri nedeniyle genellikle 'yapay atom' olarak da adlandırılır (Üstün, 2011). Bu noktalarda tutulan elektronlar veya boşluklar diğer sistemlerde olduğu gibi bir kübitten başlayıp daha büyük kübitlere taban oluşturabilecek yapılardan birisidir, dolayısıyla kuantum bilgi işleminin gerçekleştirilmesinde bir başka araç olma potansiyeline sahiptir (Nielsen ve Chuang, 2010).

2.2.10 Süperiletken aygıtlar

Süperiletkenler elektriği hiç direnç göstermeden ileten maddelerdir. Bir süperiletken dipolde (bir akım ilmeği) akım başlatıldıktan sonra dış müdahale olmaksızın kesintisiz sürer. Böyle bir süperiletken akım halkasında manyetik dipol momentinin yönü isteğe bağlı yukarı veya aşağı yapılabilir (bir kübitlik sistemle temsil edilebilir), yapıldıktan sonra istenmediği sürece durumunu korur, yani kararlıdır. Kuantum bilgi işlemede bu dipoller elbette nanometrik boyutlarda olacaktır.

Günümüzde kullanılabilir süperiletkenler 4 K sıcaklıkta oluşmaktadır. Yüksek sıcaklıkta süperiletkenler (yüksek T_c süperiletkenler) bulunduğu takdirde bu uygulamanın gerçekleşmesi mümkün görünmektedir (Nielsen ve Chuang, 2010).

2.2.11 Işık polarizasyonu

Elektromanyetik dalgalar, ki ışık da bir elektromanyetik dalgadır, yayılma yönüne dik doğrultuda ve birbirine dik alternatif elektrik ve manyetik alan bileşiklerinden oluşmuştur, dolayısıyla ışık kutupludur. Ancak bir kaynaktan yayılan ışık, bir

uygulama yapılmadığı zaman yayılma yönüne dik olan düzlemde bütün yönlerde salınım yapacaktır. Eğer bir polarizör (kutuplayıcı) kullanılırsa bir ışığın sadece polarizör yönünde kutuplu olması sağlanabilir. Bu özellikten yararlanılarak ışık istenilen doğrultuda kutuplandırılabilir.

Net olması bakımından z doğrultusunda yayılan ışık bir polarizörle isteğe bağlı olarak x ve y doğrultularında kutuplandırılabilirse, bu iki kutuplu durum bir kübit oluşturacaktır. Bunun anlamı kutuplandırılabilen ışığın kuantum bilgi işlemenin gerçekleştirilebileceği güçlü bir fiziksel aday olacaktır.

2.3 Kuantum Mantık Geçitleri

Klasik bilgi teorisinde olduğu gibi ham verileri işlemek için kuantum bilgi teorisinde de mantıksal geçitleri kullanılmaktadır (McMahon, 2008). Kuantum mantık geçitlerinin klasik geçitlerden en önemli farkı işlemlerin tersinir (reversible) olmalarıdır. İşlem için gerekli girdi işlem yapıldıktan sonra tersten başlanarak tekrar elde edilebilir. Benzerlik dönüşümü bu tersinirliğin teorik zeminini oluşturmaktadır (Bellac, 2006; Oliviera ve diğ., 2007; McMahon, 2008).

2.3.1 Tek kübit geçitler

Tek kübit geçitler tek bir spin üzerindeki işlemlerle ve spin alt uzayına karşılık gelen dönmelerden oluşturulabilir. Tek kübitlik mantık geçitleri en sade şekilde Bloch vektör modeliyle görselleştirilmektedir.

2.3.1.1 NOT (DEĞİL) geçiti

Not geçiti en basit tek kübitlik geçittir ve klasik bilgisayarlarda da kullanılmaktadır. Tersinir (reversible) özellikli olan bu geçit, girişi mantık 1 ise çıkış mantık 0, giriş mantık 0 ise çıkış mantık 1 olur.

NOT geçiti, tek kübitlik spinlere aşağıdaki dönüşümleri yapar.

$$\hat{N} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.13)$$

$\hat{N}|0\rangle = |1\rangle$, $\hat{N}|1\rangle = |0\rangle$ veya $|0\rangle \xrightarrow{N} |1\rangle$ ve $|1\rangle \xrightarrow{N} |0\rangle$ eşitliği ile gösterilen tersleme işlemi matris gösterimi ile açık biçimde gösterilebilir;

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \text{ ve } \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.14)$$

2.3.1.2 Pauli–X geçiti

Pauli–X geçiti, klasik bilgi teorisindeki değil geçitinin (not gate), kuantum için uyarlamasıdır ve bit–tersleme (bit–flop) işlemini gerçekleştiren, yani girişi tersine döndüren kuantum mantık geçitidir. Pauli–X geçitinin matris temsili,

$$\hat{X} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.15)$$

olarak verilir. Bu geçit NOT işlemini yapmaktadır; dolayısıyla Pauli–X geçiti NOT geçiti olarak değerlendirilmektedir.

2.3.1.3 Pauli–Y geçiti

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

$$\hat{Y} = i \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.16)$$

olarak verilir.

2.3.1.4 Pauli–Z geçiti

Pauli–Z geçiti, faz dönme işlemcisidir. Matris gösterimi,


$$\hat{Z} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (2.17)$$

olan bu Pauli–Z geçiti tek kübitlik sisteme uygulandığında,

$$|\varphi_1\rangle = \hat{Z}|\varphi_0\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} [a_0|0\rangle + a_1|1\rangle] = a_0|0\rangle - a_1|1\rangle \quad (2.18)$$

sonucunu verecektir ki iki kübitin süperpozisyon durumunu değiştirir.

2.3.1.5 Bir kübit için Hadamard geçiti

Kuantum bilgi teorisinde Hadamard geçiti özel bir öneme sahiptir. ‘Hadamard geçiti’ \hat{H} harfi ve  sembolü ile temsil edilir. Kuantum mantık geçitleri arasında en yaygını olan Hadamard geçiti, uygulandığı kuantum bilgi sistemini süperpozisyon durumuna getirmektedir (McMahon, 2008). Bir kübitlik sistemde Hadamard geçitinin matris temsili,

$$\hat{H} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \quad (2.19)$$

dir. Hadamard geçiti tek kübitlik sistem için uygulandığında $|0\rangle$ durumu için,

$$\hat{H}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle) \quad (2.20)$$

yani,

$$|0\rangle \xrightarrow{H} \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |1\rangle \xrightarrow{H} \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \quad (2.21)$$

dönüşümlerini yapar. Hadamard geçiti iki önemli özelliğe sahiptir. İlk olarak $|0\rangle$ saf durumunu tamamen düzgün konuma, yani $|0\rangle$ ve $|1\rangle$ durumlarının katsayılarının özdeş olduğu duruma çevirmesi, ikinci olarak kendinin zıddı (self invers) bir işlemci olmasıdır ki bu da \hat{H} işlemcisi art arda iki kez uygulandığında hiçbir şey yapılmamış duruma döndürür. \hat{H} , Pauli-X ve Pauli-Z matrisleri kullanılarak Denklem 2.22'deki gibi de elde edilebilir.

$$\hat{H} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} + \hat{Z}) \quad (2.22)$$

2.3.1.6 Faz geçiti veya faz işlemcisi \hat{S}

Kuantum bilgi teorisinde, dalga fonksiyonunda faz oluşturmak için kullanılan faz kapılarından biridir. Faz geçiti matris temsili \hat{S} ve φ faz açısı olmak üzere,

$$\hat{S} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\varphi} \end{bmatrix} \quad (2.23)$$

olarak tanımlanır. Eğer $\varphi = \pi/2$ alınırsa faz operatörü,

$$\hat{S} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix} \quad (2.24)$$

olacaktır. \hat{S} faz geçiti toplam dalga fonksiyonunu,

$$\hat{S}|\varphi_0\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix} [a_0|0\rangle + a_1|1\rangle] = a_0|0\rangle + i a_1|1\rangle \quad (2.25)$$

biçiminde kompleks hale sokar.

2.3.1.7 $\hat{T} - \frac{\pi}{8}$ faz geçiti

Tek kübitlik sistemlerde diğer bir faz geçiti $\hat{T} - \frac{\pi}{8}$ faz geçitidir. Matris temsili,

$$\hat{\mathbf{T}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{bmatrix} \quad (2.26)$$

dir. $\hat{\mathbf{T}}$ faz geçiti dalga fonksiyonu üzerinde,

$$\hat{\mathbf{T}}|\varphi_0\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{bmatrix} [a_0|0\rangle + a_1|1\rangle] = a_0|0\rangle + a_1e^{i\pi/4}|1\rangle \quad (2.27)$$

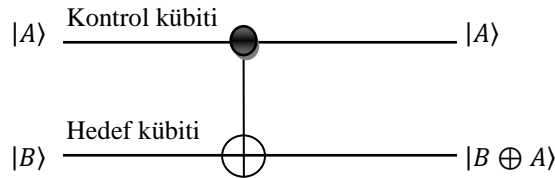
şeklinde etki eder.

2.3.2 İki kubitlik geçitler

İki kubitlik geçitlerin bir kısmı iki tek kubitlik sistemin genişletilmesiyle elde edilen ürünler iken bir kısmı da ancak iki kubitlik sistemlerde geçerli olan mantık geçitleridir. Eğer kuantum hesaplamada spin söz konusu ise iki kubitlik geçitler iki spinli bir sistemdir; fakat bunlar tek kübite indirgenemezler. İki kubitlik geçitlerin önemlileri CNOT, SWAP, Toffoli veya CCNOT ve CSWAP geçitleridir.

2.3.2.1 CNOT (kontrol-not) geçiti

CNOT (Kontrollü DEĞİL) geçiti kuantum bilgi işlemede yaygın olarak kullanılan temel geçitlerden birisidir. CNOT geçitinin devre sembolü Şekil 2.3'te verilmiştir.



Şekil 2.3. CNOT geçitinin bir devredeki gösterimi. \oplus işlemi mod 2'ye göre toplama işlemidir (klasik mantıkta kullanılan XOR geçitine karşılık gelmektedir)

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

CNOT işlemcisi kontrol kubitin durumu $|1\rangle$ ise hedef kubitin durumunu tersine çevirirken kontrol kubitin durumu $|0\rangle$ ise hedef kubitin durumunu değişmez bırakmaktadır. İşlemden önce kontrol ve hedef kubitlerin durumları a , b ve işlemden sonra a' ve b' olmak üzere bu durum bir doğruluk tablosuyla gösterilebilir.

Çizelge 2.2. CNOT geçitinin doğruluk çizelgesi

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

İki kubitlik bir $|ab\rangle$ kuantum sistemi dikkate alındığında, burada a kontrol kübiti, b ise hedef kubit olarak alınırsa,

$$\text{CNOT}_a|ab\rangle = |a a \oplus b\rangle \quad (2.28)$$

şeklinde olur. Denklemden \oplus işlemi mod 2'ye göre toplama (XOR) işlemidir. Çizelge 2.2 dikkate alınarak CNOT geçitinin matris operatörü oluşturulabilir.

$$\text{CNOT} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.29)$$

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

$$\text{CNOT}_a = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \text{ ve } \text{CNOT}_b = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.30)$$

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

$$\text{CNOT}_a|11\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = |10\rangle \quad (2.31)$$

şeklinde olur.

2.3.2.2 SWAP geçiti

İki kubitlik bir kuantum mantık geçiti olan SWAP geçiti evrensel mantık kapılarından biridir. Uygulandığı kuantum bilgi sisteminde kubitlerin yerlerini

değiştirir yani kubitlerin durumlarını deęiş-tokuş eder. SWAP geçiti $|ab\rangle$ iki kubitlik bir kuantum durumuna uygulandıęında,

$$\text{SWAP}|ab\rangle = |ba\rangle \quad (2.32)$$

olur. SWAP işlemcisi için doęruluk tablosu Çizelge 2.3'de verilmiştir. SWAP geçiti CNOT kapıları ard arda kullanılarak oluşturulabilir(Şekil 2.4).

$$\text{SWAP} = \text{CNOT}_a \text{CNOT}_b \text{CNOT}_a \quad (2.33)$$

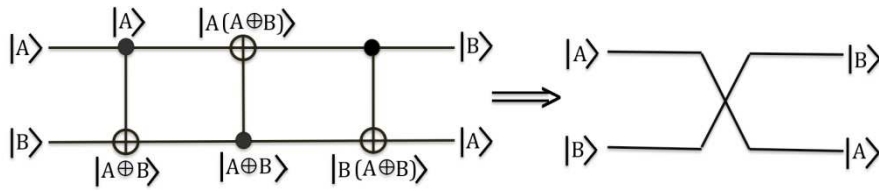
Matris temsiliyle gösterirsek,

$$\text{SWAP} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.34)$$

şeklindedir.

Çizelge 2.3. Swap işlemcisi için doęruluk çizelgesi

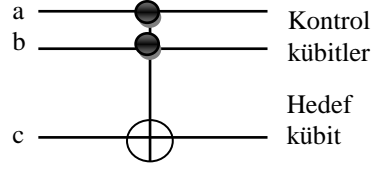
a	b	a'	b'
0	0	0	0
0	1	1	0
1	0	0	1
1	1	1	1



Şekil 2.4. SWAP mantık geçitinin üç CNOT geçitiyle oluşumu ve spin deęiş tokuşunu gösteren kuantum devresi

2.3.2.3 Toffoli (CCNOT) geçiti

Tersinir kapılar kullanılarak rastgele bir işlevi hesaplamak için başka bir kapı gerekir. Bir olasılık Toffoli tarafından 1980 yılında önerilen geçittir. Toffoli geçitinin devre gösterimi Şekil 2.5'te verilmiştir.



Şekil 2.5. Toffoli geçitinin devre şeklinde gösterimi

Toffoli geçiti, üç kubitlik bir geçittir. İlk iki kubit kontrol kubitleri ve üçüncü kubit hedef kubitidir. Toffoli geçitinin doğruluk çizelgesi Çizelge 2.4’de ve matris gösterimi Denklem 2.35’de gösterilmiştir.

Çizelge 2.4. Toffoli geçitinin doğruluk çizelgesi

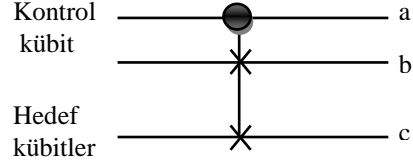
Giriş			Çıkış		
<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	<i>a'</i>	<i>b'</i>	<i>c'</i>
0	0	0	0	0	0
0	0	1	0	0	1
0	1	0	0	1	0
0	1	1	0	1	1
1	0	0	1	0	0
1	0	1	1	0	1
1	1	0	1	1	1
1	1	1	1	1	0

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

(2.35)

2.3.2.4 Fredkin (CSWAP) geçiti

Fredkin tarafından oluşturulan ve CSWAP veya Fredkin ismiyle bilinen kapının devre şeklinde gösterimi Şekil 2.6’da verilmiştir.



Şekil 2.6. Fredkin (CSWAP) geçitinin devre şeklinde gösterimi

Fredkin geçiti üç-bitlik bir geçit olup ilk bit 1 ise son iki bit yer değiştirir. Fredkin geçitinin doğruluk çizelgesi Çizelge 2.5’de ve matris temsili Denklem 2.36’da gösterilmiştir.

$$\begin{bmatrix}
 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1
 \end{bmatrix} \quad (2.36)$$

olarak verilir.

Çizelge 2.5. Fredkin geçitinin üç kubit için doğruluk çizelgesi

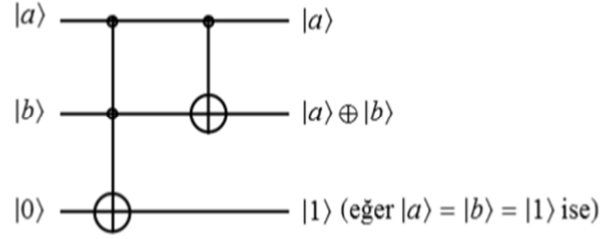
Giriş			Çıkış		
<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	<i>a'</i>	<i>b'</i>	<i>c'</i>
0	0	0	0	0	0
0	0	1	0	0	1
0	1	0	0	1	0
0	1	1	0	1	1
1	0	0	1	0	0
1	0	1	1	1	0
1	1	0	1	0	1
1	1	1	1	1	1

2.4 Kuantum Mantık Devreleri

Belirli bir başlangıç durumundan veya bir giriş bilgisini okuyarak, önceden belirlenmiş bir mantığa göre veya rastgele olarak bilgiyi işleyen sonlu ve sıralı işlemler kümesi algoritma olarak tanımlanır. Klasik bilgi teorisinde olduğu gibi kuantum bilgi teorisinde de algoritmalar mantık kapıları kullanılarak oluşturulurlar (Bellac, 2006; Oliviera ve diğ., 2007; McMahan, 2008).

2.4.1 Yarı toplayıcı mantık devresi

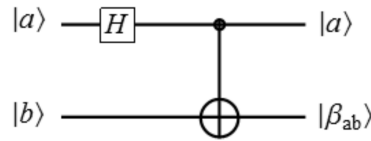
Klasik bilgi teorisinde de uygulanabilen yarı toplayıcı mantık devresinde, kuantum mantık kapıları Şekil 2.7'deki sırayla kullanılarak uygulanabilir (Stolze ve diğ., 2004).



Şekil 2.7. Yarı toplayıcı devre

2.4.2 Bell dolanıklığı geçiti

Kuantum bilgi teorisinde en önemli mantık devrelerinden birisi de Bell durumlarını elde etmeyi sağlayan dolanıklık devresidir.



Şekil 2.8. Bell durumlarının elde edilmesi için kuantum mantık devresi

İki kübitlik kuantum bilgi sisteminde dolanık durumları elde etmek için, $|a\rangle \otimes |b\rangle = |ab\rangle$ durumuna Şekil 2.8'de gösterildiği gibi, ilk olarak birinci kübite Hadamard geçiti, ikinci adımda ise birinci kübit kontrol kübiti, ikinci kübit hedef kübiti olmak üzere girişlere mantık geçiti uygulanırsa,

$$|\beta_{ab}\rangle = \text{CNOT}_b^a[(H \otimes E_2)|ab\rangle] \quad (2.37)$$

olur. Burada E_2 , 2×2 boyutunda birim matristir. İşlem sonucu genel bir ifadeyle,

$$|\beta_{ab}\rangle = \frac{|0b\rangle + (-1)^a|1\bar{b}\rangle}{\sqrt{2}} \quad (2.38)$$

şeklinde gösterilir. Burada denklemde \bar{b} ifadesi b kubitinin değılidir. Bu ifade kullanılarak elde edilen tüm Bell dolanık durumları Denklem 2.39'da verildiğı gibi oluşacaktır.

$$\begin{aligned} |\beta_{00}\rangle &= \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}} & |\beta_{01}\rangle &= \frac{|01\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}} \\ |\beta_{10}\rangle &= \frac{|00\rangle - |11\rangle}{\sqrt{2}} & |\beta_{11}\rangle &= \frac{|00\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}} \end{aligned} \quad (2.39)$$

Kuantum mantık kapıları kullanılarak birçok algoritma tasarlanmıştır. Deutsch-Jozsa algoritması (Deutsch, 1992), kuantum Fourier dönüşümü algoritması (Oliveira ve diğ., 2007). Shor'un çarpanlara ayırma algoritması (Shor, 1995) ve Grover'in arama algoritması (Lavor ve diğ., 2003) tasarlanan önemli algoritmalarındandır. Bunlardan Grover'in arama algoritması, sıralanmamış bir veri tabanında istenilen elemanı bulmayı amaçlar.

2.4.3 Kuantum dolanıklık

Farklı sistemlerden oluşan bir toplam sistemin sahip olduğı kuantum durumlarında alt sistemlerin durumları arasında ilişki varsa iki sistem dolanıktır denir (Haken ve diğ., 2005). Kısaca, aynı kaynaktan çıkan iki parçacığın durumlarının (state) zıt durumlar olacağını söyler (Bellac, 2006; Oliviera ve diğ., 2007; McMahan, 2008; Url-3).

Dolanık durumlar, iki yerel durumun doğrudan çarpımı olarak ayrılamayan durumlar olarak tanımlanır.

$$|\psi\rangle \neq (|\phi_A\rangle \otimes |\phi_B\rangle) \quad (2.40)$$

Örnek olarak, $|00\rangle + |01\rangle$ durumu $|0\rangle \otimes (|0\rangle + |1\rangle)$ gibi iki ayrı durumun tensör çarpımı olarak tanımlanır ancak bu durum dolanıklık tanımına uymaz. $|00\rangle + |11\rangle$ durumu ise aynı biçimde tanımlanamaz. Bu yüzden $|0\rangle$ ve $|1\rangle$ durumları dolanıktır denilir. Alt sistemlerden birinin herhangi bir durumda bulunabilirliğı diğeri sistemin durumuna bağlıdır.

Dolanık parçacıkların elde edilmesi kuantum bilgi teorisinin ‘iletişim’ konusu açısından önem arz eder. Yapılacak deneyler yönüyle birçok dolanıklaştırma metodu geliştirilmiştir.

2.4.4 Dolanık kubitler

Saf durumdaki tek kubitlik bilgi taşıyan sistemlerle yapılan ölçümler iki olası sonucu öngörür. A ve B tek kubitlik bilgi taşıyan iki sistem olmak üzere A ve B dolanık hale getirilirse bu iki durumdan oluşacak global sistemde yapılacak ölçüm dört olası sonuç öngörecektir. Bunlardan ilki,

$$|\psi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1_A\rangle \otimes |0_B\rangle + |0_A\rangle \otimes |1_B\rangle) \quad (2.41)$$

şeklindedir. A ve B indisleri farklı yerel sistemleri ayırmak için gösterilse de A ve B artık saf durumları temsil etmez. Ölçüm sonucu çarpım gösterimleri yazılmadan kısaca, 4 olası 2 bitlik bilginin temsili,

$$|\psi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle + |01\rangle) \quad (2.42)$$

$$|\psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle - |01\rangle) \quad (2.43)$$

$$|\phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|11\rangle + |00\rangle) \quad (2.44)$$

$$|\phi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|11\rangle - |00\rangle) \quad (2.45)$$

şeklindedir. Görüldüğü gibi bu 4 durum ortogonaldır ve $C^2 \otimes C^2$ uzayı için baz oluştururlar. Burada C karmaşık vektör uzayını temsil etmektedir. Bu durumlara ‘Bell durumları’ denilmektedir.

2.4.5 Kuantum transport

Transport olayı nano ölçekte hem kuantum hem de klasik olarak her ikisinde de var olan bir olgudur; FMO (Fenna–Matthews–Olson) protein kompleksi gibi klorofil molekülleri arasındaki fotosentetik bileşimlerin enerji transferi buna gösterilebilecek bir örnektir. Kuantum transport için önemli denklemlerden birisi N-sistemi için bağlı Hamiltonien,

$$H_S = \sum_{m=1}^N \epsilon_m |m\rangle\langle m| + \sum_{n<m}^N V_{mn}(|m\rangle\langle n| + |n\rangle\langle m|) \quad (2.46)$$

olarak verilir ve bu Hamiltonien moleküler kristaller ve nokta kusurları gibi kuantum transportun geniş bir alanda uygulamasına sahiptir. $|m\rangle$ durumları, m yerlerindeki uyarmaları gösterir. Bu yer enerjileri ve iki sistem etkileşimleri sırasıyla, ϵ_m ve V_{mn} ile gösterilir. Bu yer enerjileri veya statik bozukluk, özdeş moleküllerin farklı yerel çevreleri veya tasarım aşamasındaki hatalar nedeniyle oluşmuştur (Rebentrost ve diğ., 2009).

2.5 Kuantum Algoritmaları

Bilgilerin bitler yerine kubitlerde saklandığı ve kuantum mekaniğinin geçerli olduğu bu ortamda kuantum algoritmaları işlem yaparken kuantum bitlerinin süperpozisyon özelliğini kullanmaktadır. 1980 ortalarından günümüze kadar geliştirilmiş algoritmalarından en ünlüleri Deutsch, Shor ve Grover algoritmalarıdır (McMahon, 2008; Ege, 2012).

İlk kuantum algoritması David Deutsch tarafından 1985 yılında geliştirilmiştir. Sadece tek bir kubit üzerinde işlem yapabilen Deutsch algoritması, günümüzde klasik algoritmaların işlem kapasitesinin sınırlarına dayandığı durumda kuantum algoritmalarının olağanüstü bir işlem hızıyla sonuca ulaşabildiğini kanıtlaması açısından hayli önemlidir. 1992 yılında yine David Deutsch ve Richard Josza tarafından genelleştirilen ve çok sayıda (n tane) kubit üzerinde işlem yapabilecek şekilde tekrar formüle edilen Deutsch-Jozsa algoritması daha sonraki yıllarda geliştirilen Shor ve Grover algoritmaları için temel olmuştur (Deutsch, 1992; Shor, 1994; Grover, 1997; Bellac, 2006; Oliviera ve diğ., 2007; McMahon, 2008; Ege, 2012).

Günümüzde laboratuvarlarda sadece bilimsel amaçlı deneyler için geliştirilen kuantum bilgisayarların test edilmesi için özellikle iki kuantum algoritması öne çıkmaktadır: Shor algoritması ve Grover algoritması. Shor algoritması 1994 yılında Peter Shor tarafından tekrar ele alınarak çok sayıda basamaktan oluşan sayıları kolaylıkla çarpanlarına ayırabilmektedir. Shor algoritmasının bu özelliği kriptoloji açısından çok büyük önem taşımaktadır, çünkü günümüzdeki şifreleme mekanizmaları çok büyük sayıların klasik bilgisayarlar tarafından kabul edilir bir zaman dilimi içerisinde çarpanlarına ayrılmasını mümkün kılmamaktadır. Laboratuvar ortamları için geliştirilmiş ve çok az sayıda kübite sahip kuantum

bilgisayarlar çok sayıda basamaktan oluşan sayıları çok çok kısa sürede çarpanlarına ayırabilmektedir (Shor, 1994; Ege, 2012).

Grover algoritması, L. Grover tarafından geliştirilen 'sıralı olmayan ve oldukça büyük sayıda elemana sahip veri tabanında arama yapan' bir algoritmadır (Grover, 1997; Turgut, 2003). 1996'da Grover algoritması veri tabanlarında aranan bir bilginin gerekli sorgulamanın çok detaylı bir şekilde formüle edilmesi gerekmeksizin hızlı bir şekilde bulunmasını sağlamaktadır. Grover Algoritması da diğer birçok kuantum algoritması gibi olasılık kuramı üzerinde çalıştığı için doğru cevabı bulabilmesi için veriler üzerinde çoğu zaman sadece bir kez değil, birçok defa çalıştırılması gerekebilmektedir, ancak bu işlem oldukça hızlı olduğundan klasik bilgisayarlara göre yine de üstündür (Ege, 2012).

Kuantum bilgi işleme süreçlerinde oldukça yaygın kullanılan Hadamard geçiti, kuantum dolanık durumları elde etmede, Grover'ın arama algoritmasında, Peter Shor'un çarpanlara ayırma algoritmasında ve diğer birçok algoritmalarda ve mantıksal bilgi işleme süreçlerinde kullanılmaktadır. Hadamard geçiti hem tek kübitli hem de çok kübitli yapılarda kullanılabilir. Eğer çok kübitli yapılarda kullanılmak isteniyorsa kübit sayısına göre genişletilmesi gerekir (Mermin, 2007). Kuantum bilgisayarlar için algoritmalar üzerine teorik olarak başarılı sonuçlar alınmıştır ve bu alandaki çalışmalara devam edilmektedir.

2.6 DiVincenzo Kriterleri

DiVincenzo, bir fiziksel sistemin kuantum bilgisayar olarak değerlendirilebilmesi için 5 kriter ortaya koymuştur (diVincenzo, 2000). Bu kriterler şu biçimde özetlenebilir:

1. Kuantum işleme sürecinin iyi ifade edilebilmesi için, bir fiziksel sistemin tam tanımlı ve iyi ifade edilmiş kübitlere sahip olan ölçeklenebilir sistem olması gerekir.
2. Kuantum bilgi işleme sürecinden önce sistemin ilk durumu belirlenirken, kübitlerin durumlarının sağlam dayanakları olan $|0000 \dots 00\rangle$ gibi bir taban durumdan başlaması gerekir.
3. Sistemdeki etkileşimlerin gözlenebilmesi için en azından çalışma süresinden daha uzun olan uzun durulma zamanına sahip olması gerekir.
4. Evrensel kuantum geçitlerine sahip olması gerekir.

5. Kübite üzerine dayalı ölçme yeteneği olmalıdır ve istenildiğinde her kübit için ayrı sonuç bulunabilmelidir.

Kriterlerden görüldüğü üzere DiVincenzo bu kriterleri kübit sistemler için oluşturmuştur. Ancak kuantum mekaniği sadece kübit sistemlerle sınırlı olmadığından bu kriterlerin kutrit gibi iyi tanımlı başka spin sistemlerine de genelleştirilmesi uygun olacaktır. Bu çalışma sözü geçen kriterleri esas alarak kutrit sistemler üzerine yapılmıştır.

2.7 EPR Spektroskopisi

Atom ve Molekül Fiziğinde farklı spektroskopik yöntemlerle atomun iç yapısı hakkında bilgi elde edilebilir. Elektromanyetik dalga ile etkileşim halindeki bir madde, üzerine düşen çeşitli dalga boylarındaki radyasyonun bazılarını soğurur ve bu özelliğinden yararlanılarak maddenin iç yapısı hakkında spektroskopik tekniklerle bilgi elde edilmektedir. Elektron Paramanyetik Rezonans (EPR), çeşitli ortamlarda tuzaklanan serbest radikaller ve paramanyetik merkezlerin yapısı hakkında bilgi edinmede kullanılan en güçlü spektroskopik yöntemidir.

EPR spektroskopisi Rus Fizikçi Zavoisky tarafından 1945'te keşfedildi ve kısa süre içinde çok sayıda uygulama alanı buldu. Sahip olduğu yetenekleri nedeniyle kısa sürede yaygınlaştı. Uygulama alanlarından bazıları şöyle verilebilir: Polimer özelliklerinin belirlenmesi, radikalik reaksiyonların kinetiği, canlı dokulardaki paramanyetik ajanların ve radikallerin belirlenmesi, arkeolojik yaş tayini, dozimetre uygulamaları, ışınlanmış gıdalarda oluşan paramanyetik bozuklukların belirlenmesi, tek kristallerde kristal alanların yapılarının incelenmesi ve farmosotiklerde oluşabilecek serbest radikaller, yüksek enerjili radyasyona maruz kalmış maddelerdeki paramanyetik bozukluklar, geçiş metal iyonlarıyla katkılanmış bileşik veya kompleksler, nokta kusurları, renk merkezleri, biradikaller.

EPR tekniği ile gaz, sıvı, katı (amorf, camsı, toz ve kristal) maddenin incelenmesi ilave donanıma gerek duyulmadan, aynı donanımla ya da küçük çaplı donanım değişiklikleriyle yapılabilmektedir.

EPR spektroskopisi atom ya da molekülde eşlenmemiş bir elektronun manyetik dipol momentinin durum değiştirmesini esas alır. Paramanyetik maddeler, atomik ya da moleküler yörüngelerinden birisinde eşlenmemiş elektron bulunduran, dolayısıyla manyetik momente sahip yapılardır. Serbest ortamda rastgele yönelen eşlenmemiş elektronların spinleri manyetik alana konulduklarında alana paralel veya antiparalel

olarak yönelirler. Bu iki durum arasındaki enerji seviyesine denk bir uyarma bu iki durum arasında geçiş meydana getirebilir (Atherton, 1973; Carrington, 1974; Weil ve diğ., 1993).

EPR geçişleri mikrodalga bölgesindedir, enerji mertebesi yaklaşık $4 \mu\text{eV}$ (~ 300 mm) ile $400 \mu\text{eV}$ (~ 3 mm) aralığındadır ve sadece elektron spininin durumları arasındaki geçişlerle ilgilenmektedir, yörüngeler arası ve çekirdek spinleri arası geçiş yaptıramaz. EPR geçişlerinde, dışarıdan uygulanan manyetik alanın yanında paramanyetik merkezin çevresinde bulunan spini sıfırdan farklı olan çekirdeklerin oluşturduğu yerel manyetik alan da etkilidir. Bu etkileşmeler EPR çalışmalarında eşlenmemiş elektronun yörüngesi ve etkileştiği çekirdekler hakkında ayrıntılı bilgiler verir.

EPR spektroskopisinde radikaller ve paramanyetik geçiş metal iyonlarının oluşturduğu çeşitli yapılar yanında diamanyetik olan kimyasal bileşiklerin çeşitli fiziksel ve kimyasal yöntemlerle paramanyetik hale getirilmiş maddeler de incelenebilir. Radikal oluşturmak için bu yöntemlerden bazıları gama ve x-ışınları ile ışınlama (radyoliz), mor-ötesi ışınlarla ışınlama (fotoliz), yüksek enerjili parçacıklara maruz bırakma, sıcaklık ve basınç, gaz fazında elektrik boşalması gibi yöntemlerdir.

Kristal içine geçiş metal iyonları katkılılandırıldığında yapı içinde paramanyetik merkezler oluştururlar ve oluşan paramanyetik merkezin özelliği EPR tekniği ile belirlenebilir. Eğer paramanyetik merkezin spin Hamiltonien parametreleri belirlenebilirse bu parametreler kullanılarak paramanyetik merkezin yerel simetrisi ve elektronik yapısı hakkında bilgi edinilebilir (Abragam ve Bleaney, 1970; Tapramaz, 1991; Weil ve Bolton, 1993).

Eşlenmemiş elektronun spininden dolayı, kartezyen eksen sisteminin z eksenini doğrultusunda yönelmiş olan manyetik alan içerisindeki etkileşme Hamiltonieni,

$$\hat{H} = g\beta \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} \quad (2.47)$$

olur. Manyetik alan z eksenini yönünde seçildiğinden (tanımlı yön), elektron spinini z eksenini boyunca kuantumlanacaktır. Elektron $S = 1/2$ spin değerine sahip olup z eksenini üzerinde bileşenleri M_S ile gösterilir, $M_S = -S$ 'den $+S$ 'ye kadar değerler alacaktır. Spinin manyetik alan yönündeki bileşeni S_z 'nin kuantum değerleri $M_S = \pm 1/2$ şeklinde iki değer alır. Bu değerler, B_0 ; z doğrultusundaki dış manyetik alan şiddeti olmak üzere,

$$E_{M_S} = g\beta B_0 M_S \quad (2.48)$$

olarak tanımlanır ve yerine konulursa,

$$E_{1/2} = \frac{1}{2}g\beta B_0 \text{ ve } E_{-1/2} = -\frac{1}{2}g\beta B_0 \quad (2.49)$$

olur. Bu iki durum arasındaki enerji farkı,

$$\Delta E = E_{1/2} - E_{-1/2} = g\beta B_0 \quad (2.50)$$

olur. Bu iki düzey arasında geçiş olabilmesi için elektrona h plank sabiti, ν frekans olmak üzere $\Delta E = h\nu$ enerjili bir elektromanyetik dalga gönderilmelidir. Böylece denklem, $h\nu = g\beta B_0$ olur. Bu ifade EPR spektroskopisinin temel şartını oluşturur. EPR'de geçiş gözlenebilmesi için bu şart sağlanmalıdır. Serbest elektron için $g = 2,0023$ olup $\nu = 9,5$ GHz frekanslı bir mikrodalga için EPR geçişi $B_0 = 338$ mT alanda gözlenir (Assenheim, 1966; Atherton, 1973; Weil ve diğ., 1993).

Spektroskopik yarıma faktörü ya da Lande g faktörü olarak bilinen g değeri,

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (2.51)$$

ifadesiyle verilir. İfadede L yörüngesel açısal momentum, S spin açısal momentumu ve $J=L+S, \dots, L-S$ toplam açısal momentum kuantum sayılarını göstermektedir. Eğer manyetik momentin kaynağı salt yörüngesel açısal momentum ise $S = 0$ ve $J = L$ olacağından $g = 1$ değerini alır; eğer kaynak salt spin ise bu defa $L = 0$ ve $J = S$ olacağından $g = 2$ değerini alacaktır. Öte yanda elektronun bağlı hareketinden dolayı serbest bir elektron için $g = 2,0023$ olarak ölçülmektedir. Ancak manyetik momente hem spinden ve hem de yörüngeden katkı geldiğinden g bulunduğu merkezin karakteristik değerini yansıtan yaklaşık 2 ile 4 (hatta Fe^{3+} gibi bazı yapılarda 6) arasında bir değer alacaktır.

EPR spektroskopisinde gözlenen ve spektrumu etkileyen temel etkileşimler, diğer ifadeyle enerji Hamiltonieni Denklem 2.52 ile verilmiştir,

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \beta \mathbf{S} \cdot \mathbf{g} \cdot \mathbf{B} - \beta_N \sum_k g_{Nk} \mathbf{B} \cdot \mathbf{I}_k + \mathbf{S} \cdot \sum_k \mathbf{A}_k \cdot \mathbf{I}_k \\ & + \xi \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} + \mathbf{S} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{S} + \mathbf{I} \cdot \mathbf{P} \cdot \mathbf{I} + eQ\mathcal{H}_{cryst} \end{aligned} \quad (2.52)$$

Hamiltoniende birinci terim elektron zeeman etkileşme terimidir; eşlenmemiş elektron spini ile dış manyetik alan arasındaki etkileşmeyi temsil eder ve yukarıda da

verildiği üzere temel terimdir. Bu ifadeye g değeri, paramanyetik merkezin yönelimine bağlı olduğundan tensör olarak alınmıştır.

İkinci terim çekirdek zeeman etkileşmesidir. Eşlenmemiş elektron ile ilişkili bütün atomların dış manyetik alan ile etkileşmesini temsil eder.

Üçüncü terim aşırı ince yapı etkileşmesidir ve eşlenmemiş elektron ile ilişkili tüm atomların çekirdek spinleri ile eşlenmemiş elektron spini arasındaki etkileşmeleri temsil eden terimdir. İkinci derecede baskın terim bu terimdir ve geçiş çizgilerinde yarılmaların nedenidir.

Dördüncü terim spin–yörünge etkileşmesidir. Eşlenmemiş elektronun spini ile bağlı olduğu yörünge arasındaki etkileşmeyi temsil eder. Etkileşme g değerindeki değişimlerin esas kaynağıdır.

Beşinci terim spin–spin dipolar etkileşme terimidir. Paramanyetik yapı içinde iki eşlenmemiş elektron varsa bu terim iki elektron arasındaki dipolar etkileşmeyi temsil eder. Dipolar etkileşme aşırı ince yapı etkileşmesi ile aynı mertebede spektrumu etkiler.

Altıncı terim çekirdek dört kutup (nükleer quadropole) etkileşmesini temsil eder. Nadirde olsa bazı yapılarda gözlenebilir etki oluşturan bir etkileşmedir.

Yedinci terim kristal alan yarılmasını temsil eder. Paramanyetik merkezin simetrisine bağlı olan etkileşmeler, ki bunlardan bilinen etkileşme site (yer) yarılmasıdır (Assenheim, 1966; Atherton, 1973; Weil ve diğ., 1993).

Bu çalışmada Hamiltoniende; elektron zeeman, çekirdek zeeman, birinci ve ikinci mertebeden aşırı ince yapı etkileşmeleri ve spin–spin dipolar etkileşme terimi esas alınmıştır.

2.7.1 Pulsu EPR spektroskopisi

EPR ve NMR spektroskopik teknikleri başlangıçta küçük moleküllerin yapılarının tayininde kullanılmakta iken geliştirilen puls EPR ve puls NMR yöntemleriyle çok daha büyük moleküllerin yapıları hakkında bilgi edinilmeye başlanmıştır. Puls EPR deneyleri 1960 yılında Bill Mims tarafından çalışılmaya başlanmıştır (Schweiger ve Jeschke, 2001).

Puls EPR tekniğinde, durgun manyetik alan B_0 'a zamanla değişmeyen mikro dalga pulsu B_1 eklenmiş, bu uygulanan pulsularla manyetizasyon altüst edilmiş ve dengeye dönüşleri izlenerek uygulanan pulsun manyetizasyona etkisi gözlenmiştir (Schweiger ve Jeschke, 2001; Kurak, 2006). Manyetik alan pulsu ile kararlı hali

bozulan spin sistemi pulstan sonra aldığı enerjiyi spin–spin ve spin–örgü etkileşmeleri yoluyla geri vererek kararlı hale döner. Bu sırada yaydığı enerji zamana göre değişen Serbest İndüksiyon Bozunması SİB (Free Induction Decay, FID) sinyalini oluşturur. Bu sinyalin Fourier dönüşümü frekans uzayındaki spektrumu verecektir.

2.7.2 Dönen RF sistemleri ve dipol momenti

Schrödinger denklemi, ket durumu için,

$$\frac{d}{dt} |\psi\rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} |\psi\rangle \quad (2.53)$$

ve çözümü,

$$|\psi\rangle = A e^{-i\hat{H}t/\hbar} \quad (2.54)$$

olacaktır. Benzer biçimde bra durumu için çözümü,

$$\langle\psi| = B e^{i\hat{H}t/\hbar} \quad (2.55)$$

olacaktır. Yoğunluk matrisinin tanımından,

$$\rho(t) = |\psi\rangle\langle\psi| = e^{-i\hat{H}t/\hbar} A B e^{i\hat{H}t/\hbar} \quad (2.56)$$

bulunur. Başlangıç durumu $\rho(0) = A B$ alınırsa puls süresi boyunca zamandan bağımsız yoğunluk matrisi laboratuvar koordinat sisteminde,

$$\rho(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar} \rho_0^{Lab} e^{i\hat{H}t/\hbar} \quad (2.57)$$

halini alacaktır. Baştaki denklem uniter dönme işlemci cinsinden yazılırsa, yani $\hat{R} = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ alınırsa,

$$\rho(t) = \hat{R} \rho_0^{Lab} \hat{R}^\dagger \quad (2.58)$$

olur. İfadede $\omega = \frac{\hat{H}}{\hbar}$; burada NMR için radyo frekans (rf) ve EPR için mikrodalga (mw) bölgesinde açısal frekanstır. Laboratuvar koordinat sisteminde etkin Hamiltonien,

$$\hat{\mathcal{H}}_{etik} = -\hbar(\omega_L - \omega)\hat{S}_z - \hbar\omega_\alpha\hat{S}_\alpha \quad (2.59)$$

olacaktır. İfadede ω_L laboratuvar sistemindeki frekans, ω dönen koordinat sistemindeki frekans ve ω_α dönme eksenini dışındaki (x veya y eksenini) etrafındaki

frekans bileşenidir ($\alpha = x, y$). Eğer z eksenini etrafında dönen rf veya mw koordinat sistemine dönüşüm yapılırsa etkin Hamiltonien sadece,

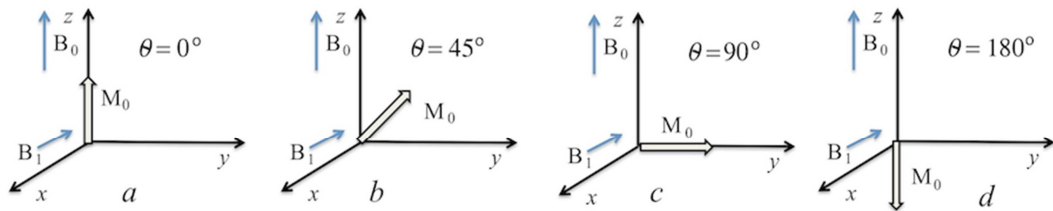
$$\hat{\mathcal{H}}_{etk} = -\hbar\omega_{\alpha}\hat{S}_{\alpha} \quad (2.60)$$

halini alacaktır (Schweiger ve Jeschke, 2001; Oliviera ve diğ., 2007). İfade daha açık biçimde, B_1 dönme manyetik alan pulsunun genliği ve $\gamma = g\beta = 1.760859 \times 10^{11}$ rad/T · s jromanyetik sabit olmak üzere $\omega_{\alpha} = g\beta B_1/\hbar = \gamma B_1/\hbar$ yazılabilir. Bir adım daha ileri giderek ω puls frekansı $\omega = \omega_p$ ve puls süresi t_p olarak yeniden tanımlanabilir ve frekansla puls süresinin çarpımı açığı, yani dönme işlemcisinin açısı olan $\theta = \omega_p t_p$ açısını verecektir. Sonuçta dönme işlemcisi,

$$\hat{R} = e^{-i\theta\hat{S}_{\alpha}} \quad (\alpha = x, y) \quad (2.61)$$

halini alacaktır. Dönme işlemcisinin değerlendirilmesi Materyal ve Metot ile Bulgular ve Tartışma bölümlerinde yapılmıştır.

Spektroskopik uygulamalar her ne kadar tek bir spini esas alarak konuya yaklaşırsa da gerçekte olay aynı biçimde davranan çok fazla sayıda spinden kaynaklanmaktadır. Bu yüzden özellikle pulslu NMR ve EPR spektroskopilerinin teorik esasları Bloch denklemlerine dayandırılır. Bloch denklemleri mıknatıslanma (manyetizasyon) üzerine kuruludur. Mıknatıslanma \mathbf{M}_0 , birim hacimdeki manyetik dipol sayısıdır ve vektördür. Şekil 2.9; 45° , 90° ve 180° pulslarının manyetizasyon vektörünün dönmesini şematik olarak göstermektedir. Şekil 2.10 ise kararlı haldeki bir sisteme 90° puls uygulandıktan sonraki aşamaları göstermektedir.

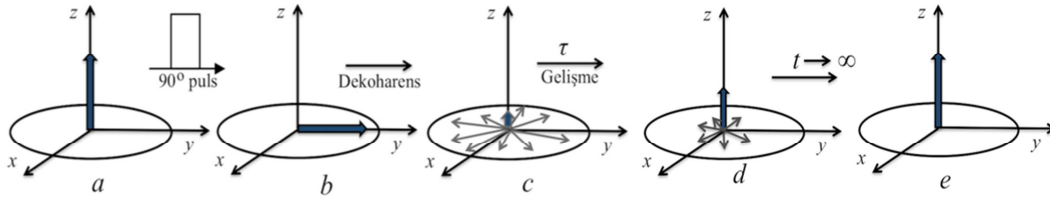


Şekil 2.9. B_1 alanının uygulanma süresi t_p 'ye göre \mathbf{M}_0 mıknatıslanma vektörünün durumu: a) $\theta = 0^\circ$ b) $\theta = 45^\circ$ c) $\theta = 90^\circ$ d) $\theta = 180^\circ$

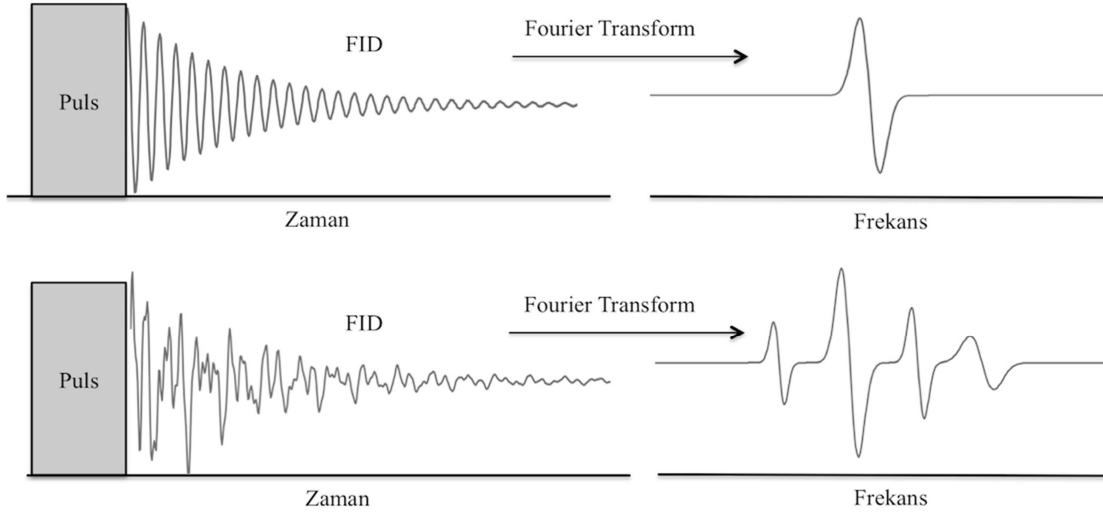
Esas manyetik alan altında manyetizasyon vektörü z eksenini doğrultusunda kararlı haldeyken x eksenini etrafında manyetizasyonu θ açısı kadar döndüren bir puls verilirse manyetizasyon vektörü y eksenine doğru yatar. Bir süre sonra manyetizasyonun elemanları olan dipol momentleri birbirinden ayrılmaya başlar ve x - y düzleminde izdüşümleri dağılır ve karakteristik τ süresi ile tanımlanan zaman

içinde tekrar kararlı hale döner. Bu aşama dekoharens (uyumsuzluk) veya gelişme süreci olarak isimlendirilir.

Manyetizasyon vektörü ya da dipol momentler uygulanan pulstan aldıkları enerjiyi çevresindeki örgüye (spin-örgü durulma zamanı, T_1) ve komşu spinlere (spin-spin durulma zamanı, T_2) aktararak kararlı hale geri dönerler. Bu sırada dipol momentlerinin yayınladıkları sinyal bir detektör ile algılanabilir. Bu sinyal üstel sönümlü sinüsel bir sinyal olacaktır (SİB ya da FID, Şekil 2.11). Eğer incelenen yapıda tek bir tür dipol momentleri varsa FID düzgün sönün bir sinüsel sinyal olacaktır, fakat yapıda farklı dipoller varsa girişim nedeniyle sinyal yine sönümlü fakat düzgün sinüsel olmayacaktır. Zaman uzayında gerçekleşen bu sinyaller kaydedilerek Fourier dönüşümü alınırsa frekans uzayındaki spektrum elde edilir ki çözümlenen spektrum budur.



Şekil 2.10. Bir puls deneyinin aşamaları. a) Dış manyetik alan manyetizasyon vektörünü z eksenine doğrudur b) Sistem kararlı haldeyken x eksenini etrafında döndüren bir 90° puls uygulanırsa manyetizasyon vektörü y eksenine döner c) Manyetizasyonu oluşturan dipoller x-y düzleminde dağılmaya başlar (dekoharens) d) τ süresi kadar sonra dipoller tekrar z eksenine doğrudur (gelişme veya durulma süresi) e) Yeteri kadar bekledikten sonra manyetizasyon vektörü başlangıçtaki haline döner



Şekil 2.11. Üst şekil: Bir pulstan sonra elde edilen FID sinyali ve Fourier dönüşümü (sağda). Frekans uzayındaki spektrumda tek bir geçiş gözlenmektedir. Altteki şekil: Bir pulstan sonra kaydedilen FID sinyalinin Fourier dönüşümü dört farklı frekansta geçiş olduğunu göstermektedir. Frekans uzayı spektrumları (sağda) EPR spektroskopisine uygun olarak birinci türev eğrisi olarak çizilmiştir

2.8 Elektron Nükleer Double Rezonans (ENDOR) ve Pulslu ENDOR

Elektron nükleer double rezonans (ENDOR) paramanyetik türlerin ayrıntılı moleküler ve elektronik yapılarını elde etmek için kullanılan manyetik rezonans tekniğidir. Çekirdeğin spin geçişlerinin gözlemlendiği ENDOR tekniğini ilk defa 1956 yılında katılara uygulayan Feher olmuştur (Feher, 1956). Sonra Hyde ve Maki bu tekniği radikal çözeltilerine uygulamışlar ve sıvı ENDOR'un temellerini atmışlardır (Hyde ve Maki, 1964).

2.8.1 ENDOR spektroskopisinin temelleri

EPR ve NMR spektroskopilerinin fiziksel esasları birbirine benzerdir. NMR'da kimyasal kayma ve spin spin çiftlenimi, EPR'de ise g değeri ve eşlenmemiş elektronun çekirdek spinleri ile etkileşimini gösteren aşırı ince yapı etkileşmesi vardır. Bu ikisinin birleşimi olan ENDOR spektroskopisi, elektron spininin mikrodalga ile ve çekirdek spininin radyo frekansı ile eş zamanlı ışınlanmasını gerektirmektedir. NMR'da spin spin çiftlenimi genellikle molekülün küçük bir kısmındaki çekirdeklerle sınırlı iken, EPR'de ise eşlenmemiş elektronlar bütün çekirdek spinleri ile aşırı ince yapı etkileşmesi yaptığı için EPR spektrumlarında oldukça fazla yarılmalara olur. Böylece büyük radikallerin incelenmesi, fazla sayıda

çizgilerin olması ve üst üste gelmeler nedeniyle EPR'de pek mümkün değildir. Böyle bir durumda EPR ile NMR'ın birleşmesinden oluşan ENDOR tekniği devreye girmelidir.

ENDOR tekniğinin çalışma ilkesi sürekli dalga spektroskopisinde oldukça basittir. Önce normal bir EPR spektrumu alınır. Sonra herhangi bir geçiş çizgisinin hangi çekirdek spininden kaynaklandığını belirlemek için o çizgi üzerinde manyetik alan sabitlenir ve numuneye yüksek güçte mikrodalga enerjisi yollanarak elektron rezonansı doyma durumuna sürüklenerek sürekli uyarılmış durumda olması sağlanır. Bu şart altında NMR spektrumu alınır. ENDOR tekniği EPR spektroskopisinde hangi çekirdek spininden kaynaklandığı bilinmeyen çizgilerin kaynağının belirlenmesinde oldukça etkilidir. ENDOR spektrumu EPR spektrumu ile karşılaştırıldığında, spektrumların karışıklığını azaltarak, çözünürlüğünü artırır (Atherton, 1973; Kurreck ve diğ., 1988; Weil ve diğ., 1993).

Bir elektronla, bir çekirdeğin B_0 dış manyetik alan içindeki uygun spin Hamiltonien ifadesi:

$$\mathcal{H} = g\beta \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} - g_N\beta_N \mathbf{B} \cdot \mathbf{I} + \mathbf{I} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{S} + \mathcal{H}_Q \quad (2.62)$$

olarak verilir. Bu denklemde terimler elektron ile dış manyetik alan arasındaki elektron zeeman etkileşmesi, çekirdek ile dış manyetik alan arasındaki nükleer zeeman etkileşmesi, elektron ile çekirdek spinleri arasındaki aşırı ince yapı etkileşmesi ve nükleer kuadrupol etkileşmesidir ve çoğu durumda gözardı edilir.

B_0 dış manyetik alanı z yönünde alınıp diğer bileşenler küçük olduğu için gözardı edilirse Hamiltonien,

$$\mathcal{H} = g\beta B_0 S_z - g_N\beta_N B_0 I_z + a S_z I_z + \frac{1}{2} a (S_+ I_- + S_- I_+) \quad (2.63)$$

olacaktır. Hamiltonienin matris temsili $|S, M_S; I, M_I\rangle$ veya yazımda ekonomi için $|M_S, M_I\rangle$ bazında yazılabilir. Anlaşılabilir olması bakımından $S = 1/2$ ve $I = 1/2$ spin sistemi alınır Hamiltonien matrisi Çizelge 2.6'da verildiği gibi olacaktır. Verilen Hamiltonien ve matrisi gerçekte bir EPR sistemi ile aynıdır. Matrisin özdeğerleri ve özvektörleri Denklem 2.64'te verilmiştir. Denklem 2.64'te verilen ifadelerde karekök içindeki ifadeleri yaklaşık doğrusal hale getirmek için karekökler Binom serisine[†] açılarak ilk birkaç terim alınır.

[†] [Binom seri açılımı: $(1 + x)^{1/2} = 1 + \frac{x}{2} - \frac{x^2}{8} + \frac{x^3}{16} \dots$; $x = \frac{a^2}{(g\beta + g_N\beta_N)^2 H_0^2}$]

ENDOR deneyinde ikinci aşamada NMR geçişi yaptırılacağından, yani radyo frekansı uygulandığında seçim kuralları $\Delta M_s = 0$ ve $\Delta M_I = \pm 1$ ile izinli geçişler ikinci mertebeye kadar NMR spektroskopisine uygun biçimde frekans biriminde yazılabilir, Denklem 2.65 ve 2.66. Elde edilen bu ifadelerle göre hem EPR ve hem de NMR geçişleri birlikte şema olarak gösterilebilir, Şekil 2.12.

2.8.2 Pulslu ENDOR

Sürekli dalga ENDOR tekniğinde mikrodalga (mw) ve radyo frekansı (rf) aynı anda sürekli olarak uygulanır. Puls ENDOR deneyi de buna çok benzer. Önce EPR spektrumu alınır ve ilgili geçiş çizgisi üzerinde numune mikrodalga ile doyuma sürüklenir, peşinden ENDOR pulsarı uygulanarak kaydedilen FID sinyalinin Fourier dönüşümü alınarak NMR spektrumu elde edilir.

Puls ENDOR deneyinde EPR sürekli dalga veya puls olabilir, önemli olan çözümlenecek olan EPR geçiş çizgisinin üzerinde rezonansı sabit tutup mikrodalga ile numuneyi doyuma sürüklemektir. Bundan sonra numune üzerine temel iki ENDOR puls dizisinden birisi veya ard arda her ikisi de uygulanarak spektrum alınır. Kullanılan iki puls dizisi son derece sade olan Mims ve Davies puls dizileridir (Mims, 1965; Davies, 1974). Her iki puls dizisi de benzer yapıdadır. Önce EPR geçişi doyuma sürüklenirken uygulanan rf pulsarı ile NMR geçişleri yaptırılır ve oluşan eko sinyalleri kaydedilerek yarısının Fourier dönüşümü alınır ve spektrum elde edilir (çünkü eko sinyalleri önce üstel yükselen sonra üstel azalan FID sinyalleridir), Şekil 2.13 ve 2.14.

Çizelge 2.6. S=1/2 ve I=1/2 spin sistemi için Hamiltonien gösterimi

$\langle M_s M_I \mathcal{H} M'_s M'_I \rangle$	$\left \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$	$\left \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$	$\left -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$	$\left -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$
$\left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right $	$\frac{1}{2}(g\beta - g_N\beta_N)H_0 + \frac{1}{4}a$	0	0	0
$\left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right $	0	$\frac{1}{2}(g\beta + g_N\beta_N)H_0 - \frac{1}{4}a$	$\frac{1}{2}a$	0
$\left\langle -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right $	0	$\frac{1}{2}a$	$-\frac{1}{2}(g\beta + g_N\beta_N)H_0 - \frac{1}{4}a$	0
$\left\langle -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right $	0	0	0	$-\frac{1}{2}(g\beta - g_N\beta_N)H_0 + \frac{1}{4}a$

$$E_1 = \frac{1}{2}(g\beta - g_N\beta_N)H_0 + \frac{1}{4}a$$

$$\psi_1 = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$E_2 = -\frac{1}{4}a + \frac{1}{2}\sqrt{(g\beta + g_N\beta_N)^2 H_0^2 + a^2} = \frac{1}{2}(g\beta + g_N\beta_N)H_0 - \frac{a}{4} + \frac{a^2}{2(g\beta + g_N\beta_N)H_0} - \dots$$

$$\psi_2 = c_1 \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + c_2 \left| -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$$

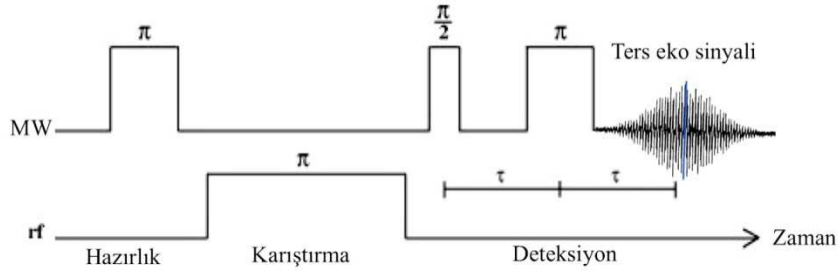
(2.64)

$$E_3 = -\frac{1}{4}a - \frac{1}{2}\sqrt{(g\beta + g_N\beta_N)^2 H_0^2 + a^2} = -\frac{1}{2}(g\beta + g_N\beta_N)H_0 - \frac{a}{4} - \frac{a^2}{2(g\beta + g_N\beta_N)H_0} + \dots$$

$$\psi_3 = c_3 \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + c_4 \left| -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$E_4 = -\frac{1}{2}(g\beta - g_N\beta_N)H_0 + \frac{1}{4}a$$

$$\psi_4 = \left| -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$$



Şekil 2.14. Davies ENDOR puls dizileri

2.9 Radikal Çiftleri ve Spin-Spin Dipolar Etkileşme

Katılarda radikaller çiftler halinde tuzaklanabilmektedir. Bu durumda çiftler arasında spin-spin etkileşmesi ve değiş-tokuş etkileşmesi olur. Değiş-tokuş enerjisinin diğer etkileşmelerle karşılaştırıldığında dikkate alınmayacak kadar küçük olduğunu varsayarsak, aralarında r uzaklığı olan iki spin arasında dipolar etkileşme Hamiltonieni klasik elektromanyetik teoriden ödünç alınarak yazılabilir (Denklem 2.67).

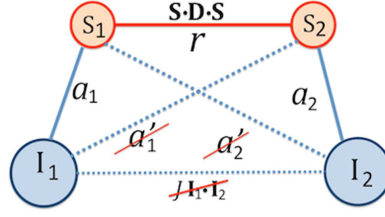
$$\hat{\mathcal{H}}_d = g^2 \beta^2 \left[\frac{\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2}{r^3} - \frac{3(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{r})(\mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{r})}{r^5} \right] \quad (2.67)$$

Aralarında r uzaklığı olan eşlenmemiş iki elektron spinleri çiftlenerek toplam spini oluşturur; spinlerin vektör toplamı ve karesi;

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 \quad \text{ve} \quad \mathbf{S}^2 = (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2 = \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2 \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \quad (2.68)$$

olacaktır. $\mathbf{S}_1 = \mathbf{S}_2 = \frac{1}{2}$ ve $\mathbf{S}_1^2 = \mathbf{S}_2^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right)$ alınarak,

$$2 \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = \mathbf{S}^2 - \frac{3}{2} \quad (2.69)$$



Şekil 2.15. Dipolar etkileşmenin temsili. Üzeri çizili etkileşmeler Hamiltoniende dikkate alınmamıştır

sonucu bulunacaktır. Bu tanımlarla birlikte spin vektörleri açık biçimde

$$\begin{aligned}
 \mathbf{S}_1 &= S_{1x}\hat{i} + S_{1y}\hat{j} + S_{1z}\hat{k} \\
 \mathbf{S}_2 &= S_{2x}\hat{i} + S_{2y}\hat{j} + S_{2z}\hat{k} \\
 \mathbf{r} &= x\hat{i} + y\hat{j} + z\hat{k} \\
 r^2 &= x^2 + y^2 + z^2
 \end{aligned} \tag{2.70}$$

alınıp, denklem düzenlenirse açık biçimde,

$$\begin{aligned}
 \hat{\mathcal{H}}_d &= \frac{1}{2}g^2\beta^2 \left[\frac{r^2-3x^2}{r^5} \hat{S}_x^2 + \frac{r^2-3y^2}{r^5} \hat{S}_y^2 + \frac{r^2-3z^2}{r^5} \hat{S}_z^2 - \frac{3xy}{r^5} (\hat{S}_x\hat{S}_y + \hat{S}_y\hat{S}_x) - \right. \\
 &\quad \left. \frac{3yz}{r^5} (\hat{S}_y\hat{S}_z + \hat{S}_z\hat{S}_y) - \frac{3zx}{r^5} (\hat{S}_z\hat{S}_x + \hat{S}_x\hat{S}_z) \right]
 \end{aligned} \tag{2.71}$$

olarak yazılır. Bu ifade tensör biçiminde de yazılabilir,

$$\hat{\mathcal{H}}_d = [S_x \quad S_y \quad S_z] \begin{bmatrix} \frac{r^2-3x^2}{r^5} & -\frac{3xy}{r^5} & -\frac{3zx}{r^5} \\ -\frac{3xy}{r^5} & \frac{r^2-3y^2}{r^5} & -\frac{3yz}{r^5} \\ -\frac{3zx}{r^5} & -\frac{3yz}{r^5} & \frac{r^2-3z^2}{r^5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_x \\ S_y \\ S_z \end{bmatrix} \tag{2.72}$$

ya da ifade kısaca,

$$\mathcal{H} = \mathbf{S}^T \cdot \bar{\bar{\mathbf{D}}} \cdot \mathbf{S} \tag{2.73}$$

olarak gösterilir. İfadede $\bar{\bar{\mathbf{D}}}$ Denklem 2.73'de verilen dipolar etkileşme tensörüdür. Tensör için $\text{İz}(\bar{\bar{\mathbf{D}}}) = D_{xx} + D_{yy} + D_{zz} = 0$ olduğu görülmektedir. Bu tensör simetrik ve gerçeldir, izi sıfırdır; bunun anlamı dipolar etkileşmenin ortalama değerinin sıfır olduğu ve sıvı ortamlarda veya hareketli yapılarda dipolar etkileşmenin gözlenemeyeceğidir.

Genel bir ifade olarak dipolar etkileşme tensör elemanları,

$$D_{ij} = \frac{1}{2}g^2\beta^2 \left\langle \frac{r^2\delta_{ij} - 3ij}{r^5} \right\rangle \tag{2.74}$$

olarak da yazılabilir. $\bar{\mathbf{D}}$ tensörü köşegen olduğu sistemde ele alınarak köşegen elemanlar D_{xx} , D_{yy} ve D_{zz} olarak tanımlanırsa, D dipol–dipol arası doğrultuya paralel olan, yani eksensel bileşen ve buna dik düzlemdeki bileşenler de ekvatorial bileşen E alınıp,

$$D = \frac{3}{2}D_{zz} \text{ ve } E = \frac{1}{2}(D_{xx} - D_{yy}) \quad (2.75)$$

biçiminde tanımları yapılarak dipolar Hamiltonien,

$$\hat{\mathcal{H}}_d = D \left[\hat{S}_z^2 - \frac{1}{3}S(S+1) \right] + E \left(\hat{S}_+^2 + \hat{S}_-^2 \right) \quad (2.76)$$

biçiminde yazılabilir. Hamiltoniende baskın olan elektron zeeman, dipolar etkileşme ve iki çekirdekten kaynaklanan aşırı ince yapı etkileşme terimleri alınır Hamiltonien,

$$\hat{\mathcal{H}} = g\beta B_0 \hat{S}_z + D \left[S_z^2 - \frac{1}{3}S(S+1) \right] + \frac{E}{2}(S_+^2 + S_-^2) + a_1 S_z I_{1z} + a_2 S_z I_{2z} \quad (2.77)$$

olarak bulunacaktır. Hamiltoniende çekirdek zeeman terimleri, $g_N \beta_N B_0 (I_{1z} + I_{2z})$, ve aşırı ince yapı etkileşmelerinin x - y düzlemindeki ekvatorial bileşenleri, $a_1 (S_x I_{1x} + S_y I_{1y}) + a_2 (S_x I_{2x} + S_y I_{2y})$, çok küçük olduğundan dikkate alınmamıştır. Bu yaklaşımdan sonra $|S, M_S\rangle$, (triplet durum için $S = 1$ için $M_S = (1, 0, -1)$), durum fonksiyonu bazında Hamiltonien matrisi oluşturulur (Çizelge 2.7). Singlet durumun enerjisi sıfır olacağından bir katkı getirmeyecektir ve burada dikkate alınmayacaktır.

Bu enerjiler arasında $\Delta M_S = \pm 1$ seçim kuralına uyan izinli geçişler,

$$\Delta \mathcal{E}_{1-2} = \mathcal{E}_1 - \mathcal{E}_2 = \sqrt{(B_{m_1, m_2} + a_1 m_1 + a_2 m_2)^2 + E^2 + D} = h\nu \quad (2.78)$$

$$\Delta \mathcal{E}_{2-3} = \mathcal{E}_2 - \mathcal{E}_3 = \sqrt{(B_{m_1, m_2} - a_1 m_1 - a_2 m_2)^2 + E^2 - D} = h\nu \quad (2.79)$$

olacaktır. Enerji biriminde olan bu ifadeler, EPR spektroskopisine uygun biçimde geçiş manyetik alan değerleri için yazılabilir. Bunun için $B_{m_1, m_2} = g\beta B_0$ yerine konulur ve ifadeler B_0 için yeniden düzenlenirse dipolar etkileşmeden kaynaklanan iki temel manyetik alan değerleri bulunur;

$$B_{m_1, m_2} (1 - 2) = \frac{1}{g\beta} \sqrt{(h\nu - D)^2 - E^2} - m_1 a_1 - m_2 a_2 \quad (2.80)$$

$$B_{m_1, m_2} (2 - 3) = \frac{1}{g\beta} \sqrt{(h\nu + D)^2 - E^2} + m_1 a_1 + m_2 a_2 \quad (2.81)$$

Bu ifadelere göre iki eşlenmemiş elektronun bağlı olduğu çekirdek spinleri $I_1 = 0$ ve $I_2 = 0$ ise dipolar etkileşmeden ötürü sadece iki çizgi gözlenir.

Çekirdeklerin spinleri ve aşırı ince yapı değerlerine göre her iki dipolar etkileşme tek bir eşlenmemiş elektron olması durumundaki EPR spektroskopisine göre yarılımlara uğrar (Atherton, 1973; Weil ve diğ., 1993; Rieger, 2007).

Çizelge 2.7. Biradikal Hamiltonieninin triplet durum için matris temsili ile enerji öz durumları ve özfonksiyonları (matris temsilinde $B_{m_1, m_2} = g\beta B_0$ alınmıştır)

$\widehat{\mathcal{H}}$	$ 1\rangle$	$ 0\rangle$	$ -1\rangle$
$\langle 1 $	$B_{m_1, m_2} + \frac{1}{3}D + a_1 m_1 + a_2 m_2$	0	E
$\langle 0 $	0	$-\frac{2}{3}D$	0
$\langle -1 $	E	0	$-B_{m_1, m_2} + \frac{1}{3}D - a_1 m_1 - a_2 m_2$

$$\mathcal{E}_1 = \sqrt{(B_{m_1, m_2} + a_1 m_1 + a_2 m_2)^2 + E^2} + \frac{D}{3}$$

$$\mathcal{E}_2 = -\frac{2}{3}D$$

$$\mathcal{E}_3 = -\sqrt{(B_{m_1, m_2} - a_1 m_1 - a_2 m_2)^2 + E^2} + \frac{D}{3}$$

(2.82)

$$T_1 = a_1 |1\rangle + a_2 |0\rangle$$

$$T_0 = |0\rangle$$

$$T_{-1} = b_1 |0\rangle + b_2 |-1\rangle$$

2.10 Spin İşlemcileri

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

$$\hat{\mathbf{S}} = \begin{bmatrix} \hat{S}_x \\ \hat{S}_y \\ \hat{S}_z \end{bmatrix} \quad (2.83)$$

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

$$\hat{S}^2 |S, M_S\rangle = S(S + 1) |S, M_S\rangle \quad (2.84)$$

$$\hat{S}_z |S, M_S\rangle = M_S |S, M_S\rangle \quad (2.85)$$

\hat{S}_x ve \hat{S}_y işlemcilerini doğrudan kullanmak yerine yükseltme ve alçaltma işlemcilerini kullanmak daha ekonomik olmakta ve bu işlemciler yükseltme ve alçaltma işlemcileri cinsinden ifade edilebilmektedir;

$$\hat{S}_+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y, \quad \hat{S}_- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y \quad (2.86)$$

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

Yükseltme ve alçaltma işlemcilerinin özdeğerleri,

$$S_+ |S, M_S\rangle = \sqrt{S(S + 1) - M_S(M_S + 1)} |S, M_S + 1\rangle \quad (2.87)$$

$$S_- |S, M_S\rangle = \sqrt{S(S + 1) - M_S(M_S - 1)} |S, M_S - 1\rangle \quad (2.88)$$

olarak tanımlanmaktadır. \hat{S}_x ve \hat{S}_y işlemcilerinin özdeğerleri de bu tanımlar kullanılarak bulunabilir. Spin işlemcilerinin önemli komütasyon bağıntıları şunlardır:

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hat{S}_z \quad [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hat{S}_x \quad [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hat{S}_y \quad (2.89)$$

$$[\hat{S}_z, \hat{S}_+] = \hat{S}_+ \quad [\hat{S}_z, \hat{S}_-] = -\hat{S}_- \quad [\hat{S}_+, \hat{S}_-] = 2\hat{S}_z$$

Bu tanımlar kullanılarak, spin vektörünün klasik karşılığı olmayan vektörel çarpım özelliği yazılabilir;

$$\hat{\mathbf{S}} \times \hat{\mathbf{S}} = i \hat{\mathbf{S}} \quad (2.90)$$

Volfgang Pauli spin vektörleri yanında her bir spin bileşeninin matris temsillerini tanımlamıştır. Spin matrisleri kuantum bilgi işleme teorisinde uygun olduğundan burada da spin matrislerini ya da operatörlerini kullanmak, bunun doğal sonucu olarak da spin öz durumlarını sütun vektörü biçiminde kullanmak uygun düşmektedir.

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

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |2\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad \dots \quad |N\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \quad (2.91)$$

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

2.11 Yoğunluk Matrisi Teorisi

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

$$\psi = \sum_i c_i \phi_i, \quad c_i \quad (i = 1, 2, 3 \dots N) \quad (2.92)$$

ψ saf durumdur. Yalıtılmamış bir sistem çevreyle etkileşim halindedir ve bu nedenle sistemdeki bilgi tamamlı değildir, bu durumlar karışık durumlar olarak bilinirler. Böyle sistemleri yoğunluk matrisi ile temsil etmek uygun düşmektedir (Atkins ve Friedman, 2005; Oliviera ve diğ., 2007). N boyutlu bir Hilbert (H) uzayında $|\psi_k\rangle \in H$ olmak üzere yoğunluk matrisi,

$$\rho = \sum_{k=1}^N P_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k|, \quad (k = 1, 2, 3 \dots N) \quad (2.93)$$

olarak tanımlanır. p_k her bir k 'nci durumun bulunma olasılığıdır. Saf durumlar için $p_k = 1$ olduğundan $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ olarak verilir. Yoğunluk matrisinin bazı özellikleri şunlardır:

- i. Yoğunluk matrisi gerçekte ağırlıklı ortalama değer ifadesidir.
- ii. Yoğunluk matrisi Hermitiktir, dolayısıyla özdeğerleri gerçeldir: $\rho = \rho^\dagger$.
- iii. Saf durumlar için yoğunluk matrisinin ve karesinin izi bir birimdir: $\text{Iz}(\rho) = 1$ ve $\text{Iz}(\rho^2) = 1$.
- iv. Karışık durumlar için yoğunluk matrisinin izi bir birimden küçük olabilir: $\text{Iz}(\rho) \leq 1$.
- v. Bir \hat{A} işlemcisinin özdeğeri ya da gözlenen değeri yoğunluk matrisi işlemi ile bulunabilir;

$$\langle\hat{A}\rangle = \sum_j \sum_k \rho_{jk} \hat{A}_{kj} = \sum_j (\rho\hat{A})_{jj} = \text{Iz}(\rho\hat{A}) \quad (2.94)$$

- vi. Yoğunluk matrisi zamana bağlı süreçlerin incelenmesine imkan tanır. Bunun için zamana bağlı Schrödinger denklemi yoğunluk matrisi tanımı ile birlikte alınarak,

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

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle\langle\psi|}{dt} = i\hbar \left(\frac{d|\psi\rangle}{dt} \langle\psi| + |\psi\rangle \frac{d\langle\psi|}{dt} \right) \quad \text{ya da açık biçimiyle} \quad (2.95)$$

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

elde edilir. Bu ifade yoğunluk matrisi hesaplanmasında önemli rol oynamaktadır ve Liouville-von Neuman teoreminin kuantum mekaniksel ifadesidir. Birinci mertebe diferansiyel denklem olan bu ifadenin çözümünü,

$$\rho(t) = e^{-i\mathcal{H}t/\hbar} \rho(0) e^{i\mathcal{H}t/\hbar} \quad (2.96)$$

ifadesi sağlamaktadır. Eğer başlangıç yoğunluk matrisi biliniyorsa daha sonraki herhangi bir t zamanındaki yoğunluk matrisi yani sistemin durumu bulunabilir. Termal dengedeki bir sistem için başlangıç yoğunluk matrisi,

$$\rho(0) = \frac{e^{-\mathcal{H}/k_B T}}{\sum_m e^{-E_m/k_B T}} = \frac{e^{-\mathcal{H}/k_B T}}{Z(T)} \quad (2.97)$$

olarak verilebilir. İfadede k_B Boltzmann sabiti, E_m sistemi oluşturan m 'inci durumun enerjisidir. Başlangıç durumu belirlendikten sonra $t_1, t_2, t_3 \dots t_N$ zamanlarındaki $\rho(t_1), \rho(t_2), \rho(t_3) \dots \rho(t_N)$ yoğunlukları bulunacaktır:

$$\rho(t_i) = e^{-iHt_{i+1}/\hbar} \rho(t_{i+1}) e^{iHt_{i+1}/\hbar}, \quad (i = 1, 2, 3, \dots N) \quad (2.98)$$

Son aşamada spin sisteminin uygulanan puls dizisine tepkisi algılanacak ve kaydedilecektir. Bu aşamada kaydedilen sinyale serbest indüksiyon bozulması, SİB ya da free induction decay (FID) denilmektedir. Bu işleme sinyal yoğunluk matrisi teorisinde sinyal ortalama işlemi (signal averaging) veya çeyrek bölge deteksiyonu (quadrature detection) denilmektedir. Bu işlemin matematik ifadesi, artırma spin işlemcisi ile yapılır (Schweiger ve Jeschke, 2001; Rule ve Hitchens, 2006; Oliviera, 2007).

$$\mathcal{J} = \text{İz}(\hat{S}_+ \rho(t_i)) \quad (2.99)$$

SİB sinyali zamana göre değişen bir sinyaldir, başka bir ifadeyle zaman uzayında bir sinyaldir. Bu sinyalin Fourier dönüşümü alınarak frekans uzayındaki spektrum elde edilir ki bu spektrum anlaşılabilen ve çözümlenebilen spektrumdur. Bu işlemlerin algoritması Materyal ve Metot bölümünde verilmiştir.

Bu işlemleri yapmak için üstel fonksiyonların seri açılımının yapılması gerekmektedir ki bu işlemler ancak bir yazılım ile mümkün olmaktadır.

2.12 Çarpım İşlemci Teoremi

Çarpım işlemci teoreminin temelinde açısal momentum ya da spin işlemcilerinin her bir spin durumu için matris temsillerinin yoğunluk matrislerinde kullanımı için uygun boyuta genişletilmesi gereklidir. Bu genişletme duruma göre soldan veya sağdan birim matris ile dış çarpımı yapılarak elde edilir. Çarpım işlemci teorisinin sağladığı kolaylık işlemcilerin kendilerini doğrudan kullanmasıdır.

Zamana bağlı yoğunluk matrisi baz durumlarının (B_S) lineer bileşimi olarak yazılmaktadır,

$$\sigma(t) = \sum_S b_S(t) B_S \quad (2.100)$$

(Schrensen ve diğ., 1983). Burada $b_S(t)$ zamana bağlı katsayılarıdır ve baz durumları da,

$$B_S = 2^{(q-1)} \prod_{k=1}^n (I_{kv})^{a_{sk}} \quad (2.101)$$

olarak tanımlanır. İfadede n toplam spin sayısını, k spin indisini, v kartezyen x, y ve z eksenlerini, q çarpım işlemcilerin sayısını ($0 \leq q \leq n$) ve a_{sk} verilen çarpım işlemcide bulunan spinleri göstermektedir (q tane spin için $a_{sk} = 1$ ve geriye kalan $n-q$ çekirdek için $a_{sk} = 0$ 'dır). Örnek olarak n tane spin $1/2$ sistem için B_S baz takımı, 4^n tane B_S çarpım işlemcisinden oluşur; sayı olarak IS ($I = 1/2, S = 1/2$) spin sistemi için 16 tane çarpım işlemcisi olacaktır; bunlar;

$$q = 0 \text{ için } \frac{E}{2} \text{ (E : Birim matris).}$$

$$q = 1 \text{ için } I_x, I_y, I_z, S_x, S_y, S_z$$

$$q = 2 \text{ için } 2I_x S_x, 2I_x S_y, 2I_x S_z, 2I_y S_x, 2I_y S_y, 2I_y S_z, 2I_z S_x, 2I_z S_y, 2I_z S_z$$

olmaktadır. Örnek olarak Spin $1/2$ sistemler için oluşturulan 16 çarpım işlemci Çizelge 2.8'de verilmiştir (Gershenfeld ve Chuang, 1997).

Çizelge 2.8. IS ($S = 1/2, I = 1/2$) spin sisteminde 16 çarpım işlemci

\otimes	$\frac{E}{2}$	S_x	S_y	S_z
$\frac{E}{2}$	$\frac{E}{2}$	S_x	S_y	S_z
I_x	I_x	$2I_x S_x$	$2I_x S_y$	$2I_x S_z$
I_y	I_y	$2I_y S_x$	$2I_y S_y$	$2I_y S_z$
I_z	I_z	$2I_z S_x$	$2I_z S_y$	$2I_z S_z$

SI ($S = 1/2, I = 1/2$) spin sisteminin çarpım işlemcileri; S için E_S, S_x, S_y, S_z ve I için E_I, I_x, I_y, I_z spin işlemcilerinin direkt çarpımlarından da elde edilebilir. Örneğin;

$$S_x = S_x \otimes E_I = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.102)$$

$$S_y = S_y \otimes E_I = \frac{i}{2} \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \frac{i}{2} \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.103)$$

$$2S_z I_x = 2S_z \otimes I_x = 2 \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.104)$$

olarak elde edilir.

$$2S_y I_x = 2S_y \otimes I_x = 2 \frac{i}{2} \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \frac{i}{2} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.105)$$

Çarpım işlemci teoremi ile yapılacak işlemler üzerine özlü bir yaklaşım Materyal ve Metot Bölümünde, Hamiltonien terimlerini oluşturan spin sistemleri ile yapılan işlemler de Bulgular ve Tartışmalar Bölümünde verilmiştir.

2.12.1 SI (S = 1, I = 1) spin sistemi için çarpım işlemcileri

EPR spektroskopisinde radikal çiftlerinde (biradikaller) iki elektronun eşlenerek tek bir spin gibi davrandığı Genel Bilgiler Bölümünde açıklanmıştır. İki elektronun bağlı olduğu iki ayrı çekirdeğin spinleri özdeş olabileceği gibi farklı da olabilir. Buna dayanarak spin sistemi SI_1I_2 olarak gösterilebilir. Ancak iki çekirdek spini etkilemediği için çekirdek spinlerinin etkileşmediğini SI_1-SI_2 olarak göstermek daha doğru olacaktır (bu çalışmada toplam spinin etkileştiği her iki çekirdeğin özdeş olduğu kabul edilmiştir). Bundan dolayı spin sistemi SI olarak ele alınmıştır.

Allard ve Hård (2001), Clebsch–Gordan serilerinin bir başka biçimi olan Wigner 3-j sembollerini kullanarak bir S ve I spin sistemindeki spin işlemcilerini türetmişlerdir. Spin kuantum sayısı ile karışıklığı önlemek için spin işlemcileri burada T ile gösterilecektir.

$$\hat{T}_{k,q}^{(S)} = \sqrt{2S+1} \sqrt{2k+1} \quad (2.106)$$

$$\sum_{M=-S}^S \sum_{M'=-S}^S (-1)^{S-M} \begin{pmatrix} S & k & S \\ -M & q & M' \end{pmatrix} |S, M\rangle \langle S, M'| \quad (2.107)$$

$$(0 \leq k \leq 2S \text{ ve } -k \leq q \leq k)$$

İfadede $\hat{T}_{k,q}^{(S)}$ her bir k ve q değerleri için spin işlemcileridir (Messiah, 1962; Allard ve Hård, 2001). Buna göre spin 1 sistemler için (S = 1) k = 0, 1, 2 ve her bir k için sırasıyla q = 0; -1, 0, 1; -2, -1, 0, 1, 2 değerlerini alacaktır ki toplam 9 spin işlemcisi bulunacaktır. Bu işlemciler S = 1 sisteminin kartezyen \hat{S}_x , \hat{S}_y ve \hat{S}_z işlemcilerinin kendileri ve kombinasyonlarından oluşan (birimsel işlemci dahil) 9 işlemciyi verir;

$$E_S, S_x, S_y, S_z, S_z^2, [S_x, S_z]_+, [S_y, S_z]_+, [S_x, S_y]_+, (S_x^2 - S_y^2) \quad (2.108)$$

Aynı işlemciler çekirdek spini $I = 1$ için de geçerlidir. Bu işlemciler Çizelge 2.9'da verilmiştir.

Çizelge 2.9. Spin 1 sistem için Wigner 3-j formülü ile bulunan 9 spin işlemcisi. Aynı işlemciler $I=1$ için de geçerlidir

$$\begin{aligned} E &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} & S_z &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} & [S_x, S_z]_+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix} \\ S_x &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} & S_z^2 &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} & [S_y, S_z]_+ &= \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix} \\ S_y &= \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} & (S_x^2 - S_y^2) &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} & [S_x, S_y]_+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

SI ($S=1, I=1$) spin sisteminde, Çizelge 2.10'da gösterildiği üzere 81 çarpım işlemcisi oluşmaktadır. Burada işlemlerin yapılışı bu 81 işlemciden iki tanesi ile örneklendirilecektir. S_y ve I_x 'in matrisleri Denklem 2.109'da verilmiştir.

$$S_y^{\otimes 1} = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad I_x^{\otimes 1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.109)$$

$S = 1$ ve $I = 1$ sistem için S_y işlemcisi sağdan birim matris ile ve I_x işlemcisi de soldan birim matris ile tensörel çarpım yapılarak 9×9 boyutlu matris yapılmalıdır². İşlemcilerin üslerinde bulunan $\otimes 1$ ve $\otimes 2$ gösterimleri bir kutritlik (3×3 boyutlu) işlemciler ve iki kutritlik (9×9 boyutlu) işlemcileri temsil etmektedir. Bu bilgiler ışığında S_y ve I_x işlemcileri iki kutrit için genişletilebilir;

² Elektron spin (S) işlemcilerinin SI sistemlerde $S = 1$ ve $I = 1$ için boyut uyumunun yapılması gerekmektedir. Bunun için temel spin işlemcilerinin birim matris ile tensörel çarpımı yapılarak genişletilmeleri, (burada 9×9), için yapılacak bütün işlemlerde belirli bir çarpım hiyerarşisine uyulması gerekmektedir. Klasik hamiltonien çözümlerine uygun olarak bu çalışmada elektron ve spin işlemcileri SI biçiminde sıralanmıştır ve soldaki S işlemcisinin birim matris ile tensörel çarpımında birim matris sağda olacak biçimde, ($S_y^{\otimes 2} = S_y^{\otimes 1} \otimes E^{\otimes 1}$) ve sağdaki çekirdek spini I işlemcisinin birim matris ile çarpımında birim matris solda olacak biçimde ($I_x^{\otimes 2} = E^{\otimes 1} \otimes I_x^{\otimes 1}$) alınmıştır.

$$S_y^{\otimes 2} = S_y^{\otimes 1} \otimes E^{\otimes 1} = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} =$$

$$\frac{i}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.110)$$

$$I_x^{\otimes 2} = E^{\otimes 1} \otimes I_x^{\otimes 1} =$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.111)$$

Bundan sonra $S_y^{\otimes 2} \otimes I_x^{\otimes 2}$ matris çarpımı yapılır;

$$S_y^{\otimes 2} I_x^{\otimes 2} = S_y I_x = \frac{i}{2} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.112)$$

Çizelge 2.10. SI ($S = 1, I = 1$) spin sistemindeki 81 çarpım işlemcisi

\otimes	E	I_x	I_y	I_z	I_z^2	$[I_x, I_z]_+$	$[I_y, I_z]_+$	$[I_x, I_y]_+$	$(I_x^2 - I_y^2)$
E	E	I_x	I_y	I_z	I_z^2	$[I_x, I_z]_+$	$[I_y, I_z]_+$	$[I_x, I_y]_+$	$(I_x^2 - I_y^2)$
S_x	S_x	$S_x I_x$	$S_x I_y$	$S_x I_z$	$S_x I_z^2$	$S_x [I_x, I_z]_+$	$S_x [I_y, I_z]_+$	$S_x [I_x, I_y]_+$	$S_x (I_x^2 - I_y^2)$
S_y	S_y	$S_y I_x$	$S_y I_y$	$S_y I_z$	$S_y I_z^2$	$S_y [I_x, I_z]_+$	$S_y [I_y, I_z]_+$	$S_y [I_x, I_y]_+$	$S_y (I_x^2 - I_y^2)$
S_z	S_z	$S_z I_x$	$S_z I_y$	$S_z I_z$	$S_z I_z^2$	$S_z [I_x, I_z]_+$	$S_z [I_y, I_z]_+$	$S_z [I_x, I_y]_+$	$S_z (I_x^2 - I_y^2)$
S_z²	S_z^2	$S_z^2 I_x$	$S_z^2 I_y$	$S_z^2 I_z$	$S_z^2 I_z^2$	$S_z^2 [I_x, I_z]_+$	$S_z^2 [I_y, I_z]_+$	$S_z^2 [I_x, I_y]_+$	$S_z^2 (I_x^2 - I_y^2)$
$[S_x, S_z]_+$	$[S_x, S_z]_+$	$[S_x, S_z]_+ I_x$	$[S_x, S_z]_+ I_y$	$[S_x, S_z]_+ I_z$	$[S_x, S_z]_+ I_z^2$	$[S_x, S_z]_+ [I_x, I_z]_+$	$[S_x, S_z]_+ [I_y, I_z]_+$	$[S_x, S_z]_+ [I_x, I_y]_+$	$[S_x, S_z]_+ (I_x^2 - I_y^2)$
$[S_y, S_z]_+$	$[S_y, S_z]_+$	$[S_y, S_z]_+ I_x$	$[S_y, S_z]_+ I_y$	$[S_y, S_z]_+ I_z$	$[S_y, S_z]_+ I_z^2$	$[S_y, S_z]_+ [I_x, I_z]_+$	$[S_y, S_z]_+ [I_y, I_z]_+$	$[S_y, S_z]_+ [I_x, I_y]_+$	$[S_y, S_z]_+ (I_x^2 - I_y^2)$
$[S_x, S_y]_+$	$[S_x, S_y]_+$	$[S_x, S_y]_+ I_x$	$[S_x, S_y]_+ I_y$	$[S_x, S_y]_+ I_z$	$[S_x, S_y]_+ I_z^2$	$[S_x, S_y]_+ [I_x, I_z]_+$	$[S_x, S_y]_+ [I_y, I_z]_+$	$[S_x, S_y]_+ [I_x, I_y]_+$	$[S_x, S_y]_+ (I_x^2 - I_y^2)$
$(S_x^2 - S_y^2)$	$(S_x^2 - S_y^2)$	$(S_x^2 - S_y^2) I_x$	$(S_x^2 - S_y^2) I_y$	$(S_x^2 - S_y^2) I_z$	$(S_x^2 - S_y^2) I_z^2$	$(S_x^2 - S_y^2) [I_x, I_z]_+$	$(S_x^2 - S_y^2) [I_y, I_z]_+$	$(S_x^2 - S_y^2) [I_x, I_y]_+$	$(S_x^2 - S_y^2) (I_x^2 - I_y^2)$

İkinci işlem örnek de $[S_x, S_y](I_x^2 - I_y^2)$ alınırsa işlemler aşağıdaki gibi olacaktır. Soldaki komütasyon bağıntısı kuantum mekanikte temel bağıntılardan birisidir ve $[S_x, S_y] = iS_z$ sonucunu verir. İşlemler yukarıda verilen sıra izlenerek yürütülürse sonuç Denklem 2.113 ve 2.114, 2.115 ve 2.116'da verildiği gibi olacaktır.

$$[S_x, S_y] = iS_z^{\otimes 2} = i \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (2.113)$$

$$I_x^2 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.114)$$

$$I_y^2 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (2.115)$$

$$I_x^2 - I_y^2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.116)$$

3. MATERYAL VE METOT

Bu tez çalışmasında Elektron Paramanyetik Rezonans (EPR) spektroskopisinin farklı alanlardaki teori ve uygulamaları esas alınarak kuantum bilgi işleme teorisindeki uygulanabilirliği tartışılmıştır. Bunun yanında kuantum bilgi teorisinde gerekli görülen bazı matematik işlemler de ele alınmıştır.

Manyetik Rezonans spektroskopisinin kuantum bilgi teorisinde uygulamaları esas olarak NMR spektroskopisi üzerinde yapılmaktadır, EPR spektroskopisi için az sayıda da olsa çalışmalar yapılmıştır. Bunun en önemli nedeni Pulslu NMR spektroskopisinin yaygın ve başarılı uygulamalarıdır. Ancak pulslu EPR spektroskopisi de son yıllarda oldukça yaygınlaşmıştır ve pulslu NMR spektroskopisinin birikiminden yararlanmaktadır (Schweiger ve Jeschke, 2001; Morley, 2005).

3.1 Spin İşlecileri ya da Spinlerin Matris Temsilleri

Çalışmada önce spin işlecileri ele alınarak, literatürde verilen spin $1/2$ dönme işlemcisi yanında spin 1 ile spin $7/2$ arası kuantum spin dönme işlemcilerinin sembolik ifadeleri sayısal hesaplama yöntemi ile türetilmiştir. Her ne kadar pulslu NMR spektroskopisinin kuantum bilgi teorisindeki uygulamaları spin $1/2$ için, yani kübit esaslı sistemler için yapılıyorsa da, işlemin tartışmasının ve uygulamalarının farklı spin sistemlerine yaygınlaşması, diğer spin sistemlerinin dönme işlemcilerinin sembolik ifadelerini gerekli hale getirecektir. Bu işlemciler gerektiğinde Bulgular ve Tartışmalar bölümünde ele alındığı üzere seri açılımı yöntemiyle sayısal olarak türetilmektedir, fakat bu yöntem ilave bir işlem yüküdür. Dönme işlemcilerinin sembolik olması doğal olarak kolaylık sağlamaktadır.

Bölüm 2'de kısaca ele alınan spin işlemcilerine ilave olarak bütün spin sistemleri için spin operatörlerinin oluşturulmasında bir algoritmadan yararlanmak uygulama açısından yararlı olacaktır, Algoritma 4.1.

EPR spektroskopik tekniği NMR spektroskopik tekniğinden farklı olarak donanım değişikliği yapılmadan farklı spinlere sahip çekirdekleri katı halde (amorfo

ya da camsı yapıda, toz halde, tek kristal halinde), sıvı çözeltili halinde ve küçük donanım ilavesiyle gaz halinde inceleme imkanı verir. Bu teknik özelliği, mikrodalga spektroskopisinin NMR tekniğine göre bazı küçük zorluklar içermesine rağmen ona bir ayrıcalık vermektedir. Bu çalışma, pulslu NMR spektroskopisinden farklı olarak pulslu EPR spektroskopisinin spin 1 sistem için kuantum bilgi teorisinde uygulanabilirliği üzerine yapılmıştır.

EPR teorisi spini 1/2 olan elektronu esas alır. Bu spin sistemi ikili durumu, yani kübit sistemi oluşturmaktadır. Ancak kübit sistemler üzerine başta pulslu NMR spektroskopik tekniği olmak üzere çok sayıda çalışma yapılmıştır. Öte yanda eşlenmemiş elektron spinleri kimyasal yapılar içinde elektron çifti ya da biradikal oluşturmaktadır. Bu durumda toplam spin 1 olmakta ve teorik açıdan üçlü (triplet) durumu, kuantum bilgi teorisindeki terimi ile *kutrit* sistem için fiziksel bir yapı ortaya çıkmaktadır. Hatta karbon nanotüpler ya da fullerenler üç ve daha fazla çiftlenmiş elektron sistemlerini mümkün kılacaktır. Dolayısıyla daha büyük spin sistemlerinin teorik temellerini oluşturmak gelecekte gerekli hale gelebilecektir.

Tez Özeti kesiminde de söz edildiği üzere, kararlı biradikaller olan $K_2S_2O_8$ ve $(NH_4)_2S_2O_8$ kristalleri içinde radyasyonla oluşturulan $SO_4^- - SO_4^-$ biradikali (Tapramaz, 1991), kuvarz kristali içinde radyasyonla oluşturularak tuzaklanan $O^- - O^-$ biradikali (Maskhovtsev ve Pan, 2011) spini sıfır olan çekirdeklerle etkileşen biradikal örnekleri bilinen en basit radikal çiftleridir. Bunun yanında çekirdek spini 1 olan iki nitroksit radikalinin oluşturduğu ve R manyetik olarak etkisiz bir grup olmak üzere $R - O\dot{N} - \dot{N}O - R$ biradikali kutrit sistemler için oldukça iyi bir yapı olarak görünmektedir ve bu çalışmada bu tür yapılar üzerine ağırlık verilecektir (Nakazawa ve diğ., 2012). Benzer başka ^{14}N merkezli biradikal yapılar Kirk ve Shultz tarafından rapor edilmiştir (Kirk ve Shultz, 2013; Fatila ve diğ., 2013). Spini 3/2 olan $Cu^{2+} - Cu^{2+}$ yapısında biradikaller silisyum yaprak üzerinde oluşturulan ince bakır film içinde gözlenmiştir (Kim ve diğ., 2013). Bu yapı da daha büyük spin sistemlerinde değerlendirilebilir.

3.2 Biradikal Hamiltonieni

Biradikal için Hamiltonien Denklem 3.1'de verilmiştir. Hamiltonien; elektron zeeman etkileşmesi, çekirdek zeeman etkileşmeleri, eksensel dipolar etkileşme,

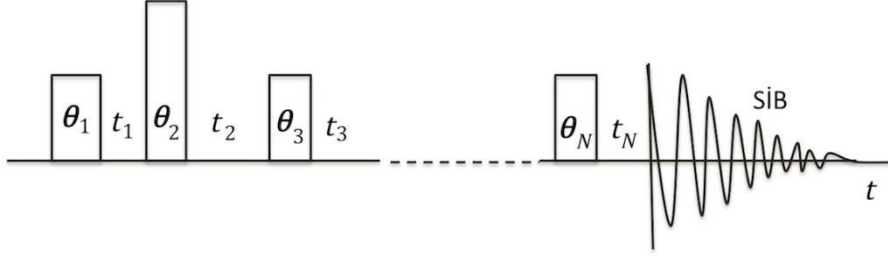
ekvatorial dipolar etkileşme, eksensel aşırı ince yapı etkileşmeleri ve ekvatorial aşırı ince yapı etkileşmelerini içermektedir.

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}} = & g\beta B_0 \hat{S}_z + g_{N_1} \beta_N B_0 \hat{I}_{1z} + g_{N_2} \beta_N B_0 \hat{I}_{2z} + D \left[\hat{S}_z^2 - \frac{1}{3} S(S+1) \right] \\
& + \frac{E}{2} (\hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2) + a_1 \hat{S}_z \hat{I}_{1z} + a_2 \hat{S}_z \hat{I}_{2z} \\
& + a_1 (S_x I_{1x} + S_y I_{1y}) + a_2 (S_x I_{2x} + S_y I_{2y})
\end{aligned} \tag{3.1}$$

Biradikallerde toplam elektron spini $S = 1$ ve $S = 0$ değerlerini almaktadır. $S = 0$ bir katkı getirmeyeceğinden sadece $S = 1$ durumu dikkate alınacaktır. Hamiltoniende değişen spin biradikali oluşturan iki elektronun bağlı olduğu ve etkileştiği çekirdeklerin veya (çekirdek gruplarının) spinleri farklı olabilir. Örnek olarak gerçek yapılardan yukarıda verilen $\text{SO}_4^- - \text{SO}_4^-$ biradikalinde elektronun yoğun olarak bulunduğu kükürt izotopunun, (^{32}S), spini sıfırdır; dolayısıyla spektrumda sadece iki çizgi gözlenecektir. Diğer örnek olan nitroksit biradikalinde, (R_1 ve R_2 manyetik olarak etkisiz grupları temsil etmek üzere, $\text{R}_1 - \text{O}\dot{\text{N}} - \dot{\text{N}}\text{O} - \text{R}_2$), her iki ^{14}N izotopunun çekirdek spini 1 olduğundan spektrumda iki beşli grup halinde ve $1 : 2 : 3 : 2 : 1$ şiddetlerinde 10 çizgi verecektir. Diğer örnek olan $\text{Cu}^{2+} - \text{Cu}^{2+}$ biradikalinde her ^{63}Cu izotopunun çekirdek spini $3/2$ olduğundan yine iki grup halinde $1 : 2 : 3 : 4 : 3 : 2 : 1$ şiddet dağılımlarına sahip 14 çizgi verecektir. Burada kutrit sistemler için uygun olan biradikaller $\text{SO}_4^- - \text{SO}_4^-$ ve $\text{R}_1 - \text{O}\dot{\text{N}} - \dot{\text{N}}\text{O} - \text{R}_2$ olarak görünmektedir. $\text{Cu}^{2+} - \text{Cu}^{2+}$ radikal çiftleri spin sistemlerinin farklı olması nedeniyle başka bir çalışmanın konusudur.

3.3 Yoğunluk Matrisi ve Puls Dizisi İşlem Algoritması

EPR teorisinde yoğunluk matrisi kullanılarak puls dizisi deneyinin simülasyonu için kullanılan işlem sırası Algoritma 4.2’de verilmiştir. Teorik esasları Yoğunluk Matrisi Teorisi kesiminde özetlenen işlem dizisi ya da algoritması esnek yapıdadır ve puls dizilerinin değişimi için kolaylıkla uyarlanabilmektedir.



Şekil 3.1. Algoritma 4.2 için örnek puls dizisi

3.4 Üstel İşlemciler: Dönme İşlemcisi ve Yoğunluk Matrisi İşlemleri

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

Denklem 3.2 ile tanımlanan spin dönme işlemcisi, $\hat{R}_x, \hat{R}_y, \hat{R}_z$, hatta spin artırma ve azaltma işlemcilerinin oluşturabileceği \hat{R}_+, \hat{R}_- işlemcileri benzer biçimde oluşturulur (sadelik için işlemcilerin argümanları olan açılar yazılmamıştır). α indisi $x, y, z, +$ ve $-$ yerine kullanılarak dönme işlemcisi,

$$\hat{R}_\alpha = e^{i\omega t_p \hat{S}_\alpha} = e^{i\theta \hat{S}_\alpha} = \cos(\theta \hat{S}_\alpha) + i \sin(\theta \hat{S}_\alpha) \quad (3.2)$$

olacaktır. İfadede frekans birimindeki $\omega = g\beta B_1/\hbar$ olarak tanımlanmıştır. $g = 2.00231930$, $\beta = 9.27400899 \times 10^{-24} J/T$ ve B_1 manyetik puls genliğidir. Trigonometrik fonksiyonların argümanları skaler θ ve matris \hat{S}_α ile işlem yapabilmek için seri açılımı yapılırsa;

$$\cos(\theta \hat{S}_\alpha) = \mathbb{1} - \frac{1}{2!} \theta^2 \hat{S}_\alpha^2 + \frac{1}{4!} \theta^4 \hat{S}_\alpha^4 - \frac{1}{6!} \theta^6 \hat{S}_\alpha^6 + \frac{1}{8!} \theta^8 \hat{S}_\alpha^8 - \dots \quad (3.3)$$

$$\sin(\theta \hat{S}_\alpha) = \theta \hat{S}_\alpha - \frac{1}{3!} \theta^3 \hat{S}_\alpha^3 + \frac{1}{5!} \theta^5 \hat{S}_\alpha^5 - \frac{1}{7!} \theta^7 \hat{S}_\alpha^7 + \frac{1}{9!} \theta^9 \hat{S}_\alpha^9 - \dots \quad (3.4)$$

ifadeleri bulunacaktır. İfadede $\mathbb{1}$ spin işlemcisi ile aynı boyutta birim matristir. Bu işlemleri yapabilmek için matris formundaki spin işlemcilerinin terim terim kuvvetlerini almak gerekir. Spin işlemcisi matrislerin boyutları $S = 0$ için 1×1 , $S = 1$ için 3×3 olacaktır. Dolayısıyla işlemleri yeterli duyarlılıkta, örneğin $\varepsilon = 10^{-9}$ duyarlılıkta yapabilmek için spin matrisinin boyutuna ve açının değerine bağlı olarak

seriyi 7 ile 40 terim arasında toplamak gerekmektedir ve bu işlemler ancak bilgisayar yardımı ile yapılabilir.

Üstel işlemci, Denklem 3.2, dönme işlemcisine göre daha karmaşıktır, çünkü Hamiltonien dönme işlemcisindeki ω değişkenine göre çok daha karmaşıktır. Denklem 3.1'de verilen Hamiltonien ile üstel işlemcide tek bir spin işlemcisi değil çok sayıda elektron ve çekirdek spin işlemcileri bulunmaktadır.

$$\hat{\Omega}(t) = e^{i\mathcal{H}t/\hbar} = e^{i\hat{\mathcal{W}}t} \quad (3.5)$$

Bu yüzden $\hat{\mathcal{W}} = \hat{\mathcal{H}}/\hbar$ değeri, ki daha uzun ve karmaşık işlemler sonunda bulunacaktır, Denklem 3.1. Örnek olarak biradikal Hamiltonieni için frekans birimindeki $\hat{\mathcal{W}}$ işlemcisi, ikinci mertebeden katkı getiren çekirdek zeeman ile ekvatorial aşırı ince yapı etkileşmeleri gözardı edilerek açık yazılabilir:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{W}} = & \omega_z \hat{S}_z + \omega_D \left[\hat{S}_z^2 - \frac{1}{3} (S(S+1)) \right] + \omega_E (\hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2) \\ & + \omega_1 \hat{S}_z \hat{I}_{1z} + \omega_2 \hat{S}_z \hat{I}_{2z} \end{aligned} \quad (3.6)$$

İfadede $\omega = \frac{g\beta B_0}{\hbar}$, $\omega_D = \frac{D}{\hbar}$, $\omega_E = \frac{E}{\hbar}$, $\omega_1 = \frac{a_1}{\hbar}$, $\omega_2 = \frac{a_2}{\hbar}$ ve B_0 kartezyen sistemin z eksenine doğrultusunda uygulanan dış kutuplandırma manyetik alanıdır. Bu bilgilerle yoğunluk matrisinin işlem ayrıntıları ele alınabilir.

$$\cos(\hat{\mathcal{W}}t) = \mathbb{1} - \frac{1}{2!} \hat{\mathcal{W}}^2 t^2 + \frac{1}{4!} \hat{\mathcal{W}}^4 t^4 - \frac{1}{6!} \hat{\mathcal{W}}^6 t^6 + \frac{1}{8!} \hat{\mathcal{W}}^8 t^8 - \dots \quad (3.7)$$

$$\sin(\hat{\mathcal{W}}t) = \hat{\mathcal{W}}t - \frac{1}{3!} \hat{\mathcal{W}}^3 t^3 + \frac{1}{5!} \hat{\mathcal{W}}^5 t^5 - \frac{1}{7!} \hat{\mathcal{W}}^7 t^7 + \frac{1}{9!} \hat{\mathcal{W}}^9 t^9 - \dots \quad (3.8)$$

Bu iki seri toplamını $\varepsilon = 10^{-9}$ duyarlıkta yapmak için yaklaşık 30 ve daha fazla terimi toplamak gerekmektedir.

3.5 Spin İşlemcileri ile Etkileşme Hamiltonieni Üzerine

EPR spektroskopisinin etkin Hamiltonien denkleminde basitlik için sadece zamandan bağımsız aşırı ince yapı etkileşme terimi ve zamana bağlı üstel işlemci ifadesi,

$$\hat{\mathcal{W}} = \frac{\mathcal{H}}{\hbar} = \frac{a}{\hbar} \hat{S}_z \hat{I}_z \quad \text{ve} \quad \Omega(t) = e^{-i\hat{\mathcal{W}}t} \quad (3.9)$$

olarak yazılır³. Etkileşmenin bir t süresince olduğu kabul edilir ve bir SI spin sistemi için etkileşme, \hat{A} bir spin işlemcisi olmak üzere,

$$e^{-i\hat{\mathcal{W}}t}\hat{A}e^{i\hat{\mathcal{W}}t} = \hat{A} - \frac{it}{1!}[\hat{\mathcal{W}}, \hat{A}] + \frac{(it)^2}{2!}[\hat{\mathcal{W}}, [\hat{\mathcal{W}}, \hat{A}]] - \frac{(it)^3}{3!}[\hat{\mathcal{W}}, [\hat{\mathcal{W}}, [\hat{\mathcal{W}}, \hat{A}]]] + \frac{(it)^4}{4!}[\hat{\mathcal{W}}, [\hat{\mathcal{W}}, [\hat{\mathcal{W}}, [\hat{\mathcal{W}}, \hat{A}]]]] \dots \quad (3.10)$$

ifadesi bulunur⁴ (Miller, 1972). İfadede iç içe komütatörler;

$$K_1 = [\hat{\mathcal{W}}, \hat{A}], \quad K_2 = [\hat{\mathcal{W}}, [\hat{\mathcal{W}}, \hat{A}]], \quad K_3 = [\hat{\mathcal{W}}, [\hat{\mathcal{W}}, [\hat{\mathcal{W}}, \hat{A}]]] \\ K_4 = [\hat{\mathcal{W}}, [\hat{\mathcal{W}}, [\hat{\mathcal{W}}, [\hat{\mathcal{W}}, \hat{A}]]]], \quad \dots \quad (3.11)$$

olarak tanımlanırsa, ifadeler yeniden,

$$K_1 = [\hat{\mathcal{W}}, \hat{A}], \quad K_2 = [\hat{\mathcal{W}}, K_1], \quad K_3 = [\hat{\mathcal{W}}, K_2], \\ K_4 = [\hat{\mathcal{W}}, K_3], \quad K_5 = [\hat{\mathcal{W}}, K_4], \quad K_6 = [\hat{\mathcal{W}}, K_5], \dots \quad (3.12)$$

Denklem 3.10'da verilen seri açılımında kompleks terimlerin kuvvetleri dikkate alınarak Denklem 3.10 ile Denklem 3.12 birlikte yeniden,

$$e^{-i\hat{\mathcal{W}}t}\hat{A}e^{i\hat{\mathcal{W}}t} = \hat{A} - \frac{t^2}{2!}K_2 + \frac{t^4}{4!}K_4 - \frac{t^6}{6!}K_6 + \frac{t^8}{8!}K_8 - \dots \\ -i \left\{ \frac{t}{1!}K_1 - \frac{t^3}{3!}K_3 + \frac{t^5}{5!}K_5 - \frac{t^7}{7!}K_7 + \frac{t^9}{9!}K_9 - \dots \right\} \\ e^{-i\hat{\mathcal{W}}t}\hat{A}e^{i\hat{\mathcal{W}}t} = \hat{A} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n t^{2n}}{(2n)!} K_{2n} + i \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n t^{2n-1}}{(2n-1)!} K_{2n-1} \quad (3.13)$$

işlemci bu haliyle daha kullanışlıdır.

³ Literatürde üstel işlemci $e^{-i\mathcal{H}t}$ biçiminde sadece Hamiltonien ile yazılmaktadır Ancak üstel ifade birimsiz, dolayısıyla Hamiltonien açılmal frekans biriminde olmalıdır, yani Hamiltonien \hbar ile bölünmelidir. Birim karışıklığı oluşmaması için üstel işlemcide enerji birimindeki Hamiltonien yerine frekans biriminde tanımlanan $\hat{\mathcal{W}}$ işlemcisi tanımlanmıştır.

⁴ Grup teorisinde Baker–Campbell–Hausdorff, BCH, formülü olarak bilinen ve $\ln[\exp(X)\exp(Y)]$ ifadesinin seri açılımını veren teoremin bir yardımcı teoreminin (lemma) sonucu olan bu açılım ifadesi formülde de verildiği gibi $\exp(X)A\exp(Y)$ fonksiyonunun doğrudan açılımını veren yararlı bir formüldür. İfadede X , Y ve A birer işlemcidir. Gerçekte bu formül çarpım halindeki üstel fonksiyonların Taylor seri açılımı ile yapılacak işlemler zinciri sonunda de elde edilebilmektedir.

3.6 Kutrit Sistemlerde Hadamard, CNOT ve SWAP Geçitleri

3.6.1 Kutrit sistemlerde Hadamard geçiti üzerinde bazı işlemler

Kuantum bilgi teorisi açısından Hadamard geçiti saf durumları karışık hale getiren temel geçittir. Ortogonal ve simetrik bir matristir. Tek kübitlik sistemler yanında çok kübitlik sistemlere de uyarlanabilir. Bu konuda çok fazla örnek olduğundan, temel özelliklerini üç durumlu kutrit sistemlerde değerlendirmek üzere burada üzerinde daha fazla durulmayacaktır.

Kutrit sistemlerde Hadamard matrisi özel ve farklı özellikte bir ifade olarak verilir. Çünkü Hadamard matrisi tüm sistemler için işlem olarak benzer sonuçları veren bir matristir. Hadamard matrisi ya da matrisleri uygulamalarda ve teoride önemli olmak nedeniyle ilgi çekmekte ve üzerinde çok sayıda çalışma yapılmaktadır (Tadej ve Zyczkowski, 2006; Horadam, 2007; Szöllősi, 2011). Bu çalışmada konuya uygun olarak kutrit sistemler için (3×3 boyutlu kompleks matris) Hadamard matrisi üzerinde bazı işlemler yapılacaktır.

Kübit sistemlerde Hadamard matrisi, $\omega = e^{2i\pi/2} = -1$ olmak üzere;

$$H = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & \omega \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \text{ olarak tanımlanmıştır.}$$

Kutrit sistemler için Hadamard matrisi de benzer biçimde $\omega = e^{2i\pi/3}$ olmak üzere kompleks biçimde verilmiştir (Horadam, 2007),

$$\hat{H} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & \omega & \omega^2 \\ 1 & \omega^2 & \omega \end{bmatrix} \quad (3.14)$$

Matris elemanlarından ω karesi $\omega^2 = \omega^*$ olarak tanımlanmıştır. Daha açık biçimde,

$$\omega = -\frac{1}{2} + i\frac{\sqrt{3}}{2} \text{ ve } \omega^2 = \omega^* = -\frac{1}{2} - i\frac{\sqrt{3}}{2} \quad (3.15)$$

ifadeleri ile verilir. Matris bu değerlerle ortogonal ve simetriktir, fakat Hermitik değildir. Kutrit sistemler için durum fonksiyonlarına uygulandığında, kübit sistemlerde olduğu gibi saf durumları sistemin diğer durumlarını dahil ederek karışık hale getirmektedir.

$$\hat{H}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|0\rangle + |1\rangle + |2\rangle) \quad (3.16)$$

$$\hat{H}|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|0\rangle + \omega|1\rangle + \omega^2|2\rangle) \quad (3.17)$$

$$\hat{H}|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|0\rangle + \omega^2|1\rangle + \omega|2\rangle) \quad (3.18)$$

3.6.1.1 Bir ve iki kutrit sistemler (SI; S = 1, I = 0 ve I = 1) için Hadamard geçiti

Kutrit sistemler için Hadamard geçiti Denklem 3.19 ve 3.20'de verilmiştir. Eğer Hadamard geçitinin karesi alınırsa, Denklem 3.21'de verilen tanımlar kullanılarak,

$$\hat{H}^2 = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & \omega & \omega^2 \\ 1 & \omega^2 & \omega \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & \omega & \omega^2 \\ 1 & \omega^2 & \omega \end{bmatrix} \quad (3.19)$$

$$\hat{H} \cdot \hat{H} = \hat{H}^2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.20)$$

$$e^{\frac{2\pi i}{3}} = \cos 120^\circ + i \sin 120^\circ = -\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2}i$$

$$\omega^2 = e^{4\pi i/3} = \cos 240^\circ + i \sin 240^\circ = -\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{2}i \quad (3.21)$$

$$\omega^3 = e^{2\pi i} = \cos 360^\circ + i \sin 360^\circ = 1$$

$$\omega^4 = \omega$$

elde edilir.

Kübit sistemlerin aksine kutrit sistemlerde tek kutritlik SWAP geçiti oluşturulabilmektedir. Denklem 3.19'da verilen \hat{H}^2 matrisi gerçekte tek kutritlik bir SWAP geçitidir. Denklem 3.22'de verilen işlemler bunu kanıtlamaktadır.

$$\hat{H}^2|0\rangle = |0\rangle, \hat{H}^2|1\rangle = |2\rangle \text{ ve } \hat{H}^2|2\rangle = |1\rangle \quad (3.22)$$

Hadamard matrisinin üçüncü kuvveti Hadamard matrisinin tersini vermektedir;

$$\hat{H}^3 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & \omega^2 & \omega \\ 1 & \omega & \omega^2 \end{bmatrix} = \hat{H}^{-1} \quad (3.23)$$

Bu matris de Hadamard ile aynı özelliklere sahiptir. Matrisin ve tersinin diğer kuvvetleri ayrı bir özellik sağlamamakta, sadece tekrar etmektedir;

$$\hat{H}^4 = \mathbb{1}, \hat{H}^5 = \hat{H}, \hat{H}^6 = \hat{H}^2, \hat{H}^3 = \hat{H}^{-1}, \hat{H}^7 = \hat{H}^3, \hat{H}^8 = \mathbb{1} \dots \quad (3.24)$$

3.6.2 Kutrit sistemlerde SWAP geçiti üzerinde bazı işlemler

3.6.2.1 Tek kutritlik SWAP geçiti

Kesim 3.6.1’de Hadamard matrisinin bazı özellikleri verilmiştir. Özellikle Denklem 3.19 ve 3.23’te verilen iki matris aslında bu kesimin konusu olan SWAP geçiti olma özelliğini taşımaktadır. Bu bilgilerden hareketle kuantum bilgi teorisinde kullanılabilir tek kutritlik SWAP geçitinden başlayarak mümkün diğer SWAP geçitleri tartışılacaktır. Hadamard matrisinin karesi, $\hat{\mathbf{S}}^{(1)}$ olarak tanımlanırsa,

$$\hat{\mathbf{S}}^{(1)} = \hat{\mathbf{H}}^2 = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & \omega & \omega^2 \\ 1 & \omega^2 & \omega \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & \omega & \omega^2 \\ 1 & \omega^2 & \omega \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.25)$$

Sonuç matris kutrit durumları üzerine uygulanırsa $|0\rangle$ durumu değişmezken $|1\rangle$ ve $|2\rangle$ durumları yer değiştirecektir. Tek kubitlik sistemde SWAP işlemi yoktur, ancak Denklem 3.26 – 3.30’de verilen işlemler tek kutritlik sistemlerde SWAP işleminin yapılabilirliğini göstermektedir.

$$\hat{\mathbf{S}}_1^{(1)}|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = |0\rangle \quad (3.26)$$

$$\hat{\mathbf{S}}_1^{(1)}|1\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = |2\rangle \quad (3.27)$$

$$\hat{\mathbf{S}}_1^{(1)}|2\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = |1\rangle \quad (3.28)$$

Ya da daha derli toplu biçimde,

$$\hat{\mathbf{S}}_1^{(1)}|0\rangle = |0\rangle, \quad \hat{\mathbf{S}}_1^{(1)}|1\rangle = |2\rangle \quad \text{ve} \quad \hat{\mathbf{S}}_1^{(1)}|2\rangle = |1\rangle \quad (3.29)$$

Tek kutritlik başka SWAP geçitleri Denklem 3.20’de verilen geçitin farklı dizilişleri ile yapılabilir.

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Ancak bu iki geçit SWAP özelliği göstermediği için burada dikkate alınmamıştır.

Bir başka ve yapılabilir tek kutritlik SWAP geçiti Denklem 3.30’da verilmiştir.

$$\hat{\mathbf{S}}_2^{(1)} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{\mathbf{S}}_2^{(1)}|0\rangle = |2\rangle, \quad \hat{\mathbf{S}}_2^{(1)}|1\rangle = |1\rangle \quad \text{ve} \quad \hat{\mathbf{S}}_2^{(1)}|2\rangle = |0\rangle \quad (3.30)$$

3.6.2.2 SWAP geçitinin özellikleri

İki kutritlik SWAP geçitlerinin esas olarak dört özelliği vardır. Yukarıda verilen örnek geçitler bu özellikleri sağlamaktadır ve oluşturulacak başka SWAP geçitlerini temsil eden matrislerin en azından bu özelliklere sahip olması gerekir.

- 1 Bütün matrisler simetrik olmalıdır. Bu özellik SWAP işlemi için gereklidir.
- 2 Bütün matrisler ortogonaldır.
- 3 Bütün matrisler birimseldir.
- 4 Bütün matrislerin tersi ve devriği yine kendileridir.

3.6.3 Kutrit sistem için Kontrollü DEĞİL (CNOT) geçiti

Kübit sistemlerde Kontrollü DEĞİL (Controlled NOT; bundan sonra CNOT) geçiti kuantum hesaplamada hata düzeltme için temel oluşturmaktadır. Kübit sistemlerde $|ab\rangle$ bazında ancak iki kübit ile oluşturulabilmektedir; birinci kübit a kontrol ve ikinci kübit b hedefdir. CNOT işleminde kontrol kübiti değişmezken hedef kübit terslenmektedir.

Kübit sistemlerde DEĞİL (NOT) işlemi anlamlıdır ve zaten bu işlem temelde ikili sistemler için ortaya atılmıştır. Kutrit sistemler temel olarak üç durumu baz aldığından DEĞİL işleminin hangi durumu nasıl değiştireceği sorusu cevaplanması gereken bir sorudur.

Kutrit sistemlerle CNOT geçiti üzerine bir çalışma Wilmott tarafından yapılmıştır ve bu soruya cevap aranmıştır (Wilmott, 2011). Bu çalışmada Wilmott önce iki kutritlik iki CNOT geçiti önermiştir, Denklem 3.31 (a) ve (b). Çizelge 3.1'de verilen tabloda Q_0 sütunu girdi kutrit çiftlerini, W_1 sütunu birinci CNOT geçitinin sonucunu ve W_2 sütunu ikinci CNOT geçitinin sonucunu göstermektedir.

Çizelge 3.1. İki kutritlik sistemler için Wilmott tarafından önerilen iki farklı CNOT geçitinin işlem tablosu. Q_0 taban durumları, W_1 birinci geçitin sonucunu ve W_2 ikinci geçitin sonucunu vermektedir

Sıra	Q_0	W_1	W_2
1	$ 00\rangle$	$ 00\rangle - 1$	$ 00\rangle - 1$
2	$ 01\rangle$	$ 01\rangle - 2$	$ 11\rangle - 5$
3	$ 02\rangle$	$ 02\rangle - 3$	$ 22\rangle - 9$
4	$ 10\rangle$	$ 11\rangle - 5$	$ 10\rangle - 4$
5	$ 11\rangle$	$ 12\rangle - 6$	$ 21\rangle - 8$
6	$ 12\rangle$	$ 10\rangle - 4$	$ 02\rangle - 3$
7	$ 20\rangle$	$ 22\rangle - 9$	$ 20\rangle - 7$
8	$ 21\rangle$	$ 20\rangle - 7$	$ 01\rangle - 2$
9	$ 22\rangle$	$ 21\rangle - 8$	$ 12\rangle - 6$

$$\mathbf{W}_1 = \begin{matrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \mathbf{W}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (3.31)$$

(a) (b)

Wilmott'un önerdiği \mathbf{W}_1 geçitinde ilk kutrit kontrol kutriti, ikinci kutrit hedef kutriti ve Çizelge 3.1'de görüldüğü üzere \mathbf{W}_2 geçitinde ise birinci kutrit hedef kutriti ve ikinci kutrit kontrol kutritidir. Çizelge 3.1'de gösterildiği gibi \mathbf{W}_1 ve \mathbf{W}_2 geçitleri aynı etkiyi göstermektedir.

İki kutritlik CNOT geçitlerinde seçenek SWAP geçitlerinde olduğu kadar fazla değildir. Çünkü kontrol kutriti değişmediği için seçenek sınırlanmaktadır; değişim ya da terslenme hedef kutritleri olan $|0\rangle$, $|1\rangle$ ve $|2\rangle$ arasında olacaktır. Genel kabul olarak $|0\rangle$ kutritinin hedefi değiştirmediyini, diğer kutritlerin belirli bir sırada hedef kutriti değiştirdiği kabul edilirse, örneğin \mathbf{W}_1 matrisi ve işlem tablosunda kontrol kutriti $|1\rangle$ hedef kutritlerini $|0\rangle \rightarrow |1\rangle$, $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$ ve $|2\rangle \rightarrow |0\rangle$ biçiminde değiştirmekte, kontrol kutriti $|2\rangle$ ise hedef kutritleri $|0\rangle \rightarrow |2\rangle$, $|1\rangle \rightarrow |0\rangle$ ve $|2\rangle \rightarrow |1\rangle$ biçiminde değiştirmektedir. Yani kontrol kutritleri $|1\rangle$ ve $|2\rangle$ birbirlerinin tersi işlemleri yapmaktadırlar.

\mathbf{W}_1 matrisinin ya da CNOT geçitinin karesi \mathbf{W}_1 ile benzer işlemleri farklı sırada yapan bir CNOT geçitidir. Bu matrisin dikkat çeken bir diğer özelliği de \mathbf{W}_1 ile \mathbf{W}_1^2 matrislerinin birbirlerinin tersi olmasıdır: $\mathbf{W}_1 \cdot \mathbf{W}_1^2 = \mathbf{W}_1^3 = \mathbb{1}$. Matrislerin yaptığı işlemler izlenirse bu durum zaten açıkça gözlenecektir.

$$\mathbf{W}_1^2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.32)$$

Sınırlı sayıdaki CNOT geçitlerini ve temsil eden matrisleri oluşturmak için ilkelerin belirlenmesi gereklidir. Yukarıda verilen iki özel CNOT geçiti örnekleri belirlenecek ilkelere uygundur.

1. Kontrol kutriti işlem sonunda değişmemelidir (ikili sistemlere uygun olarak ve karışıklık oluşmaması için kontrol kutriti $|0\rangle$ alınmıştır, ama istenirse $|1\rangle$ ve $|2\rangle$ 'de kontrol kutriti yapılabilir),
2. Matris ortogonal olmalıdır,
3. Matris birimsel olmalıdır.

4. BULGULAR VE TARTIŞMALAR

4.1 Spin İşlecilerinin Türetilmesi ve Bazı Spin İşlecileri

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

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

Algoritma 4.1 Farklı spin sistemleri için spin işlecilerinin ya da matris temsillerinin oluşturulmasında kullanılacak Algoritma.

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

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

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

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

olacaktır. \hat{S}_+ işlemcisinin özdeğerleri sadece $M_S = 0$ ve -1 , yani $|1\rangle$ ve $|2\rangle$ durumları için geçerlidir;

\hat{S}_+ matris işlemcisi,

$$\hat{S}_+ |S, M_S\rangle = \sqrt{S(S+1) - M_S(M_S+1)} |S, M_S+1\rangle \quad (4.3)$$

tanımından $\hat{S}_+ |1, 0\rangle = \sqrt{2} |1, 1\rangle$ ve $\hat{S}_+ |1, -1\rangle = \sqrt{2} |1, 0\rangle$ bulunacaktır. Buna göre.

$$\hat{S}_+ = \sqrt{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.4)$$

olacaktır. Benzer biçimde \hat{S}_- işlemcisinin özdeğerleri de $M_S = 1$ ve 0 için geçerli olduğundan $\hat{S}_- |1, 1\rangle = \sqrt{2} |1, 0\rangle$ ve $\hat{S}_- |1, 0\rangle = \sqrt{2} |1, -1\rangle$ sonuçları ile matris işlemcisi,

$$\hat{S}_- = \sqrt{2} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.5)$$

olarak bulunur. Bu iki matrisden \hat{S}_x ve \hat{S}_y işlemcileri de,

$$\hat{S}_x = \frac{1}{2} (\hat{S}_+ + \hat{S}_-) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.6)$$

$$\hat{S}_y = \frac{1}{2i} (\hat{S}_+ - \hat{S}_-) = \frac{1}{i\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.7)$$

olarak bulunur.

Spin 3/2 sistem için benzer işlemler tekrarlanırsa spin durumları ve matrisleri aşağıdaki gibi olacaktır.

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, |2\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, |3\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (4.8)$$

Denklemlerde öz durumlar kuantum bilgi işleme teorisine uygun olarak $|0\rangle = \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle, |1\rangle = \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, |2\rangle = \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle, |3\rangle = \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle$ olarak verilmiştir.

$$\hat{\mathbf{S}}^2 = \frac{15}{4} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \hat{S}_z = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{bmatrix} \quad (4.9)$$

$$\hat{S}_+ = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \hat{S}_- = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{bmatrix} \quad (4.10)$$

$$\hat{S}_x = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{bmatrix} \quad \hat{S}_y = \frac{1}{2i} \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ -\sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & -\sqrt{3} & 0 \end{bmatrix} \quad (4.11)$$

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

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |2\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |3\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |4\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (4.12)$$

$$\hat{\mathbf{S}}^2 = 6 \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \hat{S}_z = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2 \end{bmatrix} \quad (4.13)$$

$$\hat{S}_+ = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \hat{S}_- = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.14)$$

$$\hat{S}_x = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{6} & 0 & \sqrt{6} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \end{bmatrix} \quad \hat{S}_y = \frac{1}{2i} \begin{bmatrix} 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{6} & 0 & \sqrt{6} & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{6} & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & -2 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.15)$$

Diğer bütün spinlerin matris temsilleri aynı yöntemle türetilebilir.

4.2 Spin Dönme İşlemcileri

Spin dönme işlemcileri, diğer ismiyle kuantum mekanik dönme işlemcileri klasik karşılığı olmayan ve tamamıyla kuantum mekanik bir işlemcidir. Bu işlemcinin teorisi ve işlemin yapılmasında izlenebilecek yöntem Materyal ve Metot Bölümünde verilmiştir. Bu işlemleri uygulayarak aşağıda spin 1/2 ile spin 7/2 arası dönme işlemcileri oluşturulmuştur.

Spin dönme işlemcilerine, bundan sonra sadece dönme işlemcisi denilecektir ve hesaplanmasında üç temel husus dikkate alınmalıdır.

Birinci husus, kosinüs ve sinüs seri toplamlarında argüman olan spin işlemcilerinden \hat{S}_x ve \hat{S}_z gerçel, fakat \hat{S}_y sanaldır. Kosinüs serisinde tüm terimlerde argümanların kuvvetleri çift olduğundan, argüman gerçel de olsa sanal da olsa sonuç gerçel olacaktır. Öte yanda sinüs serisinde terimler tek kuvvetler olduğundan \hat{S}_x ve \hat{S}_z işlemcileri için toplamlar sanal, sanal olan \hat{S}_y için toplamlar gerçel olacaktır. Sonuçta \hat{R}_x ve \hat{R}_z işlemcilerinin terimleri kompleks ve \hat{R}_y 'nin elemanları gerçel olacaktır.

İkinci husus, dönme işlemcilerinin simetrik ve/veya antisimetrik özellikleri nedeniyle bazı işlem tasarrufunun yapılabilmesidir. Dolayısıyla tüm terimlerin ayrı ayrı hesaplanması gerekmekte, sadece işlemci matrisinin yaklaşık yarısını hesaplamak yeterli olmaktadır.

Üçüncü husus, dönme işlemcilerinin terimlerinin sembolik ifadelerinin bulunmasıdır. Bu ifadelerin bulunmasında, işleme konu terim için önce seri toplamı ile terimin 0° ile 180° arası açılarda değerleri $\varepsilon (= 10^{-9})$ duyarlılıkta hesaplanabilir, sonra bu değişime uyan fonksiyon en küçük kareler yöntemi ile bulunabilir. Yapılan işlemlerde dönme işlemcilerinin terimlerinin, ξ_k^{ij} i ve j elemanı için skaler bir katsayı ve θ açı olmak üzere,

$$r_{ij}(\theta) = \sum_{k=1}^K \xi_k^{(ij)} \cos^{K-k} \left(\frac{\theta}{2} \right) \sin^{k-1} \left(\frac{\theta}{2} \right) (i, j = 1, 2, 3 \dots K(2S + 1)) \quad (4.16)$$

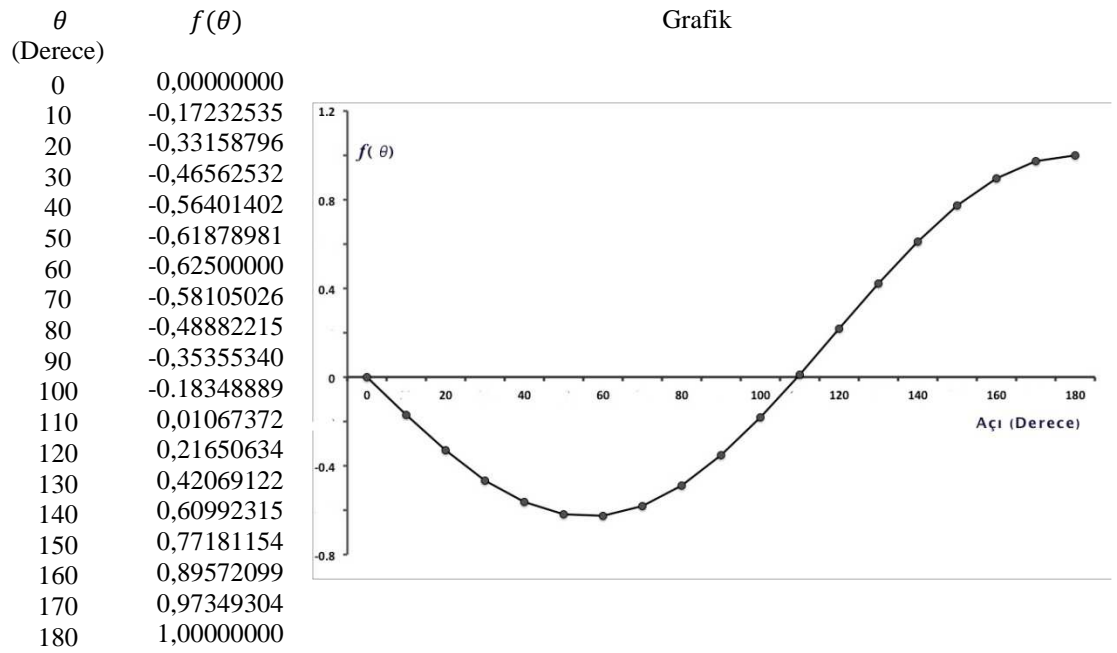
yapısında bir ya da bir kaç terimden oluştuğu gözlenmiştir. En küçük kareler yöntemi ile yapılan işlemlerde uyum tam bulunmuştur.

Örnek olarak spin 3/2 için \hat{R}_x işlemcisinin r_{23} elemanı alınmış olsun. Bu elemanın açığa göre değişimi ve grafiği Çizelge 4.1'de verilmiştir. Bu elemanın uyum fonksiyonu (deneme yanılma ile),

$$r_{23}(\theta) = \xi_0^{(23)}c^3 + \xi_1^{(23)}c^2s + \xi_2^{(23)}cs^2 + \xi_3^{(23)}s^3 \quad (4.17)$$

olarak alınmıştır. Sadelik için $c = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)$ ve $s = \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$ olarak tanımlanmıştır. En küçük kereler yöntemi ile işlem sonucunda terim katsayıları sırasıyla $\xi_0^{23} = 0$, $\xi_1^{23} = -2$, $\xi_2^{23} = 0$ ve $\xi_3^{23} = 1$ bulunmuştur. Buna göre spin 3/2 için \hat{R}_x işlemcisinin hesaplanan elemanı $r_{23} = s^3 - 2cs$ olacaktır.

Çizelge 4.1. Spin 3/2 için dönme işlemcisinin r_{23} elemanının açığa göre değişimi ve değişimin grafiği. Sürekli çizgi uyum fonksiyonunu göstermektedir



Aşağıda spin 1/2 ile spin 7/2 arası dönme işlemcileri algoritmada verilen işlem adımları izlenerek sayısal yöntemlerle belirlenmiştir. Dönme işlemcilerinde yazımda kolaylık için $c = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)$, $s = \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$ tanımları kullanılacaktır.

I- Spin 1/2 için dönme işlemcileri: $r_{ij} = \xi_1c + \xi_2s$.

$$\hat{R}_x = \begin{bmatrix} r_{11} & ir_{12} \\ ir_{12} & r_{11} \end{bmatrix} \quad \hat{R}_y = \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} \\ -r_{12} & r_{11} \end{bmatrix} \quad \hat{R}_z = \begin{bmatrix} r_{11} + ir_{12} & 0 \\ 0 & r_{11} - ir_{12} \end{bmatrix} \quad (4.18)$$

$$r_{11} = c, \quad r_{12} = s$$

II- Spin 1 için dönme işlemcileri: $r_{ij} = \xi_1 c^2 + \xi_2 cs + \xi_3 s^2$.

$$\hat{R}_x = \begin{bmatrix} r_{11} & ir_{12} & -r_{13} \\ ir_{12} & r_{22} & ir_{12} \\ -r_{13} & ir_{12} & r_{11} \end{bmatrix} \quad \hat{R}_y = \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} \\ -r_{12} & r_{22} & r_{12} \\ r_{13} & -r_{12} & r_{11} \end{bmatrix} \quad (4.19)$$

$$\hat{R}_z = \begin{bmatrix} z_{11} & 0 & 0 \\ 0 & z_{22} & 0 \\ 0 & 0 & z_{11}^* \end{bmatrix}$$

$$r_{11} = c^2 \quad r_{12} = \sqrt{2}cs \quad r_{13} = s^2 \quad r_{22} = c^2 - s^2$$

$$z_{11} = r_{22} + 2ir_{12}$$

III- Spin 3/2 için dönme işlemcileri: $r_{ij} = \xi_1 c^3 + \xi_2 c^2 s + \xi_3 cs^2 + \xi_4 s^3$.

$$\hat{R}_x = \begin{bmatrix} r_{11} & ir_{12} & -r_{13} & -ir_{14} \\ ir_{12} & r_{22} & -ir_{23} & -r_{13} \\ -r_{13} & -ir_{23} & r_{22} & ir_{12} \\ -ir_{14} & -r_{13} & ir_{12} & r_{11} \end{bmatrix} \quad \hat{R}_y = \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & r_{14} \\ -r_{12} & r_{22} & -r_{23} & r_{13} \\ r_{13} & r_{23} & r_{22} & r_{12} \\ -r_{14} & r_{13} & -r_{12} & r_{11} \end{bmatrix}$$

$$\hat{R}_z = \begin{bmatrix} z_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & z_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & z_{22}^* & 0 \\ 0 & 0 & 0 & z_{11}^* \end{bmatrix} \quad (4.20)$$

$$r_{11} = c^3$$

$$r_{22} = c^3 - 2cs^2$$

$$z_{11} = c^3 - 3cs^2 + i(s^3 - 3c^2s)$$

$$r_{12} = \sqrt{3}c^2s$$

$$r_{23} = -2c^2s + s^3$$

$$z_{22} = (c^3 + cs^2) + i(s^3 + c^2s)$$

$$r_{13} = \sqrt{3}cs^2$$

$$r_{14} = s^3$$

IV– Spin 2 için dönme işlemcileri: $r_{ij} = \xi_1 c^4 + \xi_2 c^3 s + \xi_3 c^2 s^2 + \xi_4 c s^3 + \xi_5 s^4$.

$$\begin{aligned}
\hat{R}_x &= \begin{bmatrix} r_{11} & ir_{12} & -r_{13} & -ir_{14} & r_{15} \\ ir_{12} & r_{22} & ir_{23} & r_{24} & -r_{14} \\ -r_{13} & ir_{23} & r_{33} & ir_{23} & -r_{13} \\ -ir_{14} & r_{24} & ir_{23} & r_{22} & ir_{12} \\ r_{15} & -ir_{14} & -r_{13} & ir_{12} & r_{11} \end{bmatrix} \\
\hat{R}_y &= \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & r_{14} & r_{15} \\ -r_{12} & r_{22} & r_{23} & -r_{24} & r_{14} \\ r_{13} & -r_{23} & r_{33} & r_{23} & r_{13} \\ -r_{14} & -r_{24} & -r_{23} & r_{22} & r_{12} \\ r_{15} & -r_{14} & r_{13} & -r_{12} & r_{11} \end{bmatrix} \\
\hat{R}_z &= \begin{bmatrix} z_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & z_{22} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & r_{33} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & z_{22}^* & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & z_{11}^* \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{4.21}$$

$$\begin{aligned}
r_{11} &= c^4 & r_{12} &= 2c^3 s \\
r_{22} &= c^4 - 3c^2 s^2 & r_{13} &= \sqrt{6} c^2 s^2 \\
r_{33} &= c^4 - 4c^2 s^2 + s^4 & r_{14} &= 2c s^3 \\
z_{11} &= (c^4 - 6c^2 s^2 + s^4) + 4i(c^3 s - c s^3) & r_{15} &= s^4 \\
z_{22} &= (c^4 - s^4) + 2i(c^3 s - c s^3) & r_{23} &= \sqrt{6} (c^3 s - c s^3) \\
z_{33} &= 1 & r_{24} &= s^4 - 3c^2 s^2
\end{aligned}$$

V– Spin 5/2 için dönme işlemcileri: $r_{ij} = \xi_1 c^5 + \xi_2 c^4 s + \xi_3 c^3 s^2 + \xi_4 c^2 s^3 + \xi_5 c s^4 + \xi_6 s^5$.

$$\begin{aligned}
\hat{R}_x &= \begin{bmatrix} r_{11} & ir_{12} & -r_{13} & -ir_{14} & r_{15} & ir_{16} \\ ir_{12} & r_{22} & -ir_{23} & -r_{24} & -ir_{25} & r_{15} \\ -r_{13} & -ir_{23} & r_{33} & -ir_{34} & -r_{24} & -ir_{14} \\ -ir_{14} & -r_{24} & -ir_{34} & r_{33} & -ir_{23} & -r_{13} \\ r_{15} & -ir_{25} & -r_{24} & -ir_{23} & r_{22} & ir_{12} \\ ir_{16} & r_{15} & -ir_{14} & -r_{13} & ir_{12} & r_{11} \end{bmatrix} \\
\hat{R}_y &= \begin{bmatrix} r_{11} & -r_{12} & -r_{13} & r_{14} & r_{15} & r_{16} \\ r_{12} & r_{22} & -r_{23} & -r_{24} & r_{25} & r_{15} \\ -r_{13} & r_{23} & r_{33} & -r_{34} & -r_{24} & r_{14} \\ -r_{14} & -r_{24} & r_{34} & r_{33} & -r_{23} & -r_{13} \\ r_{15} & -r_{25} & -r_{24} & r_{23} & r_{22} & -r_{12} \\ -r_{16} & r_{15} & -r_{14} & -r_{13} & r_{12} & r_{11} \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

$$\hat{R}_z = \begin{bmatrix} z_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & z_{22} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & z_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & z_{33}^* & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & z_{22}^* & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & z_{11}^* \end{bmatrix} \quad (4.22)$$

$$\begin{aligned} r_{11} &= c^5 & r_{12} &= \sqrt{5}c^4s & r_{13} &= \sqrt{10}c^3s^2 \\ r_{14} &= \sqrt{10}c^2s^3 & r_{15} &= \sqrt{10}cs^4 & r_{16} &= s^5 \\ r_{22} &= c^5 - 4c^3s^2 & r_{23} &= \sqrt{18}c^2s^3 - \sqrt{8}c^4s, & r_{24} &= \sqrt{18}c^3s^2 - \sqrt{8}cs^4 \\ r_{25} &= 4c^2s^3 - s^5 & & & & \\ r_{33} &= c^5 - 4c^3s^2 + 3cs^4 & r_{34} &= -3c^4s + 6c^2s^3 - s^5 & & \\ z_{11} &= (c^5 - 10c^3s^2 + 5cs^4) + i(5c^4s - 10c^2s^3 + s^5) \\ z_{22} &= (c^5 - 2s^3s^2 - 3cs^4) + i(3c^4s - 2c^2s^3 - s^5), \\ z_{33} &= (c^5 - 2s^3s^2 + cs^4) + i(c^4s - 2c^2s^3 + s^5) \end{aligned}$$

VI- Spin 3 için dönme işlemcileri: $r_{ij} = \xi_1c^6 + \xi_2c^5s + \xi_3c^4s^2 + \xi_4c^3s^3 + \xi_5c^2s^4 + \xi_6cs^5 + \xi_7s^6$.

$$\hat{R}_x = \begin{bmatrix} r_{11} & ir_{12} & -r_{13} & -ir_{14} & r_{15} & ir_{16} & -r_{17} \\ ir_{12} & r_{22} & -ir_{23} & -r_{24} & -ir_{25} & r_{26} & ir_{16} \\ r_{13} & -ir_{23} & r_{33} & -ir_{34} & r_{35} & -ir_{25} & r_{15} \\ -ir_{14} & -r_{24} & -ir_{34} & r_{44} & -ir_{34} & -r_{24} & -ir_{14} \\ r_{15} & -ir_{25} & r_{35} & -ir_{34} & r_{33} & -ir_{23} & -r_{13} \\ ir_{16} & r_{26} & -ir_{25} & -r_{24} & -ir_{23} & r_{22} & -ir_{12} \\ -r_{17} & ir_{16} & r_{15} & -ir_{14} & -r_{13} & ir_{12} & r_{11} \end{bmatrix}$$

$$\hat{R}_y = \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & r_{14} & r_{15} & r_{16} & r_{17} \\ -r_{12} & r_{22} & -r_{23} & r_{24} & r_{25} & r_{26} & r_{16} \\ r_{13} & r_{23} & r_{33} & -r_{34} & -r_{35} & r_{25} & r_{15} \\ -r_{14} & r_{24} & r_{34} & r_{44} & -r_{34} & r_{24} & r_{14} \\ r_{15} & -r_{25} & -r_{35} & r_{34} & r_{33} & -r_{23} & r_{13} \\ -r_{16} & r_{26} & -r_{25} & r_{24} & r_{23} & r_{22} & r_{12} \\ r_{17} & -r_{16} & r_{15} & -r_{14} & r_{13} & -r_{12} & r_{11} \end{bmatrix} \quad (4.23)$$

$$\hat{R}_z = \begin{bmatrix} z_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & z_{22} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & z_{33} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & z_{44} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & z_{33}^* & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & z_{22}^* & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & z_{11}^* \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned}
r_{11} &= c^6 & r_{12} &= \sqrt{6}c^5s \\
r_{13} &= \sqrt{15}c^4s^2 & r_{14} &= \sqrt{20}c^3s^3 \\
r_{15} &= \sqrt{15}c^2s^4 & r_{16} &= 6cs^5 \\
r_{17} &= s^6 & r_{22} &= c^6 - 5c^4s^2 \\
r_{23} &= -\sqrt{10}c^5s + \sqrt{40}c^3s^3 & r_{24} &= \sqrt{30}(c^4s^2 + c^2s^4) \\
r_{25} &= \sqrt{40}c^3s^3 - \sqrt{10}cs^5 & r_{26} &= 5c^2s^4 + s^6 \\
r_{33} &= c^6 - 8c^4s^2 + 6c^2s^4 & r_{34} &= \sqrt{108}c^3s^3 - \sqrt{12}(c^5s + cs^5) \\
r_{35} &= -6c^4s^2 + 8c^2s^4 - s^6 & r_{44} &= c^6 - 9(c^4s^2 + c^2s^4) - s^6 \\
z_{11} &= (c^6 - 15c^4s^2 + 15c^2s^4 - s^6) + i(6c^5s - 20c^3s^3 + 6cs^5) \\
z_{22} &= (c^6 - 5c^4s^2 - 5c^2s^4 + s^6) + 4i(c^5s - cs^5) \\
z_{33} &= (c^6 + c^4s^2 - c^2s^4 - s^6) + 2i(c^5s + 2c^3s^3 + cs^5), \\
z_{44} &= 1
\end{aligned}$$

VII- Spin 7/2 için dönme işlemcileri: $r_{ij} = \xi_1c^7 + \xi_2c^6s + \xi_3c^5s^2 + \xi_4c^4s^3 + \xi_5c^3s^4 + \xi_6c^2s^5 + \xi_7cs^6 + \xi_8s^7$.

$$\hat{R}_x = \begin{bmatrix} r_{11} & ir_{12} & r_{13} & ir_{14} & r_{15} & ir_{16} & r_{17} & r_{18} \\ ir_{12} & r_{22} & ir_{23} & r_{24} & ir_{25} & r_{26} & ir_{27} & r_{17} \\ r_{13} & ir_{23} & r_{33} & ir_{34} & r_{35} & ir_{36} & r_{26} & ir_{16} \\ ir_{14} & r_{24} & ir_{34} & r_{44} & ir_{45} & r_{35} & ir_{25} & r_{15} \\ r_{15} & ir_{25} & r_{35} & ir_{45} & r_{44} & ir_{34} & r_{24} & ir_{14} \\ ir_{16} & r_{26} & ir_{36} & r_{35} & ir_{34} & r_{33} & ir_{23} & r_{13} \\ r_{17} & ir_{27} & r_{26} & ir_{25} & r_{24} & ir_{23} & r_{22} & ir_{12} \\ ir_{18} & r_{17} & ir_{16} & r_{15} & ir_{14} & r_{13} & ir_{12} & r_{11} \end{bmatrix}$$

$$\hat{R}_y = \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & -r_{14} & r_{15} & r_{16} & -r_{17} & -r_{18} \\ -r_{12} & r_{22} & r_{23} & -r_{24} & -r_{25} & r_{26} & r_{27} & -r_{17} \\ r_{13} & -r_{23} & r_{33} & r_{34} & -r_{35} & -r_{36} & r_{26} & r_{16} \\ r_{14} & -r_{24} & -r_{34} & r_{44} & r_{45} & r_{35} & -r_{25} & r_{15} \\ r_{15} & r_{25} & r_{35} & -r_{45} & r_{44} & r_{34} & -r_{24} & -r_{14} \\ -r_{16} & r_{26} & r_{36} & -r_{35} & -r_{34} & r_{33} & r_{23} & r_{13} \\ -r_{17} & -r_{27} & r_{26} & r_{25} & -r_{24} & -r_{23} & r_{22} & r_{12} \\ r_{18} & r_{17} & -r_{16} & r_{15} & r_{14} & r_{13} & -r_{12} & r_{11} \end{bmatrix}$$

$$\hat{R}_z = \begin{bmatrix} z_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & z_{22} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & z_{33} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & z_{44} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & z_{44}^* & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & z_{33}^* & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & z_{22}^* & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & z_{11}^* \end{bmatrix}$$

(4.24)

$$\begin{aligned}
r_{11} &= c^7 & r_{12} &= \sqrt{7}c^6s, \\
r_{13} &= \sqrt{21}c^5s^2 & r_{14} &= \sqrt{35}c^4s^3 \\
r_{15} &= \sqrt{35}c^3s^4 & r_{16} &= \sqrt{21}c^2s^5 \\
r_{17} &= \sqrt{7}cs^6 & r_{18} &= s^7 \\
r_{22} &= c^7 - 6c^5s^2 & r_{23} &= -\sqrt{12}c^6s + \sqrt{75}c^4s^3 \\
r_{24} &= -\sqrt{45}c^5s^2 + \sqrt{80}c^3s^4 & r_{25} &= \sqrt{80}c^4s^3 - \sqrt{45}c^2s^5 \\
r_{26} &= \sqrt{75}c^3s^4 - \sqrt{12}cs^6 & r_{27} &= s^7 - 6c^5s^2 \\
r_{33} &= c^7 - 10(c^5s^2 - 6c^3s^4) & & \\
r_{34} &= \sqrt{15}c^6s - \sqrt{240}c^4s^3 + \sqrt{60}c^2s & & \\
r_{35} &= \sqrt{60}c^5s^2 - \sqrt{240}c^3s^4 + \sqrt{15}cs^6 & r_{36} &= s^7 - 10s^5c^2 + 10c^3s^4 \\
r_{44} &= c^7 - 12c^5s^2 + 18c^3s^4 - 4cs^6 & & \\
r_{45} &= 4c^6s - 18c^4s^3 + 12c^2s^5 - s^7 & &
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
z_{11} &= (c^6 - 15c^4s^2 + 15c^4s^2 - s^6) - i(20c^3s^3 - 6c^5s - 6c^5s) \\
z_{22} &= -(c^6 - 5c^4s^2 - 15c^2s^4 + s^6) - 4i(cs^5 - c^5s) \\
z_{33} &= (c^6 + c^4s^2 - c^2s^4 - s^6) - 2i(c^5s + 2c^3s^3 + cs^5) \\
z_{44} &= (c^7 + 3c^5s^2 + 3c^3s^4 + cs^6) - i(c^6s + 3c^4s^3 + 3c^2s^5 + s^7)
\end{aligned}$$

4.3 Kutrit Sistemlerde (S = 1) Enerji Düzeylerinin Matris Gösterimi ve Geçiş Enerjileri

4.3.1 Kutrit sistemde (S=1) $I_1 = 0$, $I_2 = 0$ durumu için enerji düzeyleri ve matris temsilleri ile gösterimi

Kutrit sistemi oluşturan biradikaller ile enerji birimindeki EPR Hamiltonieni Denklem 3.1'de ve frekans birimindeki Hamiltonieni Denklem 3.6'da verilmiştir. (S = 1) ve iki çekirdek spinine sahip sistem için genel Hamiltonien, birinci mertebe yaklaşıklıkla (köşegen dışı terimler küçük olmaları nedeniyle gözardı edilerek),

$$\hat{\mathcal{W}} = \omega_z S_z + \omega_D \left[S_z^2 - \frac{1}{3} S(S+1) \right] + \omega_{a_1} S_z I_{1z} + \omega_{a_2} S_z I_{2z} \quad (4.25)$$

biçiminde yazılır. (S = 1, $M_S = 1, 0, -1$) spin sisteminde $I_1 = 0$, $I_2 = 0$ durumu için spin matrisleri yerine yazılırsa,

$$\hat{\mathcal{W}} = \omega_z \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} + \frac{\omega_D}{3} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.26)$$

elde edilir. Sonuçta dipolar etkileşmeden ötürü,

$$E_1 = \omega_z + \frac{\omega_D}{3}, \quad E_2 = -\frac{2\omega_D}{3} \quad \text{ve} \quad E_3 = -\omega_z + \frac{\omega_D}{3}$$

olmak üzere frekans biriminde üç enerji düzeyi oluşacaktır. Seçim kurallarına göre ($\Delta M_S = \pm 1$) iki frekansta geçiş gözlenecektir: $\omega_1 = E_1 - E_2$ ve $\omega_2 = E_2 - E_3$.

$$\omega_1 = \omega_Z + \omega_D \text{ ve } \omega_2 = \omega_Z - \omega_D \quad (4.27)$$

Bu spin sistemi ile ilgili bir örnek Uygulama 2’de verilmiştir.

4.3.2 (S=1) sistemde $I_1 = 1$, $I_2 = 0$ durumu için enerji düzeyleri ve matris temsilleri ile gösterimi

Denklem 4.25’de verilen Hamiltoniende $S = 1$, $I_1 = 1$ ve $I_2 = 0$ alınırsa spin matrisleri 9×9 boyutlarında olacaktır. Spin matrisleri S , S_x , S_y , S_z , I_z kutrit sistemde 3×3 boyutlu spin işlemciler ve $\mathbb{1}$, 3×3 boyutlu birim matris olmak üzere genişletilmiş 9×9 boyutlu $S^{(2)}$, $S_x^{(2)}$, $S_y^{(2)}$, $S_z^{(2)}$, $I_z^{(2)}$ matrisleri:

$$S^{(2)} = S \otimes \mathbb{1}, S_x^{(2)} = S_x \otimes \mathbb{1}, S_y^{(2)} = S_y \otimes \mathbb{1}, S_z^{(2)} = S_z \otimes \mathbb{1}, I_z^{(2)} = \mathbb{1} \otimes I_z \quad (4.28)$$

olmak üzere frekans birimindeki Hamiltonien $|M_S; M_{I_1}\rangle$ bazında 9 enerji düzeyi oluşturacaktır. Bu spin sisteminin puls tepkisi için yapılan farklı bir örnek çözüm Kesim 4.4’de verilmiştir. Her ne kadar sonuçlar aynı ise de bu kesimde yapılan işlem sürekli dalga spektroskopisine göre, Kesim 4.4’de yapılan çözüm ise puls spektroskopisine göredir. Hamiltonien matrisinde köşegen dışı elemanlar olması nedeniyle, özdeğerler ve karşılık gelen öz durumlar bulunarak matris köşegen hale getirilmelidir. Ancak bu işlemin 9×9 boyutunda bir matris için yapılmasının zorluğu ve ayrıca köşegen dışı elemanların katkılarının küçük olması nedeniyle bu etkileşimler gözardı edilerek saf durumların enerjileri bulunabilir. $S = 1$, $I_1 = 1$ ve $I_2 = 0$ olduğundan sadelik için olduğundan $|M_S, M_{I_1}\rangle$ bazında bu enerjiler Denklem 4.29’da verilmiştir.

Çizelge 4.2, bu sistem için Hamiltonien matrisini köşegen dışı elemanlarla birlikte vermektedir. Bu çizelgede köşegen dışı elemanlar gözardı edilirse kalan köşegen elemanlar (Denklem 4.30) enerjilerine karşılık gelen frekansları verecektir.

$$T_1: |1; 1\rangle \rightarrow E_1 = \omega_Z + \frac{1}{3}\omega_D + \omega_{a_1}$$

$$T_1: |1; 0\rangle \rightarrow E_2 = \omega_Z + \frac{1}{3}\omega_D$$

$$T_1: |1; -1\rangle \rightarrow E_3 = \omega_Z + \frac{1}{3}\omega_D - \omega_{a_1}$$

$$T_0: |0; 1\rangle \rightarrow E_4 = -\frac{2}{3}\omega_D$$

$$T_0: |0; 0\rangle \rightarrow E_5 = -\frac{2}{3}\omega_D \quad (4.29)$$

$$T_0: |0; -1\rangle \rightarrow E_6 = -\frac{2}{3}\omega_D$$

$$T_{-1}: |-1; 1\rangle \rightarrow E_7 = -\omega_z + \frac{1}{3}\omega_D - \omega_{a_1}$$

$$T_{-1}: |-1; 0\rangle \rightarrow E_8 = -\omega_z + \frac{1}{3}\omega_D$$

$$T_{-1}: |-1; -1\rangle \rightarrow E_9 = -\omega_z + \frac{1}{3}\omega_D + \omega_{a_1}$$

$\Delta M_S = \pm 1$ seçim kuralına uygun olarak üçlü iki grup halinde altı geçiş frekansı gözlenecektir. Bu spin sistemi ile ilgili bir örnek Uygulama 4'te verilmiştir.

$$\omega_1 = \omega_z + \omega_D + \omega_{a_1}; \quad \omega_2 = \omega_z + \omega_D; \quad \omega_3 = \omega_z + \omega_D - \omega_{a_1} \quad (4.30)$$

$$\omega_4 = \omega_z - \omega_D + \omega_{a_1}; \quad \omega_5 = \omega_z - \omega_D; \quad \omega_6 = \omega_z - \omega_D - \omega_{a_1}$$

4.3.3 ($S = 1, I_1 = 1, I_2 = 1$) sistemde enerji düzeyleri ve geçiş frekansları

Denklem 4.25'de verilen Hamiltoniende $S = 1, I_1 = 1$ ve $I_2 = 1$ alınırsa spin matrisleri 27×27 boyutlarında olacaktır. Bunun anlamı, bu spin sisteminin 27 enerji düzeyi oluşturacağıdır. Sadelik için $|M_S; M_{I_1}, M_{I_2}\rangle$ bazında enerji durumları Denklem 4.31'de verilmiştir (Örnek Hamiltonien matrisi Çizelge 4.2'de köşegen dışı elemanlar gözardı edilerek ve spinler bu kesimdeki duruma uyarlanarak oluşturulur).

$$T_1: |1; 1, 1\rangle \rightarrow E_1 = \omega_z + \frac{1}{3}\omega_D + \omega_{a_1} + \omega_{a_2}$$

$$T_1: |1; 1, 0\rangle \rightarrow E_2 = \omega_z + \frac{1}{3}\omega_D + \omega_{a_1}$$

$$T_1: |1; 1, -1\rangle \rightarrow E_3 = \omega_z + \frac{1}{3}\omega_D + \omega_{a_1} - \omega_{a_2}$$

$$T_1: |1; 0, 1\rangle \rightarrow E_4 = \omega_z + \frac{1}{3}\omega_D + \omega_{a_2}$$

$$T_1: |1; 0, 0\rangle \rightarrow E_5 = \omega_z + \frac{1}{3}\omega_D$$

$$T_1: |1; 0, -1\rangle \rightarrow E_6 = \omega_z + \frac{1}{3}\omega_D - \omega_{a_2}$$

$$T_1: |1; -1, 1\rangle \rightarrow E_7 = \omega_z + \frac{1}{3}\omega_D - \omega_{a_1} + \omega_{a_2}$$

$$\begin{aligned}
T_1: |1; -1, 0\rangle &\rightarrow E_8 = \omega_z + \frac{1}{3}\omega_D - \omega_{a_1} \\
T_1: |1; -1, -1\rangle &\rightarrow E_9 = \omega_z + \frac{1}{3}\omega_D - \omega_{a_1} - \omega_{a_2} \\
T_0: |0; 1, 1\rangle &\rightarrow E_{10} = -\frac{2}{3}\omega_D \\
T_0: |0; 1, 0\rangle &\rightarrow E_{11} = -\frac{2}{3}\omega_D \\
T_0: |0; 1, -1\rangle &\rightarrow E_{12} = -\frac{2}{3}\omega_D \\
T_0: |0; 0, 1\rangle &\rightarrow E_{13} = -\frac{2}{3}\omega_D \\
T_0: |0; 0, 0\rangle &\rightarrow E_{14} = -\frac{2}{3}\omega_D \\
T_0: |0; 0, -1\rangle &\rightarrow E_{15} = -\frac{2}{3}\omega_D \\
T_0: |0; -1, 1\rangle &\rightarrow E_{16} = -\frac{2}{3}\omega_D \\
T_0: |0; -1, 0\rangle &\rightarrow E_{17} = -\frac{2}{3}\omega_D \\
T_0: |0; -1, -1\rangle &\rightarrow E_{18} = -\frac{2}{3}\omega_D \\
T_{-1}: |-1; 1, 1\rangle &\rightarrow E_{19} = -\omega_z + \frac{1}{3}\omega_D - \omega_{a_1} - \omega_{a_2} \\
T_{-1}: |-1; 1, 0\rangle &\rightarrow E_{20} = -\omega_z + \frac{1}{3}\omega_D - \omega_{a_1} \\
T_{-1}: |-1; 1, -1\rangle &\rightarrow E_{21} = -\omega_z + \frac{1}{3}\omega_D - \omega_{a_1} + \omega_{a_2} \\
T_{-1}: |-1; 0, 1\rangle &\rightarrow E_{22} = -\omega_z + \frac{1}{3}\omega_D - \omega_{a_2} \\
T_{-1}: |-1; 0, 0\rangle &\rightarrow E_{23} = -\omega_z + \frac{1}{3}\omega_D \\
T_{-1}: |-1; 0, -1\rangle &\rightarrow E_{24} = -\omega_z + \frac{1}{3}\omega_D + \omega_{a_2} \\
T_{-1}: |-1; -1, 1\rangle &\rightarrow E_{25} = -\omega_z + \frac{1}{3}\omega_D + \omega_{a_1} - \omega_{a_2}
\end{aligned} \tag{4.31}$$

$$T_{-1}: |-1; -1, 0\rangle \rightarrow E_{26} = -\omega_z + \frac{1}{3}\omega_D + \omega_{a_1}$$

$$T_{-1}: |-1; -1, -1\rangle \rightarrow E_{27} = -\omega_z + \frac{1}{3}\omega_D + \omega_{a_1} + \omega_{a_2}$$

$S = 1$, $I_1 = 1$ ve $I_2 = 1$ spin sistemi için Denklem 4.31'de verilen frekans birimindeki enerji durumları $\Delta M_S = \pm 1$ seçim kuralına uygun olarak dipol yarılmasından dolayı her birisi 9 eşit şiddette çizgiden oluşan iki grupta toplam 18 izinli geçiş verecektir. Fakat iki çekirdeğin özdeş olması durumunda bazı çizgilerin üstüste gelmesi nedeniyle şiddetleri $1 : 2 : 3 : 2 : 1$ olan iki grup çizgiden oluşan spektrum verecektir. Seçim kuralına uyan geçiş frekansları Denklem 4.32'de ve örnek spektrum eşit ve farklı aşırı ince yapı yarılmaları için Uygulama 5 ve 6'da verilmiştir.

$$\begin{aligned}
\omega_1 &= \omega_z + \omega_D + \omega_{a_1} + \omega_{a_2} \\
\omega_2 &= \omega_z + \omega_D + \omega_{a_1} \\
\omega_3 &= \omega_z + \omega_D + \omega_{a_1} - \omega_{a_2} \\
\omega_4 &= \omega_z + \omega_D + \omega_{a_2} \\
\omega_5 &= \omega_z + \omega_D \\
\omega_6 &= \omega_z + \omega_D - \omega_{a_2} \\
\omega_7 &= \omega_z + \omega_D - \omega_{a_1} + \omega_{a_2} \\
\omega_8 &= \omega_z + \omega_D - \omega_{a_1} \\
\omega_9 &= \omega_z + \omega_D - \omega_{a_1} - \omega_{a_2} \\
\omega_{10} &= \omega_z - \omega_D + \omega_{a_1} + \omega_{a_2} \\
\omega_{11} &= \omega_z - \omega_D + \omega_{a_1} \\
\omega_{12} &= \omega_z - \omega_D + \omega_{a_1} - \omega_{a_2} \\
\omega_{13} &= \omega_z - \omega_D + \omega_{a_2} \\
\omega_{14} &= \omega_z - \omega_D \\
\omega_{15} &= \omega_z - \omega_D - \omega_{a_2} \\
\omega_{16} &= \omega_z - \omega_D - \omega_{a_1} + \omega_{a_2} \\
\omega_{17} &= \omega_z - \omega_D - \omega_{a_1} \\
\omega_{18} &= \omega_z - \omega_D - \omega_{a_1} - \omega_{a_2}
\end{aligned} \tag{4.32}$$

4.4 Yoğunluk Matrisi Teorisi ile Biradikal Spektrumu ve Puls Dizileri

Bölüm 2 (Genel Bilgiler) ve Bölüm 3’de (Materyal ve Metot) yoğunluk matrisi teorisi hakkında temel bilgiler verilmiştir. Bu kesimde yoğunluk matrisi teorisinin EPR spektroskopisindeki uygulaması üzerine bazı örnekler verilmiştir. Radikal çiftleri bu çalışmanın konusu olduğu için seçilen örnekler doğal olarak bu yapı üzerindedir.

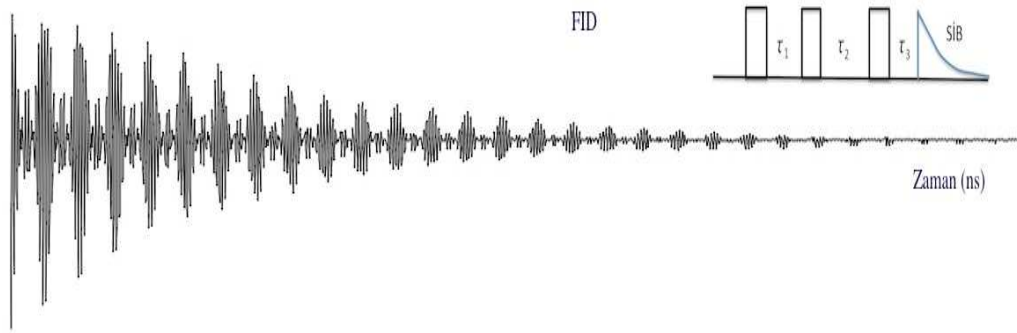
Yoğunluk matrisi teorisinde ilk aşama kartezyen koordinat sisteminin z eksenine doğrultusunda kutuplanmış olan kararlı haldeki spin sistemine bir θ pulsu uygulayarak spini z eksenine göre θ kadar yatırmaktır. Eğer sadece bir spektrum alınacaksa pulstan sonra bir τ süresi kadar beklenir ve zamana göre değişen SİB sinyali kaydedilir. Bekleme süresinde ve SİB sırasında Hamiltonien etkilidir. Bu konular Genel Bilgiler ve Materyal ve Metot bölümlerinde irdelenmiş ve Algoritma 4.2’de maddeler halinde özetlenmiştir.

Amaca bağlı farklı spektrumlar elde etmek için seçici pulslar uygulanabilir ve en sonunda SİB kaydedilir. Uygulama örneklerinde iki adet seçici puls dizisi de bulunmaktadır. Bu örnekler numuneye ve konuya bağlı olarak çoğaltılabilir.

Algoritma 4.2. Pulslu EPR tekniğinde yoğunluk matrisi teorisi ile puls dizisi deneyinin algoritması (Şekil 3.1, örnek puls dizisi ile birlikte izlenecektir).

- 1 Başlangıçta sistemi kararlı kabul et ve sadelik için yoğunluk matrisinin başlangıç durumunu $\hat{\rho}_0 = \hat{S}_z$ al (manyetik alan kartezyen koordinat sisteminin z eksenine yönündedir).
- 2 $t_0 = 0$ anında kararlı haldeki spini x veya y eksenine etrafında θ_1 açısı kadar olmaktan çıkar ve etkin Hamiltonien devreye girer (Denklem 3.1). Bu aşamada yoğunluk matrisi döndüren, yani spini z eksenine göre θ_1 açısı kadar yatıran bir puls uygula. Spin sistemi $\hat{\rho}_1 = \hat{R}_{1\alpha}(\theta_1)\hat{\rho}_0\hat{R}_{1\alpha}^\dagger(\theta_1)$, ($\alpha : x$ veya y) olacaktır.
- 3 İlk puls uygulandıktan sonra sistem kararlı zamana göre değişecektir. Hamiltonien gerçekte zamandan bağımsızdır fakat argümanı Hamiltonien olan üstel işlemci $\hat{\Omega}(t_1) = e^{-i\mathcal{H}t_1/\hbar}$ biçiminde zamana bağlıdır. Yoğunluk matrisi bu aşamada zamana bağlı biçimde $\hat{\rho}_2 = \hat{\Omega}(t_1)\hat{\rho}_1\hat{\Omega}^\dagger(t_1)$ olacaktır.

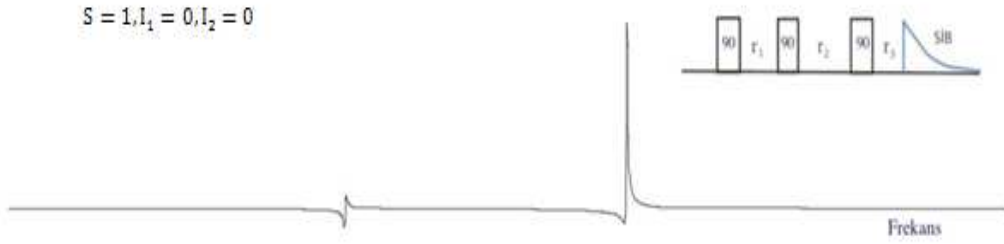
- 4 Pulstan sonra bir süre beklenerek dekoharens (uyumsuzluk) oluşumu beklenir. Sonra gerekiyorsa θ_2 açısı kadar yatıran ikinci x veya y pulsu uygulanır. Pulstan sonra yoğunluk matrisi $\hat{\rho}_3 = \hat{R}_{2\alpha}(\theta_2)\hat{\rho}_2\hat{R}_{2\alpha}^\dagger(\theta_2)$, (α : x veya y) olacaktır.
- 5 Pulstan sonra tekrar t_2 süresi kadar beklenir. Bu süre sonunda yoğunluk matrisi $\hat{\rho}_4 = \hat{\Omega}(t_2)\rho_3\Omega^\dagger(t_2)$ halini alacaktır.
- 6 Eğer başka (seçici) pulslar uygulamak gerekiyorsa onlar da uygulanır. Her bir pulstan ve bekleme süresinden sonra yoğunluk matrisi sırasıyla $\hat{\rho}_{N-1} = \hat{R}_{2\alpha}\hat{\rho}_{N-2}\hat{R}_{2\alpha}^\dagger$ ve $\hat{\rho}_N = \hat{\Omega}(t_N)\rho_{N-1}\Omega^\dagger(t_N)$ halini alır.
- 7 Son θ_N pulsandandan sonra yine t_M süresi kadar beklenerek SİB (FID) sinyali kaydedilir. Bu kayıt işlemi teorik olarak sinyal ortalama ya da çeyrek bölge deteksiyonu olarak isimlendirilen işlemle temsil edilir. Bu işlem yoğunluk matrisinin son haline artırma işlemcisi uygulanarak ve her bir Δt zaman artışı için sonuç matrisin izi alınarak yapılır: $J(t + \Delta t) = \text{İz}(\hat{S}_+\hat{\rho}_{t+\Delta t})$
- 8 Sönümlü SİB kaydı tamamlandıktan sonra zaman uzayındaki bu sinyalin Fourier dönüşümü alınarak frekans uzayındaki spektrum elde edilir.



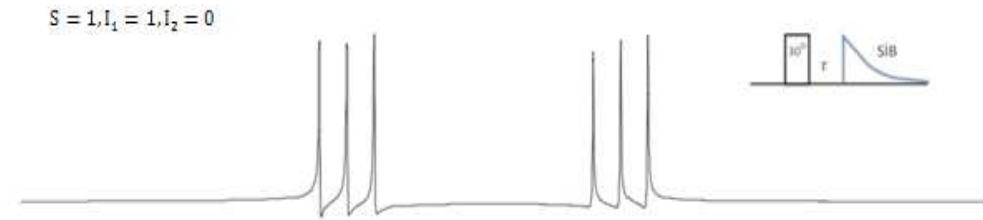
Şekil 4.1. Uygulama 1: Bir SİB sinyali. Bu SİB $\mathbf{S} = \mathbf{1}$, $\mathbf{I}_1 = \mathbf{1}$ ve $\mathbf{I}_2 = \mathbf{1}$ spin sisteminde alınmıştır, dolayısıyla SİB farklı frekans ve şiddette sönümlü sinüsel eğrilerin toplanmasıyla oluşmuştur



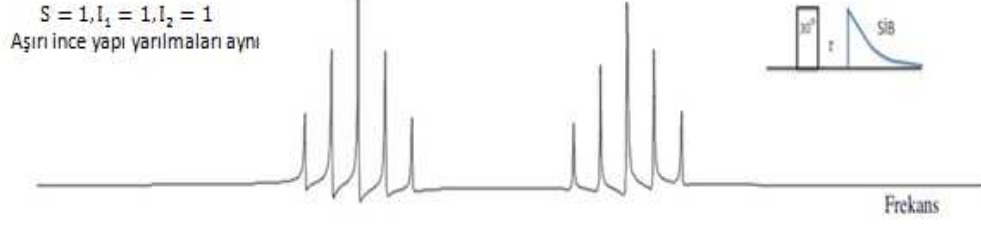
Şekil 4.2. Uygulama 2: $S = 1$ ve $I_1 = 0$ ve $I_2 = 0$ sistemi. $\theta = 30^\circ$ pulsu uygulandıktan ve peşinden $\tau = 10$ ns beklendikten sonra alınan SİB sinyalinin Fourier dönüşümü frekans uzayındaki spektrumu verir (spektrumda faz düzeltmesi yapılmamıştır, dolayısıyla soğurma veya dağılma spektrumu olmasının bu aşamada önemi yoktur). Spektrum dipolar etkileşmeden dolayı iki enerji düzeyine yarılmakta, dolayısıyla iki geçiş çizgisi oluşturmaktadır



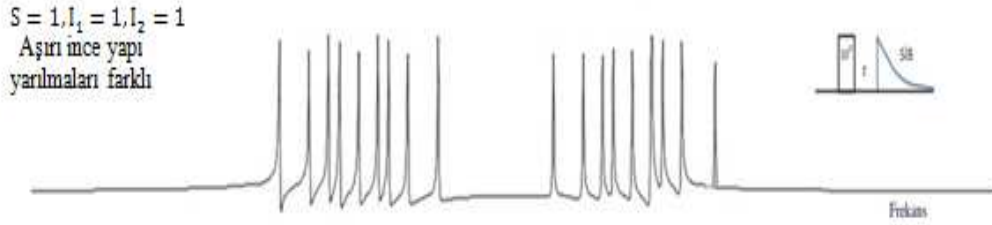
Şekil 4.3. Uygulama 3: Seçici puls uygulamasıyla $S = 1$, $I_1 = 0$ ve $I_2 = 0$ spin sisteminde geçişlerden birisi (bu uygulamada düşük frekanstaki geçiş) söndürülmüştür



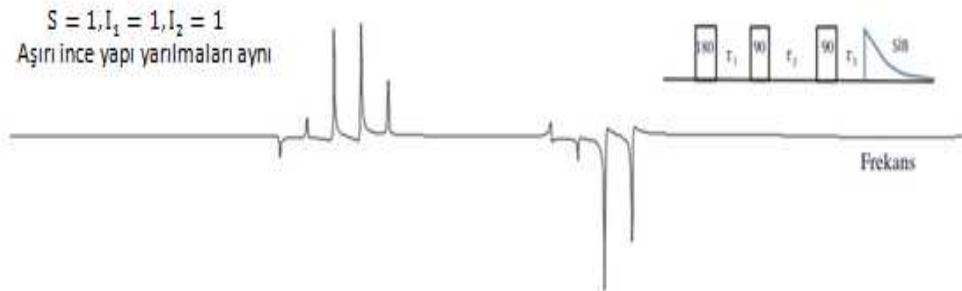
Şekil 4.4. Uygulama 4: Tek bir puls ile ve seçici puls uygulanmaksızın $S = 1$, $I_1 = 1$ ve $I_2 = 0$ spin sisteminin oluşturduğu geçişler. Spektrumda dipolar yarılmadan dolayı önce ikiye ve her bir dipolar geçiş çekirdek spininden dolayı üçe yarılmaktadır



Şekil 4.5. Uygulama 5: Tek bir puls ile ve seçici puls uygulanmaksızın $S = 1$, $I_1 = 1$ ve $I_2 = 1$ spin sisteminin oluşturduğu geçişler. İki çekirdeğin aşırı ince yapı yarılımları eşittir. Spektrumda dipolar yarılmadan dolayı önce ikiye ve her bir dipolar geçiş özdeş çekirdek spininden dolayı 1 : 2 : 3 : 2 : 1 şiddet dağılımını vermektedir



Şekil 4.6. Uygulama 6: Tek bir puls ile ve seçici puls uygulanmaksızın $S = 1$, $I_1 = 1$ ve $I_2 = 1$ spin sisteminin oluşturduğu geçişler. İki çekirdeğin aşırı ince yapı yarılımları farklıdır. Spektrumda dipolar yarılmadan dolayı önce ikiye ve her bir dipolar geçiş farklı çekirdek spininden dolayı eşit şiddette dokuz çizgi vermektedir



Şekil 4.7. Uygulama 7: Seçici puls uygulanarak $S = 1$, $I_1 = 1$ ve $I_2 = 1$ spin sisteminde bazı geçişlerin söndürülmesine ve bazılarının da fazlarının terslenmesine örnek. İki çekirdeğin aşırı ince yapı yarılımları eşittir

4.5 Çarpım İşlemci Teorisinin EPR Spektroskopisine Uygulanması: Radikal Çiftleri

Yoğunluk matrisi tekniğinde değerlendirilen üstel işlemcilerin seri açılımı ile elde edilen yoğunluk matrisi yerine işlemlerde ekonomi sağlayan çarpım işlemci teorisi spin işlemcilerinin kendisini kullanır. Materyal ve Metot Bölümünde kısaca ele alındığı üzere çarpım işlemci teorisinde aslında yapılan spin işlemcilerinin komütasyon bağıntıları söz konusudur.

Zamana bağlı Schrödinger denkleminde elde edilen Hamiltonienin zamana göre gelişiminin, $\hat{\mathcal{W}} = \hat{\mathcal{H}}/\hbar$, \hat{A} bir spin işlemcisi ve $\hat{\Omega}$ Hamiltonien terimlerinden birisinin işlemcisi olmak üzere $e^{-i\hat{\Omega}t}\hat{A}e^{i\hat{\Omega}t}$ olduğu Genel Bilgiler ile Materyal ve Metot bölümlerinde ele alınmıştır. Bu kesimde işlemcilerin radikal çiftleri için uygulamaları yapılacaktır. Radikal çiftlerinde eşleşmiş elektron spinlerinin $I_1 = 1$ ve $I_2 = 0$ olan iki çekirdekle etkileştiği, ayrıca Hamiltoniende daha önce ihmal edilen ikinci mertebeye terimlerin de, $\omega_{a_1}(S_x I_{1x} + S_y I_{1y})$ dikkate alındığı kabul edilirse frekans biriminde Hamiltonien, Denklem 3.1 ve Denklem 4.25,

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{W}} = & \omega_z S_z + \omega_D \left[S_z^2 - \frac{1}{3} S(S+1) \right] + \omega_E (S_x^2 - S_y^2) \\ & + \omega_{a_1} S_z I_{1z} + \omega_{a_1} (S_x I_{1x} + S_y I_{1y}) \end{aligned} \quad (4.33)$$

olarak yazılır. Hamiltoniende çok küçük olması nedeniyle çekirdek Zeeman terimi gözardı edilmiştir. Üstel işlemci, her bir Hamiltonien terimi için Baker-Campbell-Hausdorff (BCH), formülü ile seriye açılırsa, Denklem 3.10 – 3.12,

$$\begin{aligned} e^{-i\hat{\Omega}t}\hat{A}e^{i\hat{\Omega}t} = & \hat{A} - \frac{t^2}{2!}K_2 + \frac{t^4}{4!}K_4 - \frac{t^6}{6!}K_6 + \frac{t^8}{8!}K_8 - \dots \\ & - i \left\{ \frac{t}{1!}K_1 - \frac{t^3}{3!}K_3 + \frac{t^5}{5!}K_5 - \frac{t^7}{7!}K_7 + \frac{t^9}{9!}K_9 - \dots \right\} \\ e^{-i\hat{\Omega}t}\hat{A}e^{i\hat{\Omega}t} = & \hat{A} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n t^{2n}}{(2n)!} K_{2n} + i \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n t^{2n-1}}{(2n-1)!} K_{2n-1} \end{aligned} \quad (4.34)$$

iç içe komütatörler cinsinden yazılabilir. Hesaplamada komütatörlerin,

$$[A + B + C + \dots, Z] = [A, Z] + [B, Z] + [C, Z] \dots$$

ile,

$$[AB, Z] = A[B, Z] + [A, Z]B$$

tanımları ve iç içe komütatörlerin,

$$K_1 = [\hat{\Omega}, \hat{A}], \quad K_2 = [\hat{\Omega}, K_1], \quad K_3 = [\hat{\Omega}, K_2], \dots \quad K_i = [\hat{\Omega}, K_{i-1}],$$

bağıntıları dikkate alınmalıdır.

Çarpım işlemci teorisinin uygulamasına bir taban oluşturmak üzere önce Hamiltonienin beklenen değerlerinden oluşan matrisin oluşturulması yararlı olacaktır. Çizelge 4.2 bu matrisi vermektedir. Matrisin oluşturulmasında spin öz durumları azalan sırada dizilmiştir. Bütün işlem boyunca bu sıralamayı korumak gereklidir. Aksi halde işlemler yanlış sonuç verecektir.

Bu gösterimin yanında Hamiltoniende bulunan spin işlemcilerinin matris temsilleri kullanılacak olursa, $S = 1$ ve $I_1 = 1, I_2 = 0$ sistemi için 9×9 boyutlu spin matrisleri kullanılmak zorundadır. Aksi halde S ve I spinlerinin alabilecekleri durumları eksik veya fazla alınmış olabilir ki kuantum mekaniğin bu husustaki temel postulatına aykırı bir durum oluşur.

Hamiltonien terimlerindeki spin durumları sırasıyla şunlardır: $\hat{S}_z, \hat{S}_z^2 - \hat{S}(\hat{S} + 1), (\hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2), \hat{S}_z \hat{I}_z, (\hat{S}_x \hat{I}_{1x} + \hat{S}_y \hat{I}_{1y})$. $S = 1$ ve $I = 1$ için spin matris temsilleri 3×3 boyutlu olduğundan bunların 9×9 boyutlu yapılmaları gereklidir. Bu işlemler Materyal ve Metot Bölümünde verilmiştir. Denklem 4.33 terimlerdeki sonuç işlemcilerin temsillerini vermektedir.

Denklem 4.33'de spin işlemciler yerine konulursa oluşacak sonuç matris Çizelge 4.2'de verilen matris ile aynı olacaktır. Bu çözümlemede bütün etkileşmeler alınmıştır ve enerji özdeğerleri ikinci mertebe etkileşmelerden kaynaklanan köşegen dışı elemanlar nedeniyle öz durumlar saf değil karışık olacaktır. Fakat, eğer ikinci mertebe etkileşmeler olan $\omega_E(S_x^2 - S_y^2)$ ve $\omega_{a_1}(S_x I_{1x} + S_y I_{1y})$ terimlerinde ω_E ve ω_{a_1} katsayıları elektron zeeman etkileşmesinden çok küçükse bu iki terim göz ardı edilebilir, sonuçta sadece Denklem 4.33'deki spin matrislerinin ve dolayısıyla Çizelge 4.2'de verilen matrisin köşegen elemanları kalır. Bu durumda enerji özdeğerleri ve öz durumları sadece köşegen elemanlar olacaktır. EPR geçişleri için seçim kuralları $\Delta M_s = \pm 1$ ve $\Delta M_l = 0$ şartına göre dipolar etkileşmeden dolayı iki ayrı üçlü grup halinde 6 tane eşit şiddette izinli geçiş gözlenecektir, Çizelge 4.4. Bu geçişin oluşturacağı EPR spektrum örneği Materyal ve Metot Bölümünde Uygulama 3'de verilmiştir.

Uygulamalarda dipolar yarıma değeri aşırı ince yapı yarıma değeriinden büyük alınmıştır ($D > a$); buna göre spektrum dipolar etkileşmeden dolayı önce ikiye, sonra her bir dipolar yarıma aşırı ince yapı etkileşmesinden dolayı üçe yarılmaktadır. Bu yarıma, EPR parametreleri dışında gerçek bir spektrumda gözlenecek olan spektrumla aynıdır.

Çizelge 4.2. Radikal çifti (biradikal) ($S = 1$) ile tek bir $I = 1$ spinli çekirdeğin etkileşme Hamiltonieni ve klasik matris temsili. Özdurumların gösteriminde sadelik için $|S, M_S; I, M_I\rangle$ yerine değişmeyen S ve I yazılmadan sadece M_S ve M_I alınmıştır. Genel bilgiler bölümünde verilen biradikal ve aşırı ince yapı etkileşme Hamiltonieninde tek bir çekirdek alınmıştır. Ayrıca ek olarak ikinci merteye aşırı ince yapı etkileşme terimi de, $\omega_{a_1}(S_x I_{1x} + S_y I_{1y})$, burada dikkate alınmıştır (çekirdek zeeman terimi küçük olduğu için gözardı edilmiştir)

$\langle M_S M_I $ $\backslash M_S M_I \rangle$	$ 1, 1\rangle$	$ 1, 0\rangle$	$ 1, -1\rangle$	$ 0, 1\rangle$	$ 0, 0\rangle$	$ 0, -1\rangle$	$ -1, 1\rangle$	$ -1, 0\rangle$	$ -1, -1\rangle$
$\langle 1, 1 $	$\omega_z + \frac{\omega_D}{3} + \omega_{a_1}$	0	0	0	0	0	ω_E	0	0
$\langle 1, 0 $	0	$\omega_z + \frac{\omega_D}{3}$	0	ω_{a_1}	0	0	0	ω_E	0
$\langle 1, -1 $	0	0	$\omega_z + \frac{\omega_D}{3} - \omega_{a_1}$	0	ω_{a_1}	0	0	0	ω_E
$\langle 0, 1 $	0	ω_{a_1}	0	$-\frac{2\omega_D}{3}$	0	0	0	0	0
$\langle 0, 0 $	0	0	ω_{a_1}	0	$-\frac{2\omega_D}{3}$	0	ω_{a_1}	0	0
$\langle 0, -1 $	0	0	0	0	0	$-\frac{2\omega_D}{3}$	0	ω_{a_1}	0
$\langle -1, 1 $	ω_E	0	0	0	ω_{a_1}	0	$-\omega_z + \frac{\omega_D}{3} - \omega_{a_1}$	0	0
$\langle -1, 0 $	0	ω_E	0	0	0	ω_{a_1}	0	$-\omega_z + \frac{\omega_D}{3}$	0
$\langle -1, -1 $	0	0	ω_E	0	0	0	0	0	$-\omega_z + \frac{\omega_D}{3} + \omega_{a_1}$

Çizelge 4.3. Denklem 4.33’de verilen Hamiltoniendeki işlemcilerin matris temsilleri

$$\hat{S}_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$\hat{S}_z^2 - \hat{S}(\hat{S} + 1) = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$(\hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\hat{S}_z \hat{I}_{1z} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$(\hat{S}_x \hat{I}_{1x} + \hat{S}_y \hat{I}_{1y}) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Çizelge 4.4. Çizelge 4.2 ve Denklem 4.33’de verilen Hamiltonien temsillerinde izinli geçişler (seçim kuralları $\Delta M_s = \pm 1$ ve $\Delta M_l = 0$). Geçiş enerjileri frekans cinsinden ($\omega = g\beta B_z/\hbar$) alınmıştır. Bu geçiş enerjileri geleneksel EPR spektroskopisine uygun olarak manyetik alan biriminde veya frekans biriminde de ifade edilebilir

Sayı	Seçim kurallarına uyan geçişler	Geçiş frekansları
1	$ 1, 1\rangle \leftrightarrow 0, 1\rangle$	$\mathcal{E}_1 = \omega + \omega_D + \omega_{a_1}$
2	$ 1, 0\rangle \leftrightarrow 0, 0\rangle$	$\mathcal{E}_1 = \omega + \omega_D$
3	$ 1, -1\rangle \leftrightarrow 0, -1\rangle$	$\mathcal{E}_1 = \omega + \omega_D - \omega_{a_1}$
4	$ 0, 1\rangle \leftrightarrow -1, 1\rangle$	$\mathcal{E}_1 = \omega - \omega_D + \omega_{a_1}$
5	$ 0, 0\rangle \leftrightarrow -1, 0\rangle$	$\mathcal{E}_1 = \omega - \omega_D$
6	$ 0, -1\rangle \leftrightarrow -1, -1\rangle$	$\mathcal{E}_1 = \omega - \omega_D - \omega_{a_1}$

4.6 Çarpım İşlemci Teorisinde Puls Hamiltonieni

4.6.1 Elektron zeeman terimi üzerine x ve y pulslarının etkisi

Yoğunluk matrisi teorisinde ele alındığı gibi, kartezyen koordinat sisteminde z doğrultusunda kutuplanmış spin sistemine x eksenine doğrultusunda B_1 şiddetinde ve t_p süresi kadar bir manyetik alan pulsu uygulanırsa bunun üstel işlemci ifadesi $\hat{\mathcal{H}}_p = e^{i\hat{\mathcal{W}}t_p} = e^{i(g\beta B_1/\hbar)t_p\hat{S}_x}$ olacaktır. Ayrıca $\omega_p = g\beta B_1/\hbar$ frekans biriminde alındığında $\omega_p t_p = \theta_p$ puls açısı olacak, sonuçta üstel işlemci $e^{i\theta_p\hat{S}_x}$ olarak yazılacaktır. Pulsu NMR ve EPR spektroskopilerinde seçici pulslar çoğunlukla $\theta = 90^\circ$ ($\pi/4$ rad) veya $\theta = 180^\circ$ ($\pi/2$ rad) olarak alınır. Ancak bu bir genelleme değildir, herhangi uygun bir açı da sisteme uygulanabilir. Bu sistem için sürekli dalga spektroskopisine göre çözümü yapılmıştır. Bu kesimde yapılan çözüm puls tepkisinin belirlenmesi içindir.

Spin sistemi z eksenine doğrultusunda kutuplandırıldığından Denklem 4.34'de işlemci $\hat{A} = \hat{S}_z$ olacaktır.

Denklem 4.34 ile verilen BCH formülünün değiştirilmiş biçimi, yani çarpım işlemcisinin seri açılımı spin bileşenleri arasındaki,

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hat{S}_z, \quad [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hat{S}_x, \quad [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hat{S}_y \quad (4.35)$$

tanımlarının ve iç içe komütatörlerin değerlendirilmesinin sonuçları olan,

$$\begin{aligned} K_1 = [\hat{S}_x, \hat{S}_z] &= -i\hat{S}_y, \quad K_2 = [\hat{S}_x, -i\hat{S}_y] = \hat{S}_z, \\ K_3 = [\hat{S}_x, \hat{S}_z] &= -i\hat{S}_y, \quad K_4 = \hat{S}_z, \quad K_5 = -i\hat{S}_y \dots \end{aligned} \quad (4.36)$$

ifadelerin yerine konulmasıyla,

$$e^{-i\theta\hat{S}_x}\hat{S}_ze^{i\theta\hat{S}_x} = \hat{S}_z \left\{ 1 - \frac{\theta^2}{2!} + \frac{\theta^4}{4!} - \dots \right\} - \hat{S}_y \left\{ \frac{\theta}{1!} - \frac{\theta^3}{3!} + \frac{\theta^5}{5!} - \dots \right\} \quad (4.37)$$

sonucu bulunur ki parantez içindeki seriler sırasıyla kosinüs ve sinüs fonksiyonlarının açılımıdır. Sonuçta ifade kısaca,

$$e^{-i\theta\hat{S}_x}\hat{S}_ze^{i\theta\hat{S}_x} = \hat{S}_z \cos \theta - \hat{S}_y \sin \theta \quad (4.38)$$

Aynı işlemler y pulsu için tekrarlandığında,

$$\begin{aligned} e^{-i\theta\hat{S}_y}\hat{S}_ze^{i\theta\hat{S}_y} &= \hat{S}_z \left\{ 1 - \frac{\theta^2}{2!} + \frac{\theta^4}{4!} - \dots \right\} + \hat{S}_x \left\{ \frac{\theta}{1!} - \frac{\theta^3}{3!} + \frac{\theta^5}{5!} - \dots \right\} \\ &= \hat{S}_z \cos \theta + \hat{S}_x \sin \theta \end{aligned} \quad (4.39)$$

sonucu bulunacaktır ki bu sonuçlar hem elektromanyetik teoride ve hem de uygulamalarda beklenen sonuçlardır.

4.6.2 Eksensel aşırı ince yapı etkileşmesi üzerine x ve y pulslarının etkisi

Denklem 4.33'de verilen Hamiltoniende eksensel (birinci mertebe) aşırı ince yapı etkileşmesi üzerine bir x pulsu uygulanarak BCH seri açılımındaki iç içe komütatörler hesaplanmıştır. Buna göre x pulsu için çarpım işlemci ifadesi,

$$e^{-i\theta\hat{S}_x}\hat{S}_z\hat{I}_ze^{i\theta\hat{S}_x} = \hat{S}_z\hat{I}_z \left\{ 1 - \frac{\theta^2}{2!} + \frac{\theta^4}{4!} - \frac{\theta^6}{6!} + \dots \right\} - i(-\hat{S}_y\hat{I}_z) \left\{ \frac{\theta}{1!} - \frac{\theta^3}{3!} + \frac{\theta^5}{5!} - \frac{\theta^7}{7!} \dots \right\} \quad (4.40)$$

ifadesi bulunacaktır. Parantez içleri sırasıyla kosinüs ve sinüs fonksiyonlarının seri açılımıdır; böylece eksensel aşırı ince yapı yarılması üzerine x pulsunun etkisi,

$$e^{-i\theta\hat{S}_x}\hat{S}_z\hat{I}_ze^{i\theta\hat{S}_x} = \hat{S}_z\hat{I}_z \cos \theta + i\hat{S}_y\hat{I}_z \sin \theta \quad (4.41)$$

olarak bulunacaktır. İfadede $\hat{S}_z\hat{I}_z$ ve $-\hat{S}_y\hat{I}_z$ matrisleri Denklem 4.42 ve 4.43'de verilmiştir.

$$\hat{S}_z\hat{I}_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.42)$$

$$-\hat{S}_y\hat{I}_z = \frac{1}{i\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.43)$$

$$\hat{S}_x \hat{I}_z = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.44)$$

Aynı etkileşme üzerine y pulsunun etkisi benzer biçimde bulunacaktır. $\hat{S}_x \hat{I}_z$ matrisi Denklem 4.44'de verilmiştir.

$$e^{-i\theta \hat{S}_y} \hat{S}_z \hat{I}_z e^{i\theta \hat{S}_y} = \hat{S}_z \hat{I}_z \cos \theta - \hat{S}_x \hat{I}_z \sin \theta \quad (4.45)$$

4.6.3 Ekvatorial aşırı ince yapı etkileşmesi üzerine x ve y pulslarının etkisi

Ekvatorial aşırı ince yapı etkileşmesi, ikinci mertebeden katkı getiren, ancak yarımla sabiti dış manyetik alan ile kıyaslanabilir ölçekte olduğunda etkisi gözlenebilen bir etkileşmedir. Etkileşme terimi $\hat{S}_x \hat{I}_{1x} + \hat{S}_y \hat{I}_{1y}$ ifadesiyle verilen etkileşmenin bir x pulsuna karşı tepkisini bulmak için BCH açılımı alınmıştır. İç içe komütatörler hesaplanarak düzenleme yapıldığında,

$$\begin{aligned} e^{-i\theta \hat{S}_x} (\hat{S}_x \hat{I}_{1x} + \hat{S}_y \hat{I}_{1y}) e^{i\theta \hat{S}_x} \\ = \hat{S}_x \hat{I}_{1x} + (\hat{S}_x \hat{I}_{1x} + \hat{S}_y \hat{I}_{1y}) \left\{ -\frac{\theta^2}{2!} + \frac{\theta^4}{4!} - \frac{\theta^6}{6!} + \dots \right\} \\ - i(-\hat{S}_z \hat{I}_{1y}) \left\{ \frac{\theta}{1!} - \frac{\theta^3}{3!} + \frac{\theta^5}{5!} - \frac{\theta^7}{7!} + \dots \right\} \end{aligned} \quad (4.46)$$

sonucu bulunacaktır. Birinci parantez içine teriminde parantez içindeki ifadeye 1 eklenip 1 çıkarılırsa ifade yeniden sinüsel fonksiyonlarla yazılır;

$$\begin{aligned} e^{-i\theta \hat{S}_x} (\hat{S}_x \hat{I}_{1x} + \hat{S}_y \hat{I}_{1y}) e^{i\theta \hat{S}_x} \\ = \hat{S}_x \hat{I}_{1x} + (\hat{S}_x \hat{I}_{1x} + \hat{S}_y \hat{I}_{1y}) \cos \theta + i \hat{S}_z \hat{I}_{1y} \sin \theta \end{aligned} \quad (4.47)$$

İfadede katsayı matrisleri $(\hat{S}_x \hat{I}_{1x} + \hat{S}_y \hat{I}_{1y})$, $\hat{S}_x \hat{I}_{1x}$ ve $-\hat{S}_z \hat{I}_{1y}$ Denklem 4.48, 4.49 ve 4.50'de tanımlanmıştır.

$$(\hat{S}_x \hat{I}_{1x} + \hat{S}_y \hat{I}_{1y}) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.48)$$

$$\hat{S}_x \hat{I}_{1x} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.49)$$

$$-\hat{S}_z \hat{I}_{1y} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.50)$$

$$-\hat{S}_z \hat{I}_{1x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.51)$$

Ekvatorial aşırı ince yapı etkileşmesi (ikinci merteye etkileşme) üzerine y pulsı uygulandığında ise, katsayılar matrisleri dışında x pulsuna oldukça benzeyen bir sonuç elde edilecektir. $-\hat{S}_z \hat{I}_{1x}$ ' in katsayılar matrisi de Denklem 4.51'de verilmiştir.

$$\begin{aligned} & e^{-i\theta \hat{S}_y} (\hat{S}_x \hat{I}_{1x} + \hat{S}_y \hat{I}_{1y}) e^{i\theta \hat{S}_y} \\ & = \hat{S}_x \hat{I}_{1x} + \hat{S}_y \hat{I}_{1y} + \hat{S}_x \hat{I}_{1x} \cos \theta - \hat{S}_z \hat{I}_{1x} \sin \theta \end{aligned} \quad (4.52)$$

4.6.4 EPR Hamiltonien terimlerinin çarpım işlemci temsilleri

Bu kesimde tek tek ele alınan Denklem 4.33 Hamiltonieninin terimleri üzerine $S = 1$ ve $I_1 = 1$ ve $I_2 = 0$ spin sistemi için x ve y pulsları uygulandığında elde edilen çarpım işlemci temsillerini topluca bir çizelgede vermek yararlı olacaktır, Çizelge 4.5.

Çizelge 4.5. Dipolar etkileşme Hamiltonieninin terimlerinin $S = 1$ ve $I_1 = 1$ spin sistemi için x ve y puls tepkisi. Katsayılar matrisleri ilgili kesim içinde verilmiştir

Terim ismi	Terim	X pulsu tepkisi	Y pulsu tepkisi
Elektron Zeeman	$\omega_z S_z$	$\hat{S}_z \cos \theta - \hat{S}_y \sin \theta$	$\hat{S}_z \cos \theta + \hat{S}_x \sin \theta$
Eksensel aşırı ince yapı	$\omega_{a_1} S_z I_z$	$\hat{S}_z \hat{I}_z \cos \theta + i \hat{S}_y \hat{I}_z \sin \theta$	$\hat{S}_z \hat{I}_z \cos \theta - \hat{S}_x \hat{I}_z \sin \theta$
Ekvatorial aşırı ince yapı	$\omega_{a_1} (S_x I_{1x} + S_y I_{1y})$	$\hat{S}_x \hat{I}_{1x} + (\hat{S}_x \hat{I}_{1x} + \hat{S}_y \hat{I}_{1y}) \cos \theta + i \hat{S}_z \hat{I}_{1y} \sin \theta$	$\hat{S}_x \hat{I}_{1x} + \hat{S}_y \hat{I}_{1y} + \hat{S}_x \hat{I}_{1x} \cos \theta - \hat{S}_z \hat{I}_{1x} \sin \theta$

4.7 Hamiltonien Etkisi Altında Spin İşlemcilerinin Gelişimi

Bir spin sistemine x veya y pulsü uygulandıktan sonra spin sistemi, Hamiltonienin etkisi altında zamanla değişim gösterir. Bu durum zamana bağlı üstel işlemci ile temsil edilir; bu sürece gelişim denilmektedir. Denklem 4.33'de verilen frekans biriminde Hamiltonien $\widehat{\mathcal{W}}$ ile zamana bağlı üstel işlemcinin, $e^{-i\widehat{\mathcal{W}}t}$ biçiminde olduğu Genel Bilgiler Bölümünde ele alınmıştır. Burada $\widehat{\mathcal{W}}$ sembolü ile tanımlanan frekans birimindeki Hamiltonienin zamanla gelişim işlemleri irdelenecektir.

$S = 1$, $I_1 = 1$ ve $I_2 = 0$ spin sisteminde dokuz spin işlemcisi oluşmaktadır. Bu işlemciler,

$$\hat{A} = \hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z, \hat{S}_x^2, \hat{S}_y^2, \hat{S}_z^2, [\hat{S}_x, \hat{S}_y]_+, [\hat{S}_y, \hat{S}_z]_+, [\hat{S}_z, \hat{S}_x]_+ \quad (4.53)$$

biçiminde tanımlanırlar. Çarpım işlemci ifadesinin BCH seri açılımının yardımı ile dokuz spin işlemcisinin Hamiltonien terimleri altındaki zamanla gelişimleri bu kesimde incelenecektir. (İşlemciler içinde '+' alt indisli gösterilen komütasyon ifadeleri *antikomütatör* olarak bilinen, örneğin $[\hat{S}_x, \hat{S}_y]_+ = \hat{S}_x\hat{S}_y + \hat{S}_y\hat{S}_x$ gibi işlemcilerdir).

Verilen dokuz işlemcinin Hamiltonien altında zamanla gelişimlerini elde etmek için izlenecek yöntem bir önceki kesimde ayrıntılarıyla işlenmiştir. Genel bir yaklaşım olarak \hat{A} bir işlemci olmak üzere BCH formülünün ortaya çıkardığı sonsuz seri ve serinin her bir terimindeki iç içe komütatörlerin değerlendirilmesiyle Hamiltonien terimlerinin dokuz işlemciye olan tepkilerini temsil eden fonksiyonlar bulunur. Denklem 4.34'de verilen değiştirilmiş BCH seri açılımının genel ifadesi,

$$e^{-i\widehat{\Omega}t} \hat{A} e^{i\widehat{\Omega}t} = \hat{A} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n t^{2n}}{(2n)!} K_{2n} + i \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n t^{2n-1}}{(2n-1)!} K_{2n-1} \quad (4.54)$$

olarak verilmişti. $\widehat{\Omega}$ işlemcisi Denklem 4.33 Hamiltonienindeki her bir terimin işlemcisidir. Hesaplama komütatörlerin,

$$[\hat{A} + \hat{B} + \hat{C} + \dots + \hat{Y}, \hat{Z}] = [\hat{A}, \hat{Z}] + [\hat{B}, \hat{Z}] + [\hat{C}, \hat{Z}] + \dots + [\hat{Y}, \hat{Z}]$$

ile,

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} \text{ tanımları ve iç içe komütatörlerin,}$$

$$K_1 = [\widehat{\Omega}, \hat{A}], K_2 = [\widehat{\Omega}, K_1], K_3 = [\widehat{\Omega}, K_2], \dots K_i = [\widehat{\Omega}, K_{i-1}]$$

bağıntıları dikkate alınmalıdır.

Her bir Hamiltonien terimi ve işlemci için komütatörlerin değerlendirilmesi, puls etkisi altında Hamiltonien terimlerinin tepkisinin belirlenmesinde yapıldığı gibi serinin tek ve çift kuvvetli terimlerinde iki farklı katsayı matrisinin oluştuğunu göstermektedir. Dolayısıyla tek ve çift kuvvetli terimler bu iki farklı katsayılar matrisinin parantezine alınabilir. Bu iki seri ya doğrudan kosinüs ve sinüs fonksiyonlarını ya da yine başka trigonometrik fonksiyonların seri açılımları olacaktır.

Aynı işlemlerin ayrıntılarını tekrarlamamak için burada sadece her bir Hamiltonien teriminin dokuz işlemci etkisinde zamana göre gelişimi ve sonuçları bir örnek üzerinde verilecektir. Diğer terimler için benzer işlemler yapılmıştır.

4.7.1 Elektron zeeman etkileşmesi altında spin işlemcilerinin gelişimi

I- \hat{S}_x işlemcisi

Elektron zeeman etkileşmesi frekans birimindeki Hamiltoniende $\hat{\Omega} = \omega_z S_z$ ile verilmiştir.

İşlemci $\hat{A} = \hat{S}_x$ için seri toplamı;

$$e^{-i\omega_z t \hat{S}_z} \hat{S}_x e^{i\omega_z t \hat{S}_z} = \hat{S}_x \left\{ 1 - \frac{(\omega_z t)^2}{2!} + \frac{(\omega_z t)^4}{4!} - \dots \right\} + \hat{S}_y \left\{ \frac{\omega_z t}{1!} - \frac{(\omega_z t)^3}{3!} + \frac{(\omega_z t)^5}{5!} - \dots \right\} \quad (4.55)$$

Soldaki parantez içi kosinüs ve sağdaki parantez içi de sinüs fonksiyonlarıdır, (\hat{S}_y işlemcisinin sanal olduğu hatırlanmalıdır).

$$e^{-i\omega_z t \hat{S}_z} \hat{S}_x e^{i\omega_z t \hat{S}_z} = \hat{S}_x \cos(\omega_z t) + \hat{S}_y \sin(\omega_z t) \quad (4.56)$$

II- \hat{S}_y işlemcisi

Aynı işlemler $\hat{A} = \hat{S}_y$ için yapıldığında;

$$e^{-i\omega_z t \hat{S}_z} \hat{S}_y e^{i\omega_z t \hat{S}_z} = \hat{S}_y \left\{ 1 - \frac{(\omega_z t)^2}{2!} + \frac{(\omega_z t)^4}{4!} - \dots \right\} - \hat{S}_x \left\{ \frac{\omega_z t}{1!} - \frac{(\omega_z t)^3}{3!} + \frac{(\omega_z t)^5}{5!} - \dots \right\} \quad (4.57)$$

olur ve seri toplamları yerine konulduğunda,

$$e^{-i\omega_z t \hat{S}_z} \hat{S}_y e^{i\omega_z t \hat{S}_z} = \hat{S}_y \cos(\omega_z t) - \hat{S}_x \sin(\omega_z t) \quad (4.58)$$

sonucu bulunur.

III- \widehat{S}_z işlemcisi

\widehat{S}_z işlemcisi için komütatörler sıfır olacağından sadece sabit \widehat{S}_z sonucu bulunacaktır.

IV- \widehat{S}_x^2 işlemcisi

\widehat{S}_x^2 işlemcisi için serinin önceki işlemlerde yapıdığı gibi değerlendirilmesi ile,

$$e^{-i\omega_z t \widehat{S}_z} \widehat{S}_x^2 e^{i\omega_z t \widehat{S}_z} = \widehat{S}_x^2 + (\widehat{S}_x^2 - \widehat{S}_y^2) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n 2^{2n-1} (\omega_z t)^{2n}}{(2n)!} \\ - i\widehat{S}_{xy} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n-1} 2^{2(n-1)} (\omega_z t)^{2n-1}}{(2n-1)!} \quad (4.59)$$

ifadeleri elde edilir. Toplam işlemleri değerlendirildikten sonra ifade düzenlenirse,

$$e^{-i\omega_z t \widehat{S}_z} \widehat{S}_x^2 e^{i\omega_z t \widehat{S}_z} = \widehat{S}_x^2 - (\widehat{S}_x^2 - \widehat{S}_y^2) \sin^2(\omega_z t) \\ - i\widehat{S}_{xy} \cos(\omega_z t) \sin(\omega_z t) \quad (4.60)$$

sonucu bulunacaktır.

V- \widehat{S}_y^2 işlemcisi

Benzer işlemlerle \widehat{S}_y^2 işlemcisinin gelişimi de bulunacaktır:

$$e^{-i\omega_z t \widehat{S}_z} \widehat{S}_y^2 e^{i\omega_z t \widehat{S}_z} \\ = \widehat{S}_y^2 + (\widehat{S}_x^2 - \widehat{S}_y^2) \sin^2(\omega_z t) - i\widehat{S}_{xy} \cos(\omega_z t) \sin(\omega_z t) \quad (4.61)$$

VI- \widehat{S}_z^2 işlemcisi

\widehat{S}_z^2 işlemcisi için elektron zeeman ile komütatörler sıfır olacağından sonuç sabit \widehat{S}_z^2 değeri olacaktır.

Sonuç ifadelerdeki katsayılar matrisleri, $S = 1$ ve $I = 1$ spin sistemi için Çizelge 4.10'da verilmiştir.

VII- \widehat{S}_{xy} işlemcisi

Elektron zeeman terimi için $[\widehat{S}_x, \widehat{S}_y]_+ = \widehat{S}_x \widehat{S}_y + \widehat{S}_y \widehat{S}_x = \widehat{S}_{xy}$ antikomütatör işlemcisinin etkisi altındaki zamana göre gelişim katsayılar matrisleri dışında yukarıda yapılan işlemlerle oldukça benzerdir.

$$\begin{aligned}
e^{-i\omega_z t \hat{S}_z} \hat{S}_{xy} e^{i\omega_z t \hat{S}_z} &= 2(\hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n 2^{2(n-1)} (\omega_z t)^{2n-1}}{(2n-1)!} \\
&- i\hat{S}_{xy} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n 2^{2n} (\omega_z t)^{2n}}{(2n)!} \\
&= -2(\hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2) \cos(\omega_z t) \sin(\omega_z t) - i\hat{S}_{xy} \{1 + \cos(\omega_z t)\}
\end{aligned} \tag{4.62}$$

VIII- \hat{S}_{yz} işlemcisi

$[\hat{S}_y, \hat{S}_z] = \hat{S}_y \hat{S}_z + \hat{S}_z \hat{S}_y = \hat{S}_{yz}$ antikomütatör işlemcilerinin elektron Zeeman etkisi altında gelişme ifadesi aşağıda verilmiştir.

$$\begin{aligned}
e^{-i\omega_z t \hat{S}_z} \hat{S}_{yz} e^{i\omega_z t \hat{S}_z} &= -\hat{S}_{zx} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n (\omega_z t)^{2n+1}}{(2n+1)!} \\
&+ i\hat{S}_{yz} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n (\omega_z t)^{2n}}{(2n)!} \\
&= -\hat{S}_{zx} \sin(\omega_z t) + i\hat{S}_{yz} \cos(\omega_z t)
\end{aligned} \tag{4.63}$$

IX- \hat{S}_{zx} işlemcisi

Benzer işlemlerle $[\hat{S}_z, \hat{S}_x] = \hat{S}_z \hat{S}_x + \hat{S}_x \hat{S}_z = \hat{S}_{zx}$ antikomütatör işlemcisinin elektron zeeman etkisi altındaki zamana göre gelişimi bulunmuştur.

$$\begin{aligned}
e^{-i\omega_z t \hat{S}_z} \hat{S}_{zx} e^{i\omega_z t \hat{S}_z} &= -\hat{S}_{zx} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n (\omega_z t)^{2n+1}}{(2n+1)!} \\
&+ i\hat{S}_{yz} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n (\omega_z t)^{2n}}{(2n)!} \\
&= \hat{S}_{zx} \cos(\omega_z t) - i\hat{S}_{yz} \sin(\omega_z t)
\end{aligned} \tag{4.64}$$

İfadelerde katsayılar matrisleri \hat{S}_{yz} ve \hat{S}_{zx} elektron zeeman teriminin etkisi altında dokuz işlemcinin zamana göre gelişim ifadeleri toplu halde Çizelge 4.6'da verilmiştir.

4.7.2 Eksensel dipolar etkileşmesi altında spin işlemcilerinin gelişimi

Eksensel dipolar etkileşme teriminde, $\omega_D \left[S_z^2 - \frac{1}{3}S(S+1) \right]$, işlemci Denklem 4.65'de (K_0) tanımlanmıştır. Bu terimin etkisi altında dokuz spin işlemcisinin gelişimi gerekli işlemler yapılarak sonuçlar Çizelge 4.7'de verilmiştir.

$$K_0 = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.65)$$

4.7.3 Ekvatorial dipolar etkileşmesi altında spin işlemcilerinin gelişimi

Ekvatorial dipolar spin işlemcileri ikinci etkileşmelerde ikinci mertebeden katkı getiren işlemcilerdir. Bu terimde, $E(S_x^2 - S_y^2)$, işlemci (K'_0) Denklem 4.66'da verilmiştir. Dokuz spin işlemcisinin ekvatorial dipolar etkisi altındaki zamanla gelişimi ile elde edilen sonuçlar Çizelge 4.8'de verilmiştir.

$$K'_0 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.66)$$

4.7.4 Eksensel aşırı ince yapı etkileşmesi altında spin işlemcilerinin gelişimi

Aşırı ince yapı etkileşmesi EPR spektroskopisinde baskın ve belirleyici özelliği olan birinci mertebeden bir etkileşmedir. Etkileşme ifadesi frekans biriminde $\omega_a \hat{S}_z \hat{I}_z$ ifadesiyle verilir. Diğer etkileşmelerde yapılan işlemlerin aynıları dokuz spin işlemcisinin aşırı ince yapı etkileşmesi için de yapılarak Çizelge 4.9'da, katsayılar matrisleri de Çizelge 4.10'da verilmiştir.

4.7.5 Ekvatorial aşırı ince yapı etkileşmesi altında spin işlemcilerinin gelişimi

Ekvatorial aşırı ince yapı etkileşmesi, ki ikinci mertebeden bir etkileşmedir, spin işlemcilerinin etkisi altındaki gelişimini gösteren BCH seri açılımında oluşan katsayılar matrisleri sıradışı bir davranış sergilemektedirler. Hem etkisinin gözardı edilebilir olması ve hem de seri açılımındaki sıradışı davranışı nedeniyle bu aşamada çarpım işlemi sadece seri toplamı olarak verilecektir. Katsayılar matrisleri $K_1, K_2, K_3, K_4, \dots, K_N$ iç içe komütatörlerin sonuç matrisleridir ve her bir işlemci için ve her bir terimde farklılıklar sergilemektedir. \hat{A} dokuz spin işlemcisinden birisi olmak üzere işlem,

$$\begin{aligned} & e^{-i\omega_{ET}(\hat{S}_x \hat{I}_{1x} + \hat{S}_y \hat{I}_{1y})} \hat{A} e^{i\omega_{ET}(\hat{S}_x \hat{I}_{1x} + \hat{S}_y \hat{I}_{1y})} \\ &= \hat{A} + i \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n (\omega_a t)^{2n-1}}{(2n-1)!} K_{2n-1} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n (\omega_a t)^{2n}}{(2n)!} K_{2n} \end{aligned} \quad (4.67)$$

olacaktır. Bu etkileşme dikkate alınmak istenirse seri toplamlarının sayısal yöntemlerle yapılması daha uygun görünmektedir.

Öte yandan, bu konu üzerinde ayrı bir çalışma yürütmek ve farklı davranışlar sergileyen katsayılar matrislerinin davranış sistematüğini ortaya çıkarmak bu alana odaklanan araştırmalarda ve hesaplamalarda kolaylık sağlaması bakımından önemli olabilir.

Çizelge 4.6. Elektron zeeman teriminin etkisi altında dokuz işlemcinin zamana göre gelişim ifadeleri. İfadelerde verilen katsayılar matrisleri ilgili kesimde verilmiştir

Sıra	İşlemci	Çarpım işlemcisi	Sonuç ifade
1	\hat{S}_x	$e^{-i\omega_z t \hat{S}_z} \hat{S}_x e^{i\omega_z t \hat{S}_z}$	$\hat{S}_x \cos(\omega_z t) + \hat{S}_y \sin(\omega_z t)$
2	\hat{S}_y	$e^{-i\omega_z t \hat{S}_z} \hat{S}_y e^{i\omega_z t \hat{S}_z}$	$\hat{S}_y \cos(\omega_z t) - \hat{S}_x \sin(\omega_z t)$
3	\hat{S}_z	$e^{-i\omega_z t \hat{S}_z} \hat{S}_z e^{i\omega_z t \hat{S}_z}$	\hat{S}_z (Sabit)
4	\hat{S}_x^2	$e^{-i\omega_z t \hat{S}_z} \hat{S}_x^2 e^{i\omega_z t \hat{S}_z}$	$\hat{S}_x^2 - (\hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2) \sin^2(\omega_z t) - i\hat{S}_{xy} \cos(\omega_z t) \sin(\omega_z t)$
5	\hat{S}_y^2	$e^{-i\omega_z t \hat{S}_z} \hat{S}_y^2 e^{i\omega_z t \hat{S}_z}$	$\hat{S}_y^2 + (\hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2) \sin^2(\omega_z t) - i\hat{S}_{xy} \cos(\omega_z t) \sin(\omega_z t)$
6	\hat{S}_z^2	$e^{-i\omega_z t \hat{S}_z} \hat{S}_z^2 e^{i\omega_z t \hat{S}_z}$	\hat{S}_z^2 (Sabit)
7	$\hat{S}_{xy} = [\hat{S}_x, \hat{S}_y]_+$	$e^{-i\omega_z t \hat{S}_z} \hat{S}_{xy} e^{i\omega_z t \hat{S}_z}$	$-2(\hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2) \cos(\omega_z t) \sin(\omega_z t) - i\hat{S}_{xy}\{1 + \cos(\omega_z t)\}$
8	$\hat{S}_{yz} = [\hat{S}_y, \hat{S}_z]_+$	$e^{-i\omega_z t \hat{S}_z} \hat{S}_{yz} e^{i\omega_z t \hat{S}_z}$	$-\hat{S}_{zx} \sin(\omega_z t) + i\hat{S}_{yz} \cos(\omega_z t)$
9	$\hat{S}_{zx} = [\hat{S}_z, \hat{S}_x]_+$	$e^{-i\omega_z t \hat{S}_z} \hat{S}_{zx} e^{i\omega_z t \hat{S}_z}$	$\hat{S}_{zx} \cos(\omega_z t) - i\hat{S}_{yz} \sin(\omega_z t)$

Çizelge 4.7. Eksensel dipolar terimin etkisi altında dokuz işlemcinin zamana göre gelişim ifadeleri (ifadelerde verilen katsayılar matrisleri Çizelge 4.10'da verilmiştir)

Sıra	İşlemci	Çarpım işlemcisi	Sonuç ifade
1	\hat{S}_x	$e^{-i\omega_D t K_0} \hat{S}_x e^{i\omega_D t K_0}$	$\hat{S}_x \cos(\omega_D t) + i\hat{S}_{yz} \sin(\omega_D t)$
2	\hat{S}_y	$e^{-i\omega_D t K_0} \hat{S}_y e^{i\omega_D t K_0}$	$\hat{S}_y \cos(\omega_D t) - \hat{S}_{zx} \sin(\omega_D t)$
3	\hat{S}_z	$e^{-i\omega_D t K_0} \hat{S}_z e^{i\omega_D t K_0}$	\hat{S}_z (Sabit)
4	\hat{S}_x^2	$e^{-i\omega_D t K_0} \hat{S}_x^2 e^{i\omega_D t K_0}$	\hat{S}_x^2 (Sabit)
5	\hat{S}_y^2	$e^{-i\omega_D t K_0} \hat{S}_y^2 e^{i\omega_D t K_0}$	\hat{S}_y^2 (Sabit)
6	\hat{S}_z^2	$e^{-i\omega_D t K_0} \hat{S}_z^2 e^{i\omega_D t K_0}$	\hat{S}_z^2 (Sabit)
7	$\hat{S}_{xy} = [\hat{S}_x, \hat{S}_y]_+$	$e^{-i\omega_D t K_0} \hat{S}_{xy} e^{i\omega_D t K_0}$	$[\hat{S}_x, \hat{S}_y]_+ = \hat{S}_x \hat{S}_y + \hat{S}_y \hat{S}_x$ (Sabit)
8	$\hat{S}_{yz} = [\hat{S}_y, \hat{S}_z]_+$	$e^{-i\omega_D t K_0} \hat{S}_{yz} e^{i\omega_D t K_0}$	$-\hat{S}_x \sin(\omega_D t) + i\hat{S}_{yz} \cos(\omega_D t)$
9	$\hat{S}_{zx} = [\hat{S}_z, \hat{S}_x]_+$	$e^{-i\omega_D t K_0} \hat{S}_{zx} e^{i\omega_D t K_0}$	$\hat{S}_{zx} \cos(\omega_D t) + \hat{S}_y \sin(\omega_D t)$

Çizelge 4.8. Ekvatorial dipolar terimin etkisi altında dokuz işlemcinin zamana göre gelişim ifadeleri (ifadelerde verilen katsayılar matrisleri Çizelge 4.10'da verilmiştir)

Sıra	İşlemci	Çarpım işlemcisi	Sonuç ifade
1	\hat{S}_x	$e^{-i\omega_E t K'_0} \hat{S}_x e^{i\omega_E t K'_0}$	$\hat{S}_x \cos(\omega_E t) + i\hat{S}_{yz} \sin(\omega_E t)$
2	\hat{S}_y	$e^{-i\omega_E t K'_0} \hat{S}_y e^{i\omega_E t K'_0}$	$\hat{S}_y \cos(\omega_E t) + \hat{S}_{zx} \sin(\omega_E t)$
3	\hat{S}_z	$e^{-i\omega_E t K'_0} \hat{S}_z e^{i\omega_E t K'_0}$	$\hat{S}_z \{\cos^2(\omega_E t) - \sin^2(\omega_E t)\} + 2i\hat{S}_{xy} \cos(\omega_E t) \sin(\omega_E t)$
4	\hat{S}_x^2	$e^{-i\omega_E t K'_0} \hat{S}_x^2 e^{i\omega_E t K'_0}$	\hat{S}_x^2 (Sabit)
5	\hat{S}_y^2	$e^{-i\omega_E t K'_0} \hat{S}_y^2 e^{i\omega_E t K'_0}$	\hat{S}_y^2 (Sabit)
6	\hat{S}_z^2	$e^{-i\omega_E t K'_0} \hat{S}_z^2 e^{i\omega_E t K'_0}$	\hat{S}_z^2 (Sabit)
7	$\hat{S}_{xy} = [\hat{S}_x, \hat{S}_y]_+$	$e^{-i\omega_E t K'_0} \hat{S}_{xy} e^{i\omega_E t K'_0}$	$2\hat{S}_z \cos(\omega_E t) \sin(\omega_E t) - i\hat{S}_{xy} \{\cos^2(\omega_E t) - \sin^2(\omega_E t)\}$
8	$\hat{S}_{yz} = [\hat{S}_y, \hat{S}_z]_+$	$e^{-i\omega_E t K'_0} \hat{S}_{yz} e^{i\omega_E t K'_0}$	$\hat{S}_x \sin(\omega_E t) + i\hat{S}_{yz} \cos(\omega_E t)$
9	$\hat{S}_{zx} = [\hat{S}_z, \hat{S}_x]_+$	$e^{-i\omega_E t K'_0} \hat{S}_{zx} e^{i\omega_E t K'_0}$	$\hat{S}_{zx} \cos(\omega_E t) - \hat{S}_y \sin(\omega_E t)$

Çizelge 4.9. Eksensel aşırı ince yapı etkisi altında dokuz işlemcinin zamana göre gelişim ifadeleri (ifadelerde verilen katsayılar matrisleri Çizelge 4.10'da verilmiştir)

Sıra	İşlemci	Çarpım işlemcisi	Sonuç ifade
1	\hat{S}_x	$e^{-i\omega at \hat{S}_z \hat{I}_z} \hat{S}_x e^{i\omega at \hat{S}_z \hat{I}_z}$	$(\hat{S}_x - \hat{S}_x \hat{I}_z^2) + \hat{S}_x \hat{I}_z^2 \cos(\omega_a t) - \hat{S}_y \hat{I}_z \sin(\omega_a t)$
2	\hat{S}_y	$e^{-i\omega at \hat{S}_z \hat{I}_z} \hat{S}_y e^{i\omega at \hat{S}_z \hat{I}_z}$	$\hat{S}_y + \hat{S}_y \hat{I}_z^2 \{\cos(\omega_a t) - 1\} - i \hat{S}_x \hat{I}_z \sin(\omega_a t)$
3	\hat{S}_z	$e^{-i\omega at \hat{S}_z \hat{I}_z} \hat{S}_z e^{i\omega at \hat{S}_z \hat{I}_z}$	\hat{S}_z (Sabit)
4	\hat{S}_x^2	$e^{-i\omega at \hat{S}_z \hat{I}_z} \hat{S}_x^2 e^{i\omega at \hat{S}_z \hat{I}_z}$	$\hat{S}_x^2 + i(\hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2) \hat{I}_z^2 \{\sin^2(\omega_a t) - 1\} + \hat{S}_{xy} \hat{I}_z \cos(\omega_a t) \sin(\omega_a t)$
5	\hat{S}_y^2	$e^{-i\omega at \hat{S}_z \hat{I}_z} \hat{S}_y^2 e^{i\omega at \hat{S}_z \hat{I}_z}$	$\hat{S}_y^2 - i(\hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2) \hat{I}_z^2 \{\sin^2(\omega_a t) + 1\} - \hat{S}_{xy} \hat{I}_z \cos(\omega_a t) \sin(\omega_a t)$
6	\hat{S}_z^2	$e^{-i\omega at \hat{S}_z \hat{I}_z} \hat{S}_z^2 e^{i\omega at \hat{S}_z \hat{I}_z}$	\hat{S}_z^2 (Sabit)
7	$\hat{S}_{xy} = [\hat{S}_x, \hat{S}_y]_+$	$e^{-i\omega at \hat{S}_z \hat{I}_z} \hat{S}_{xy} e^{i\omega at \hat{S}_z \hat{I}_z}$	$-i \hat{S}_{xy} - 2i \hat{S}_{xy} \hat{I}_z^2 \sin^2(\omega_a t) - 2(\hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2) \hat{I}_z \cos(\omega_a t) \sin(\omega_a t)$
8	$\hat{S}_{yz} = [\hat{S}_y, \hat{S}_z]_+$	$e^{-i\omega at \hat{S}_z \hat{I}_z} \hat{S}_{yz} e^{i\omega at \hat{S}_z \hat{I}_z}$	$i \hat{S}_{yz} + i \hat{S}_{yz} \hat{I}_z^2 \{1 - \cos(\omega_a t)\} + i \hat{S}_{xz} \hat{I}_z \sin(\omega_a t)$
9	$\hat{S}_{zx} = [\hat{S}_z, \hat{S}_x]_+$	$e^{-i\omega at \hat{S}_z \hat{I}_z} \hat{S}_{zx} e^{i\omega at \hat{S}_z \hat{I}_z}$	$\hat{S}_{zx} + \hat{S}_{yz} \hat{I}_z^2 \{\cos(\omega_a t) - 1\} - \hat{S}_{xz} \hat{I}_z \sin(\omega_a t)$

Çizelge 4.10. Dipolar EPR Hamiltonienini altında spin işlemcilerinin zamana bağlı gelişim ifadelerindeki katsayılar matrisleri. Bu matrisler S = 1 ve I = 1 spin sistemi için oluşturulmuştur

$$\hat{S}_x^2 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\hat{S}_y^2 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\hat{S}_{yz} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\hat{S}_{zx} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$i\hat{S}_{xy}\hat{I}_z = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \hat{S}_{xz}\hat{I}_z^2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\hat{S}_{yz}\hat{I}_z^2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

5. SONUÇ VE ÖNERİLER

Nobel ödüllü fizikçi Richard Feynman'ın kuantum mekanik sistemlerin, 'burada atomlar ve moleküllerdeki bütün etkileşimler akla gelmelidir' hesaplanmasında klasik bilgisayarların yetersiz kalacağını belirttiği 1980 yılından sonra aynı yıl Paul Beioff'un kuantum mekanik sistemlerde geçerli olan birimsel dönüşümlerin aynı zamanda kuantum bilgi işlemede *geçit* olarak kullanılabilmesi önerisinden sonra kuantum bilgi işleme alanında çalışmalar yoğunlaşmıştır. Çalışmalar iki ana yolda ilerlemektedir. Yollardan birisi kuantum bilgi işleminin teorik tabanı, diğeri de kuantum bilgi işleme sistemlerinin gerçekleştirilebileceği fiziksel yapıların belirlenmesidir.

Günümüzde yaygın kullanılan bilgi işleme sistemleri klasik mantık işlemlerine dayanmaktadır. Bu mantık işlemleri yarı iletkenlerden yapılan diyod ve transistörlerin oluşturduğu mikroişlemciler tarafından gerçekleştirilmektedir. Mikroişlemcinin işlem kapasitesinin artması birim alanda daha fazla klasik mantık devresi sığdırmaya bağlıdır. Fakat mikroişlemci teknolojisi fiziksel sınıra dayanmıştır ve birim alana daha fazla mantık devresi sığdırılamamaktadır. İşlem kapasitesi ve hızı, eşdeğer işlemcilerin paralel bağlanarak aynı anda işlemlerin mikroişlemciler tarafından paylaşılarak yapılması yoluyla arttırılmaya çalışılmaktadır.

Mikroişlemciler nanoamper (nA) mertebesinde akımla çalışmaktadır. Örneğin 1 nA akım demek 1 saniye içinde yaklaşık 6×10^9 tane elektronun devreden geçmesi demektir. Bu sayı kuantum bilgi işleme sistemlerini oluşturan muhtemel yapılara göre hala çok yüksektir. Çünkü kuantum bilgi işleme sistemi sayılabilir ölçekte yapılarla gerçekleştirilmeyi öngörmektedir.

Teorik kuantum bilgi işleme alanındaki çalışmalar esas olarak iki durumlu kuantum mekanik sistemlerin oluşturduğu kübit sistemler üzerine oturmaktadır ve bu alanda oldukça fazla mesafe alınmıştır. Bundan sonra ağırlık kuantum bilgi işleminin gerçekleştirilebileceği fiziksel sistemlere verilmektedir.

Bir protonun (hidrojen çekirdeği) spini $1/2$ 'dir ve $1/2$ ve $-1/2$ olmak üzere iki kuantum durumu, yani kübit sistem oluşturur. Proton spinini esas alan nükleer

manyetik rezonans (NMR) spektroskopisi, özellikle spin sistemlerinin pulslu NMR spektroskopisi tarafından kolay manipülasyonu nedeniyle spin 1/2 sistemlerin, yani kübit sistemlerin kuantum bilgi işlemede kullanılması alanında umut verici sonuçlar üretmektedir.

Elektron spinini de 1/2 değere sahiptir ve tek bir elektron da tıpkı proton gibi kübit sisteme taban oluşturur. Elektron spinini yanında bu eşlenmemiş elektronla etkileşme halindeki eşlenmemiş komşu elektron ve çekirdeklerin spinini üzerine kurulu olan elektron paramanyetik rezonans (EPR) spektroskopisi de tıpkı NMR gibi kuantum bilgi işleme için değerlendirilebilecek fiziksel sistemlere esas oluşturmaktadır. NMR spektroskopisi radyo frekans bölgesinde çalışırken EPR spektroskopisi mikrodalga bölgesinde çalışır. Teknik bakımdan benzer olan bu iki spektroskopi esasta çalışma frekansı farklılığı nedeniyle farklı atomik yapıları inceler; yani enerji Hamiltonien terimleri doğal olarak farklıdır.

EPR spektroskopisi eşlenmemiş elektron spininin bir dış kutuplama manyetik alanı içinde çevre çekirdek spinleriyle etkileşmesini inceler. Eğer tek elektron spinini dikkate alınırsa iki kuantum durumu oluşturması nedeniyle kübit sistemlere fiziksel altyapı oluşturur. Bunun yanında birçok yapıda iki eşlenmemiş elektron çiftlenerek triplet ve singlet durumları da oluşturur. Singlet durum, spinini sıfır olduğundan bir yana bırakılarak spinini 1 olan triplet durum göz önüne alınırsa üç durumlu kuantum sisteme, kuantum bilgi işlemedeki ismiyle kutrit sisteme zemin oluşturur. Biradikal ya da radikal çiftleri olarak bilinen yapılarda gözlenen bu spin 1 sistemler ya da kutrit sistemler, kimyasal kararlı biradikaller yanında nanoteknolojinin en önemli çalışma alanlarından olan *endohedral fullerenlerde* de oluşturulabilmektedir. Endohedral fullerenlerde kararlı triplet durumlar yanında üç ya da daha fazla eşlenmemiş elektronun oluşturacağı kararlı yüksek spin durumları oluşturmak mümkün görünmektedir. Bu nedenle yüksek spin sistemleri için kuantum bilgi işleme sistemlerinde teorik altyapının oluşturulması yararlı olacaktır.

Her ne kadar günümüze kadar pulslu NMR ile kuantum bilgi işleminin gerçekleştirilmesinde spin 1/2 yapının oluşturduğu kübit sistemler dikkate alınmışsa da kuantum mekaniği bütün spin sistemleri kapsadığı için kuantum bilgi işlemede tüm spin sistemlerinin değerlendirilebileceği gerçeğinin gözardı edilmemesi gereklidir.

Bu tezde kullanım kolaylığı, verim yüksekliği, aynı anda bir, iki veya daha fazla eşlenmemiş elektronla etkileşen farklı çekirdek spinlerinin oluşturduğu

paramanyetik yapıları aynı cihazla gözleyebilen EPR spektroskopisinin (özellikle pulslu EPR spektroskopisinin) kuantum bilgi işleme için güçlü bir uygulama gerçekleştirme aracı olabileceği ya da en azından kuantum bilgi teorisinin farklı yapılar için uygulanmasına zemin oluşturabileceği varsayılmıştır. Buradan hareketle, üzerinde fazla çalışma yapılan kübit sistemler dışında çalışma sayısı yok denecek kadar az olan *kutrit* sistemler ve bunun fiziksel gerçekleşmesi olan radikal çiftlerinin oluşturduğu triplet durumlar bu çalışmanın konusunu oluşturmaktadır.

5.1 Sonuçlar

Çalışma, birbirini destekleyen ve tamamlayan üç kısımdan oluşmaktadır.

1. Birinci kısımda, kaynaklarda bulunabilen spin 1/2 için kuantum dönme işlemcileri yanında kaynaklarda bulunamayan 1, 3/2, 2, 5/2, 3 ve 7/2 spinlerinin kuantum dönme işlemcilerinin analitik ifadeleri oluşturulmuştur.
2. Çalışmanın ikinci kısmında, EPR spektroskopisinin S=1 (triplet durum) için enerji durumları ve geçişler hem klasik yaklaşımla ve hem de yoğunluk matrisi yaklaşımı ile ele alınmıştır. Çok fazla uygulaması olan S=1 spin sisteminde çalışmada sadelik için triplet sistemi oluşturan iki eşlenmemiş elektronun bağlı olduğu çekirdeklerin spinleri sırasıyla $I_1 = 0, I_2 = 0$; $I_1 = 1, I_2 = 0$ ve $I_1 = 1, I_2 = 1$ alınarak uygulamalar ele alınmıştır.
3. Çalışmanın üçüncü kısmında triplet sistem için temel Hamiltonien terimlerinin puls tepkilerine karşı analitik ifadeleri çarpım işlemci teorisinin kutrit sistemlere uyarlanmasıyla bulunmuştur. Bunun devamında kutrit sistemlere esas oluşturan S=1 ve/veya $I = 1$ için dokuz spin işlemcisinin triplet durum Hamiltonien terimlerine karşı tepkileri ele alınarak tepkilerin analitik ifadeleri belirlenmiştir.

5.2 Bazı Öneriler

Tez çalışması esas itibarıyla kutrit sistemlerde başlangıç düzeyinde işlemleri kapsamaktadır. Bu işlemler ve öneriler bütün bilimsel çalışmalarda olduğu gibi tartışmaya, eksikliklerin ve varsa yanlışlıkların düzeltilmesine açıktır. Çalışmada yapılanlar yanında yapılması planlanan fakat zaman sınırlaması nedeniyle yapılamayan hususlar bulunmaktadır. Bu hususlar aşağıda maddeler halinde belirtilmiştir.

1. Bu çalışmada yapılan 1 ve 7/2 spinler arası dönme işlemcileri dışında EPR spektroskopisinde gözlenebilecek 4 ile 11/2 arası spinler için de dönme işlemcileri türetilir. Bunun için teorik altyapı bu çalışmada hazırlanmıştır.
2. Bu çalışmada gerek yoğunluk matrisi teorisi ile ve gerekse çarpım işlemci teorisi ile sınırlı sayıda spin sistemleri için yapılan puls EPR simülasyonu yanında çekirdek sayıları arttırılabileceği gibi farklı spinler için de uygulama genişletilebilir.
3. Yoğunluk matrisi teorisi ve çarpım işlemci teorisi ile farklı puls dizilerine tepki hesaplaması yapılan biradikallerin gerçek numunelerden alınan spektrumları karşılaştırılarak olay fiziksel olarak da gözlenebilir; böylece hesaplamada olabilecek eksiklik ve muhtemel yanlışlıklar ortaya konulabilir (Bu çalışmada başta pulslu NMR olmak üzere gerçek çalışmalarla birlikte oluşturulan teorik yaklaşımlardan hareket edilerek öneriler sunulmuştur).
4. Bu çalışmada ele alınan triplet durumlar için temel spin Hamiltonien terimlerine çekirdek kuadrupole, spin-yörünge gibi başka terimler ilave edilerek hem puls tepkileri ve hem de triplet durumun ortaya çıkardığı dokuz temel spin işlemcisinin bütün Hamiltonien terimleri altındaki tepkileri bulunabilir.

5.3 Sonsöz

Kuantum bilgi işleme uygulamalarının EPR spektroskopik tekniğinden yararlanılarak gerçekleştirilmesi, NMR spektroskopisinin bu alandaki tecrübelerinden yararlanılarak yapılabilir. Öte yanda EPR spektroskopisinin kullanım kolaylığı, esnekliği ve pratikliği bilgi işlemenin fiziksel gerçekleştirilmesinde iyi bir teknik olarak durması yanında kuantum bilgi işleme teorisinin uygulamasına giden yolda başka tekniklerin kullanılmasında işaret levhaları oluşturabilecektir.

KAYNAKLAR

- Abragam, A. ve Bleaney, B., 1970. Electron Paramagnetic Resonance of Transition Ions, sayfa 456, Clarendon Press-Oxford.
- Arfken, G. B., Weber, H. J., Harris, F. E., 2013. Mathematical Methods for Physicists, Elsevier Publication.
- Alastair, I. M., 2000. Kuantum Fiziği Yanılsama mı Gerçek mi?, Evrim Yayınevi.
- Allard, P. ve Härd., 2001. A Complete Hermitian Operator Basis Set for any Spin Quantum Number, J. Mag. Res., 153 15–21.
- Angerhofer, A., 2002. http://www.esr.ethz.ch/education/pc4-5ws_2002/epr.html.
- Assenheim, H. M., 1966. Introduction to Electron Spin Resonance, Hilgerand Watts Ltd. London.
- Atherton, N. M., 1973. Electron Spin Resonance Theory and Applications, Wiley, Newyork.
- Atherton, N. M., 1979. In Multiple Electron Resonance Spectroscopy (eds. Dorio, M.M ve Freed, J.H.), Plenum Pres, New York, 143-168.
- Aubin, Sheila, MJ., Wemple, Michael, W., Adams, David M., Tsai, Hui-Lien., Christou, G., Hendrickson, David N., 1996. "Distorted Mn IV MnIII 3 Cubane Complexes as Single Molecular Magnets". *Journal of the American Chemical Society* 118 (33).
- Ayabe, K., Sato, K., Nakazawa, S., Nishida, S., Sugisaki, K., Ise, T., Morita, Y., Toyota, K., Shiomi, D., Kitagawa, M., Suzuki, S., Okada, K., Takui, T., 2013. Pulsed Electron Spin Nutation Spectroscopy for Weakly Exchange-Coupled Multi Spin Molecular systems with Nuclear Hyperfine Couplings: A General Approach to Bi- and Triradicals and Determination of Their Spin Dipolar and Exchange Interactions, *Molecular Physics* 111 (18–19) 2767–2787.
- Bain, A. D., 2006. Operator formalisms: An Overview, *Concepts in Magnetic Resonance Part A* Vol. 28A (6) 369-383.
- Bakker, J. W. ve Leeuwen J. van O., 1980. Diller ve Programlama, Yedinci Kolokyumu. Noordwijkerhout, Hollanda: Springer Verlag. ss 632-644. doi : 10.1007/3-540-10003-2_104.
- Barret, M. D., Chiaverfni, J., Schaetz, T., Britton, J., Itano, W. M., Jost, J. D., Knill, E., Langer, C., Leibfried, D., Ozerf, R., Wineland, D. J., 2004. Deterministic quantum teleportation of atomic qubits, *Nature* 428 737.
- Bell, S. J., 1964. On the Einstein-Podolsky-Rosen paradox, *Physics* 1, 195-200.
- Bellac, M., 2006. A Short Introduction To Quantum Information and Computation (Fransızcadan tercüme), Cambridge University Press.

- Benioff, P., 1980. The computer as a physical system: a microscopical quantum mechanical Hamiltonian model of computers as represented by Turing machines, *J. Stat. Phys.* 22 563.
- Bennett, C. H., 1973. Logical reversibility of computation, *IBM J. Res. Develop.* 17 525.
- Boas, M. L., 2006. *Mathematical Methods for the Physical Sciences*, Wiley and Sons.
- Bouwmeester, D., Wan, J. P., Mattle, K., Eibl, M., Weinfurter, H., Zeilinger, A., 1997. Experimental quantum telepor-station, *Nature* 390 575.
- Blatt, R. ve Wineland D. J., 2008. "Tuzak atom iyonlarının durumları karışmış".*Nature* 453 (7198):10081014 Bibcode: 2008 Natur.453.1008 B. doi : 10.1038/nature07125 . pmid 18.563.15.
- Carrington, A., Mclachlan, A. D., 1969. *Introductionton Magnetic Resonance with Applications to Chemistry and Chemical Physics*.
- Carrington, A., 1974. *Microwave Spectroscopy of Free Radicals*, Academic Press, London-New York.
- Christou, G., Gatteschi D., Hendrickson D. N. ve Sessoli R., 2000. Single-Molecule Magnets, *mrs bulletin/november*, 66-71.
- Cory, D. G., Fahmy, A. F., Havel, T. F., 1997. Ensemble quantum computing by NMR spectroscopy, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 94 1634.
- Cveticanin, J., Djustebek, J., Veljkovic, M., Velickovic, S., Djordjevic, V., Neskovic, O., 2006. Endohedral fullerenes of different elements, *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials* Vol. 8, No. 5,1892-1894.
- Çakmak, S., 2011. Bazı Endohedral Fullerenlerde Kuantum Bilgi İşleme ve Durum Tomografisinin İncelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Samsun, 299217.
- Das, R., Mahesh, T. S., Kumar, A., 2003. Efficient quantum-state tomography for quantum-information processing using a two-dimensional Fourier-transform technique, *Physical Review A*, 67, 062304(2003).
- Davies, E. R., 1974. A New ENDOR Technique, *Phys Lett.*, 47A, 1.
- Dermez, R., 2005. Kuantum Bilgi Teorisinde Atomik ve Fotonik Dolaşıklık, Doktora Tezi, Osmangazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Eskişehir, 198167.
- Deutsch, D., 1985. Quantum theory, the Church-Turing principle and the universal quantum computer, *Proceedings of the Royal Society of London A* 400, 97-117
- Deutsch, D., Jozsa, R., 1992. Rapid Solution of Problems by Quantum Computation, *Mathematical and Physical Sciences*, Volume 439(1907), 553-558.
- DiVincenzo, P. D., 2000. The Physical Implementation of Quantum Computation, *Fortschritte der Physik*, 48, 771-784 (2000:quant-ph/0002077).
- Ege, B., 2012. Kuantum Mekaniğinden Kuantum Bilgisayarlarına, *Bilim ve Teknik*, 539, 12-14.
- Einstein, A., Podolsky, B., Rosen, N., 1935. Can quantum mechanical description of physical reality be considered complete?, *Phys. Rev.* 47, 777.

- Fatila, E. M., Cleřac, R., Rouzières, M., Soldatov, D. V., Jennings, M. ve Preuss, K. E., 2013. High-Spin Ribbons and Antiferromagnetic Ordering of a MnII-Biradical-MnII Complex, *J. Amer. Chem. Soc.*, 13298–13301
- Feher, G., 1956. Observation of Nuclear Magnetic Resonance Via the Electron Spin Resonance Line, *Phys. Rev.*, 103, 834-836.
- Feynman, R. P., 1982. Simulating Physics with Computers, *International Journal of Theoretical Physics*, Vol. 21, Nos. 6/7
- Feynman, Richard., 1985. "Chapter 1". QED: The Strange Theory of Light and Matter. Princeton University Press. p. 6. ISBN 978-0-691-12575-6.
- Feynman, R., 1986. Quantum Mechanical Computers, *Foundation of Physics*, 16(6) 507.
- Feynman, R. P., Pines D. A., Hey J. G., 2000. Feynman Lectures on Computation, Westview Press.
- Gavin, W. M., 2005. Designing a Quantum Computer based on Pulsed Electron Spin Resonance (doktora tezi), Wolfson College, University of Oxford.
- Gençten, A. ve Şaka, İ., 2006. A Complete Product Operator Theory For IS ($I = 1/2$, $S = 1$) Spin System and Application To dept-hmqc nmr experiment, *Molecular Phy.*, 104, 18,2983-2989.
- Gershenfeld, N. A., Chuang, I. L., 1997. Bulk Spin-Resonance Quantum Computation, *Science* Vol. 275, 5298, 350-356.
- Grover, L. K., 1997. Quantum mechanics helps in searching a needle in a haystack, *Phys. Rev. Lett.* 79 325.
- Gruska, J., 1999. Quantum Computing, McGraw-Hill Publishing Company, UK, 419 s.
- Gün, A., 2005. NMR Kuantum Bilgisayarlarında IS ($I = 3/2$, $S = 3/2$) Spin Sistemi için Swap Mantık Kapısının Oluşturulması ve Uygulamaları, Yüksek Lisans Tezi, Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Samsun, 116 s.
- Gün, A., 2011. SI ($S=3/2$, $I=1/2$ ve $3/2$) spin sistemlerinde kuantum dolanıklık ve kuantum iletişimdeki bazı uygulamaları, Doktora Tezi, Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Samsun, 299255.
- Haken, H. ve Wolf H. C., Brewer W. D., 2005. Physics of Atoms and Quanta, Springer.
- Harriman, J. E., 1978. The Theoretical Foundations of Electron Spin Resonance, Academic Pres, New York.
- Harris, E. A., 1971. EPR of Mn^{2+} pairs in MgO and CaO., *J. Phys. C: Solid State Phys.*, Vol. 5, 338–352.
- Hoffman, B. M., 2003. Electron-Nuclear Double Resonance Spectroscopy (and Electron Spin-Yankı Envelope Modulation Spektroskopy) in Bioinorganic Chemistry, *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 100, 7, 3575-3578.
- Holzscheite, M. H., 2002. Ion-Trap Quantum Computation, Los Alamos Science Number 27.

- Horadam, K. J., 2007. Hadamard Matrices and Their Applications, Princeton University Press.
- Hyde, J. S., Maki, A. H., 1964. ENDOR of a Free Radical in Solution, *The Journal of Chemical Physics*, 40, 10, 3117-3118.
- Imre, S., Balazs, F., 2005. Quantum Computing and Communications An Engineering Approach, JhonWiley, 279 s, England.
- Jie, Z., Yao–Min, D. ve Hai–Rui, W., 2009. Realization of Two–Qutrit Quantum Gates with Control Pulses, *Commun. Theor. Phys.* 51 653–658.
- Jones, J. A., 2001. NMR Quantum Computation, *Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy* 38, 325-360.
- Jones, J. A., 2011. Quantum Computing with NMR, *Progress in Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy* 59, 91–120
- Ju, C., Suter, D., Du, J., 2007. Two-qubit gates between noninteracting qubits in endohedral fullerene based quantum computation, *Physics Review A*, 75, 012318(2007).
- Kasthuriengan, S., Soundar arajan, S., 1975. Electron Paramagnetic Resonance of Vanadyl Ion in $K_2Zn(SO_4)_2 \cdot 6H_2O$ and $K_2Mg(SO_4) \cdot 6H_2O$, *Journal of Magnetic Resonance*, 19, 357-364.
- Kim, T. H., Howlader, M. M. R., Itoh, T. ve Suga, T., 2003. Room temperature Cu–Cu direct bonding using surface activated bonding method, *J. vac. Sci. Technol. A* 21(2) 449–453.
- Kirk, L. K. ve Shultz, D. A., 2013. Transition metal complexes of donor–acceptor biradicals, *Coordination Chemistry Reviews* 257, 218–233.
- Kroto, H. W. , Heath, J. R., O. Brien, S. C., Curl, R. F., Smalley R. E., 1985. C_{60} : Buckminsterfullerene, *Letters To Nature*, Vol 338 15.
- Kurak, E. T., 2006. Bazı Puls EPR Deneylerinin Çarpım İşlemcisi Kuramıyla İncelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Samsun, 185579.
- Kurreck, H., Kirste, B. ve Lubitz, W., 1984. ENDOR Spectroscopy-A Promising Technique for Investigating the Structure of Organic Radicals, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, 23, 3, 173-194.
- Kurreck, H., Kirste, B. ve Lubitz, W., 1988. Electron Nuclear Double Resonance Spectroscopy of Radicals in Solution, VCH Publishers, Newyork, 374p.
- Lavor, C., Manssur, L. R. U., Portugal, R., 2003. Grover's Algorithm: Quantum Database Search, quant-ph/0301079, Cornell University Library.
- Linden, N. Barjat, H., Kupce Ę., Freeman, R., 1999. How to Exchange Information Between Two Coupled Spins: The Universal Swap Operation, *Chem. Phy. Lett.*, 307 198-204.
- Malinovsky, V. S., Rudin S., 2012. Geometric Single-Qubit Gates for an Electron Spin in a Quantum Dot, *International Journal of Quantum Chemistry* 112, 3744–3749.
- Mashkovtsev, R. I., Pan Y., 2011. Biradical states of oxygen–vacacncy defects in a quartz: centers E_2'' ve E_4'' , *Phys Chem Minerals*, 38 647–654.

- McMahon, D., 2008. Quantum Computing Explained, Wiley Interscience.
- Mehring, M., Scherer, W., Weidinger, A., 2004. Pseudoentanglement of Spin States in the Multilevel N@C₆₀ System, Physical Review Letters, Volume 93, Number 20.
- Mermin, N. D., 2007. Quantum Computer Science An Introduction, Cambridge University Press, 220 s, Cambridge.
- Messiah, A., 1962. Clebsch–Gordan (C.G.) Coefficients and 3-j Symbols, Quantum Mechanics, Vol. 2.
- Miller, W., 1987. Symmetry Groups and Their Applications, Academic Press, 159–161.
- Mims, W. B., 1965. Pulsed ENDOR Experiment, Proc. Roy. Soc., 283, 452.
- Morley, G. W., 2005. Designing a Quantum Computer based on Pulsed Electron Spin Resonance, Doktora Tezi, Wolfson College, Oxford University.
- Morrison, M. A. ve Parker G. A., 1987. A Guide to Rotations in Quantum Mechanics, Aust. J. Phys. 40 465–497.
- Möbius, K., Lubitz, W. ve Plato, M., 1989. In Advanced EPR (eds. Hoff, A.J), Elsevier, Amsterdam, 441-494.
- Möbius, K., 1998. In Foundations of Modern EPR (eds. Eaton, G.R, Eaton, S.S and Salikhov, K.M.), World Scientific, Singapore, 557-577.
- Nakahara, M., Ota, Y., Rahimi, R., Kondo, Y., Tada-Umezaki, M., 2007. Molecular Realization of Quantum Computing, World Scientific Publishing (Google books : books.google.com.tr/books, isbn=9812838686).
- Nakahara, M. ve Ohmi, T., 2008. Quantum Computing, From Linear Algebra To Physical Realizations, Taylor and Francis Books.
- Nakazawa, S., Nishida, S., Ise T., Yoshino, T., Mori, N., Rahimi, R. D., Sato, K., Morita, Y., Toyota, K., Shiomi, D., Kitagawa, M., Hara, H., Carl, P., Höfer, P. ve Takui, T., 2012. A synthetic two-spin quantum bit: g-engineered exchange-coupled biradical designed for controlled-NOT gate operations, Angew Chem. Int. Ed. 51, 9860–9864.
- Neilsen, M. A., Knill, E., Laflamme, R., 1998. Complete Quantum Teleportation Using Nuclear Magnetic Resonance, Letterstonature, 396, 52-55.
- Nielsen, M. A. ve Chuang, I. L., 2010. Quantum Computation and Quantum Information; 10th Anniversary Edition, Cambridge University Press.
- Oliveira, I. S., Bonagamba, T. J., Sarthaur, S. R., Freitas, J. C. C., deAzevedo, E. R., 2007. NMR Quantum Information Processing, Elsevier Publishing.
- Ölmez, H., Yılmaz, V. T., 2010. Anorganik Kimya, 5. Baskı, MKM yayıncılık, Bursa.
- Radtke, T. ve Fritzsche, S., 2006. Simulation of n-qubit Quantum systems. II. Separability and entanglement, Elsevier, Germany.
- Ramanathan, C., Boulant, N., Chen, Z., Cory, DG. Chuang, I ve Steffen, S., 2004. NMR Quantum Information Processing, Quantum Information Processing 3(1-5), 15-44

- Rao, K. V. S.; Sastry, M. D., Venkateswarlu, P., 1968. Electron Paramagnetic Resonance Studies of VO^{2+} Doped in $\text{KAl}(\text{SO}_4) \cdot 12\text{H}_2\text{O}$ and $\text{NH}_4\text{Al}(\text{SO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ Single Crystals, *The Journal of Chemical Physics*, 49, 4984-4988.
- Rieger P. H., 2007. *Electron Spin Resonance, Analysis and Interpretation*, RCS Publishing, USA.
- Ruiz–Molina, D., Christou, C. ve Hendrickson, D. N., 2000. Single Molecule Magnets, *Mol. Cryst. and Liquid Cryst.*, 343, 17–27.
- Rule, G. S. ve Hitchens, T. K., 2006. *Fundamentals of Protein NMR Spectroscopy (Focus On Structural Biology, Volume 5, Editor Rob Kaptein)*, Springer, Netherlands.
- Sato, K., Rahimi, R., Mori, N., Nishida, S., Toyota, K., Shiomi, D., Morita, Y., Ueda, A., Suzuki, S., Furukawa, K., Nakamura, T., Kitagawa, M., Nakasuji, K., Nakahara, M., Hara, H., Carl, P., Höfer, P., Takui, T., 2007. Implementation of molecular spin quantum computing by pulsed ENDOR technique: Direct observation of quantum entanglement and spinor, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 40(2) 363–366.
- Satyanaravana, N., 1986. EPR and Electronic Absorption Studies of Vanadyl Ions in The $\text{Cd}(\text{NH}_4)_2(\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ single Crystals, *J. Phys. Chem. Solids*, 47, 55-58.
- Saunders, M., Jimenez-Vazquez, H. A., Cross, R. J., Mroczkowski, S., Gross, M. L., Gibling, D. E. Porada, R. J., 1994. Incorporation of Helium, Neon, Argon, Krypton, and Xenon into Fullerenes Using High Pressure, *J. Am. Chem. Soc.*, 1994, 116 (5), pp 2193–2194.
- Scherer, W., Mehring, M., 2008. Entangled electron and nuclear spin $N@C_{60}$ states in Density matrix tomography, *The Journal of Chemical Physics*, 128,052305.
- Schweiger, A., 1991. *Pulsed Electron Spin Resonance Spectroscopy: Basic Principles, Techniques and Examples of Applications.*, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, 30, 265- 292.
- Schweiger, A. ve Jeschke, G., 2001. *Principles of Pulse Electron Paramagnetic Resonance*, Oxford University Press, New York, 578p.
- Serway, R. A. ve Beichner, R. J., 2002. *Fen ve Mühendislik için Fizik, Cilt-2, Beşinci baskıdan çeviri*, Palme Yayıncılık,.
- Shor, P. W., 1994. Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring, in: *Proc. 35th Annual Symp. Found. Comput. Sci.* IEEE Press, Los Alamitos.
- Shor, P. W., 1995. Polynomial-Time Algorithms for Prime Factorization and Discrete Logarithms on a Quantum Computer, *arXiv.org quant-ph arXiv:quantph/9508027*.
- Sorensen, O. W., Eich, G. W., Levitt, M. H., Bodenhausen, G., Ernst, R. R., 1983. Product operator formalism for the description of NMR pulse experiments. *Prog. NMR Spec.*, 16, 163–192.
- Stolze, J., Suter, D., 2004. *Quantum Computing A Short Course from Theory to Experiment*, Wiley, 244 s, Mörlenbach.

- Szöllősi, F., 2011. Construction, Classification and Parametrization of Complex Hadamard Matrices, Doktora Tezi, Central European University, Budapest, Hungary.
- Şaka, İ., 2007. Çarpım İşlemci Teorisinin Spin-1 İçeren Sistemlere Genelleştirilmesi ve Bazı Çoklu Kuantum-NMR deneylerine Uygulamaları, Doktora Tezi, Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Samsun, 222388.
- Tadej, W. ve Zyczkowski K., 2006. A Concise Guide to Hadamard Matrices, Open System Inf. Dyn. 13 133-177.
- Takahiro, M., Katori, M. ve Konno, M., 2007. Wigner Formula for Rotation Matrices and Quantum Walks, Phys. Rev. A76 1-15.
- Tapramaz, R., 1991. Kükürt–Oksi, Metil Sülfenil ve Arsenat Radikallerinin Elektron Spin Rezonans Spektroskopisi ile İncelenmesi, Doktora Tezi, Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Samsun, 15374.
- Tapramaz, R., Karabulut, B., Köksal, F., 2000. EPR Spectra of VO²⁺ and Cu²⁺ ionin Diammonium D-tartrate Single Crystals, Journal of Physics and Chemistry of Solids, 61, 1367-1372.
- Toffoli, T., 1980. Teknik Rapor MIT/LCS/TM-151 "Ters işlem" Diller ve Programlama, Yedinci Kolokyumu. Noordwijkerhout, Hollanda: SpringerVerlag. ss 632-644. doi : 10.1007/3-540-10003-2_104.
- Turgut, S., 2003. Şu garip kuantum-2, Bilim Teknik, 477, 38-15.
- Turing, A. M., 1937. On Computable Numbers, with an Application to the Entscheidungs problem, Proc. London Math. Soc. Ser. 2 42, 230-265, Reprinted in The Undecidable (Ed. M. David). Hewlett, NY: Raven Press, 1965.
- Tuzun, R. E., Burkhardt, P. ve Secrets, D., 1998. Accurate Computation of Individual and Tables of 3-j and 6-j Symbols, Computer Physics Commun., 112, 112–148.
- Türkpençe, D., 2006. Kuantum Mekaniğine Felsefi Bakış, Yüksek Lisans Semineri, Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Samsun, 38 s.
- Türkpençe, D., 2007. Nmr kuantum bilgisayarlarında iki kutritlik bazı mantık kapılarının oluşturulması ve uygulamaları, Yüksek Lisans Tezi, Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Samsun, 185643.
- Türkpençe, D., 2013. Sıvı hal NMR kuantum bilgisayarıyla bazı sistemlerin kuantum simülasyonu, Doktora Tezi, Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Samsun, 341513.
- Üstün, T., 2011. Kuantum Nokta Temelli Bellek Yapılarda Kuantum Noktalarının Elektronik Yapısının Derin Seviye Geçiş Spektroskopisi İle Belirlenmesi. Yüksek Lisans Tezi, Ankara Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara, 299592.
- Van Doorslaer, S. ve Schweiger, A., 2000. One-and Two-Dimensional Pulse Electron Paramagnetic Resonance Spectroscopy: Concepts and Applications, Naturwissenschaften, 87, 245-255.
- Vasanta, K., Angeli Mary, P. A., Dhanuskodi, S., 2002. EPR and Optical Absorption Studies of VO(II) Doped Zinc Tris Thiourea Sulfate, Spectrochimica Acta Part A, 58, 311-316.

- Venkataraman, B., 1996. Five Decades of India, Indian Journal of pure and Applied Physics, 34, 273-305.
- Viswanath, A. K., Radhakrishna, S., 1991. EPR and Optical Properties of Impurity Centers in Low-Symmetry Crystals, J. Phys: Chem. Solids, 52, 227-248.
- Weil, J. E., Bolton, J.R., Wertz, J.E., 1993. Electron Paramagnetic Resonance, Canada.
- Willmott, C. M., 2011. On Swapping the States of Two Qudits, International Journal of Quantum Information 9(6) 1511-1517.
- Yadav, B. C. ve Kumar, R., 2008. Structure, properties and applications of fullerenes, International Journal of Nanotechnology and Applications 2(1) 15–24.
- Yerli, Y., Karadağ, A. ve Köksal, F., 2002. EPR of Cu^{2+} in Cadmium Saccharin $[\text{Cd}(\text{sac})_2(\text{H}_2\text{O})_4] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ and $[\text{Cd}(\text{sac})_2(\text{HydEt-en})_2]$ Complexes in Single-Crystal and Powder Forms. Appl. Magn. Reson., 23, 43-49.
- URL-1:<http://www.kuark.org/2011/05/spintronik-gelecegin-elektronigi-mi/> (Ziyaret tarihi: 13 Nisan 2014).
- Url-2:www.heart-c704.uibk.ac.at/publications/dissertation/reibc_diss.pdf
Preparation of Entangled States and Quantum Teleportation with Atomic Qubits, (Ziyaret tarihi: 13 Nisan 2014).
- Url-3:Aktosun, A., Işık Hızından Daha Hızlı PC Mümkün mü?, ShiftDelete. Neth http://shiftdelete.net/ışık-hızından-daha-hızlı-pc-mümkün-dolanıklık_19022-s2.html(Ziyaret tarihi: 16 Mayıs 2014).
- Url-4:Ardavan, A., Rival O., Morton, J. J. L., Blundell, S. J., Tyryshkin, A. M., Timco, G. A., ve Winpenny, E. P., 2008. Will spin-relaxation times in molecular magnets permit quantum information processing? <http://arxiv.org/pdf/quant-ph/0609143.pdf>.(Ziyaret tarihi: 19 Mayıs 2014).

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Mehpeyker KOCAKOÇ

E-Posta : mpeyker@gmail.com

Lisans : Fizik(2001-2005)

Yüksek Lisans : Fizik(2006-2009)

Mesleki Deneyim ve Ödüller: Çukurova Üniversitesi Öğretim Görevlisi (2012-..)
2211-C KodluTübitak Öncelikli Alanlar Doktora
Teşvik Bursu (Nisan 2013-Ocak 2015)